

Theoretische Festkörperphysik I

Elementare Grundbegriffe

Franz Wegner
Institut für Theoretische Physik
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Vorbemerkung

Dieses Skriptum gibt eine Einführung in einige Grundbegriffe der theoretischen Festkörperphysik. Es vereinigt einige theoretische Aspekte der Vorlesung "Physik VI" sowie der einstündigen Vorlesung "Theoretische Festkörperphysik I".

Literatur

- S. Hunklinger / C. Enss, Festkörperphysik, Skriptum
- O. Madelung, Festkörpertheorie I+II, Heidelberger Taschenbücher; Introduction to Solid-State Theory, Springer
- C. Kittel, Einführung in die Festkörperphysik, Oldenbourg; Introduction to Solid State Physics, John Wiley
- C. Kittel, Quantentheorie der Festkörper, Oldenbourg; Quantum Theory of Solids, John Wiley
auch:
- W. Ludwig, Festkörperphysik I,II, Akad. Verlagsges. Frankfurt
- J. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Cambridge Univ. Press
- J. Ziman, Electrons and Phonons, Oxford Clarendon Press
- N. Ashcroft, D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinehart, Winston; jetzt auch in deutsch

Inhalt

Übersicht Skripten Hunklinger/Enss - Wegner	4
1 Born-Oppenheimer-Huang-Näherung	5
2 Periodische Gitter: Deckoperationen	7
2.a Translationen	7
2.b Allgemeine Deckoperationen	7
2.c Gruppeneigenschaften, Raumgruppe und Punktgruppe	8
3 Reziprokes Gitter und Streuung	9
3.a Etwas elastische Streuung	9
3.b Gitter und reziprokes Gitter	10
3.c Streuung am Gitter	11
4 Phononen in harmonischer Näherung	12
4.a Bewegungsgleichungen	12
4.b Symmetrien	12
4.c Lösung der Bewegungsgleichungen	13
4.d Periodische Randbedingungen	14
5 Kontinuumstheorie	15
5.a Mikroskopische Kontinuumstheorie	15
5.b Verzerrungs- und Spannungstensor	17
5.b.α Verzerrungstensor	17
5.b.β Spannungstensor	17
5.c Akustische Äste	18
5.c.α Spezialfall: Kubischer Kristall	18
5.d Ergänzungen	19
5.d.α Lagrange-Formulierung	19
5.d.β Kristall unter äußerer Spannung	20
6 Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen	22
6.a Diagonalisierung und Normalkoordinaten	22
6.b Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren	23
7 Phononenstatistik und spezifische Wärme	24
7.a Bose-Statistik	24
7.b Energie und spezifische Wärme I	24
7.c Zustandsdichte	25
7.d Debye-Frequenz und Phononen-Energie II	25
8 Neutronen-Streuung und Debye-Waller-Faktor	27
9 Polaritonen	31
9.a Lagrange-Funktion	31
9.b Hamilton-Operator und Quantisierung	33
10 Unabhängige Elektronen	36
10.a Freies Elektronen-Gas	36
10.b Fermi-Statistik	36
10.c Zustandsdichte, spez. Wärme und chemisches Potential	37

11 Elektronen im periodischen Potential	40
11.a Bloch-Theorem, Bänder	40
11.b Fast freie Elektronen	41
11.c Tight-binding Näherung	42
11.c.α Das Bandspektrum von Diamant und ein nützlicher Satz über die Eigenwerte von Matrizen	43
11.d Wannier-Funktionen	44
12 Einige Eigenschaften von Bändern	45
12.a Impuls und effektive Massen	45
12.b Symmetrien	46
12.b.α Folgerungen aus der Punktgruppe	46
12.b.β Spezielle Symmetrie-Richtungen	46
12.c Spin-Bahn-Kopplung und Zeitumkehr-Invarianz	47
12.d Inversion und Zeitumkehrinvarianz	47
13 Quanten-Halleffekt	49
13.a Freie Elektronen im Magnetfeld und im elektrischen Feld	49
13.a.α Wiederholung aus der Mechanik und Bewegungsgleichungen	49
13.a.β Quantenmechanische Behandlung	49
13.b Ganzzahliger Halleffekt	50
13.c Gebrochenzahliger quantisierter Halleffekt	52
13.d Zyklotron-Bewegung	53
14 Magnonen	55
14.a Ferromagnet	55
14.a.α Spinwellen-Näherung	55
14.a.β Behandlung mit der Holstein-Primakoff-Transformation	56
14.a.γ Spezifische Wärme und Magnetisierung	57
14.b Antiferromagnet	58
14.b.α Spinwellen-Näherung	58
14.b.β Holstein-Primakoff-Transformation	59
14.b.γ Spezifische Wärme und Untergittermagnetisierung	60

Übersicht über die Themen im Skriptum von Hunklinger und Enss und in diesem Skriptum

Hier wird angegeben, welche Themen aus dem Skriptum von Hunklinger und Enss in diesem Skriptum und im Elektrodynamik-Skriptum behandelt werden. Dabei können sich der jeweilige Umfang und der jeweilige Überlapp sehr unterscheiden.

Hunklinger-Enss	Wegner	Wegner
1.3	Periodische Gitter: Deckoperationen	2
2.2	Etwas elastische Streuung	3.a
2.3	Gitter und reziprokes Gitter	3.b
2.4	Streuung am Gitter	3.c
3.4	Born-Oppenheimer Näherung	1
5	Born-Oppenheimer Näherung	1
5.1	Kontinuumstheorie	5
5.2, 5.3	Phononen in harmonischer Näherung	4
5.4	Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen	6
5.4	Neutronen-Streuung und Debye-Waller Faktor	8
5.5	Phononenstatistik und spezifische Wärme	7
7.1, 7.2	Unabhängige Elektronen	10
7.3, 7.4	Elektronen im periodischen Potential	11
8.1	Impuls und effektive Massen	12.a
8.1	Spin-Bahn-Kopplung und Zeitumkehr-Invarianz	12.c
8.4	Quanten-Halleffekt	13
10.2, 10.3	Magnonen	14
11.1	Dielektrizitätsk. nach Clausius und Mosotti	E-Dyn. 6.d
11.2	Polaritonen	9
11.2, 11.4	Elektromagn. Wellen in homogenen Leitern	E-Dyn. 17

1 Born-Oppenheimer-Huang-Näherung

Siehe Hunklinger-Enss: 3.4 Kovalente Bindung beim Wasserstoffatom S. 79

Siehe Hunklinger-Enss: 5 Gitterdynamik: Einleitung S. 125

In der Festkörperphysik betrachtet man in der Regel Schwingungsanregungen (Phononen) und elektronische Anregungen als Elementar-Anregungen, zu denen dann weitere in der Regel kollektive Anregungen kommen können.

Begründet wird diese Aufteilung durch die Born-Oppenheimer-Näherung, die auch adiabatische Näherung genannt wird. Man fasst zunächst Atomkerne und die inneren Elektronen zu Ionen zusammen. (Letztere sieht man als annähernd starr an. Soweit notwendig werden die Polarisierbarkeit und die magnetischen Momente der Ionen berücksichtigt.)

Für die starren Ionen und die äusseren Elektronen hat man den Hamilton-Operator

$$H = H_{\text{el}} + H_{\text{ion}} + H_{\text{el-ion}} = T + V \quad (1.1)$$

$$H_{\text{el}} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (1.2)$$

$$H_{\text{ion}} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_i^2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\text{ion}}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \quad (1.3)$$

$$H_{\text{el-ion}} = \sum_{i,j} V_{\text{el-ion}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j). \quad (1.4)$$

Dabei werden die Ortskoordinaten und die Massen der Ionen mit \mathbf{R} und M_i , die der äusseren Elektronen mit \mathbf{r} und m bezeichnet. Da die Massen der Ionen erheblich größer sind als die der Elektronen, vernachlässigt man zunächst die kinetische Energie der Ionen. Dann werden die Ortskoordinaten der Ionen gute Quantenzahlen und man löst für vorgegebene \mathbf{R}_i das Elektronenproblem

$$\left\{ - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_j^2} + V(\dots \mathbf{R}_i \dots; \dots \mathbf{r}_j \dots) \right\} \psi_\alpha(\dots \mathbf{R}_i \dots; \dots \mathbf{r}_j \dots) = E_\alpha(\dots \mathbf{R}_i \dots) \psi_\alpha(\dots \mathbf{R}_i \dots; \dots \mathbf{r}_j \dots). \quad (1.5)$$

Die vollständige Schrödinger-Gleichung lautet dann für die Wellenfunktion

$$\Psi = \sum_\alpha \phi_\alpha(\dots \mathbf{R}_i \dots) \psi_\alpha(\dots \mathbf{R}_i \dots; \dots \mathbf{r}_j \dots)$$

$$H\Psi = - \sum_{\alpha,i} \frac{\hbar^2}{2M_i} \left(\frac{\partial^2 \phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2} \psi_\alpha + 2 \underbrace{\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i} \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i}} + \phi_\alpha \frac{\partial^2 \psi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2} \right) + \sum_\alpha E_\alpha \phi_\alpha \psi_\alpha = E \sum_\alpha \phi_\alpha \psi_\alpha \quad (1.6)$$

Würden die Terme, die durch die geschwungene Klammer gekennzeichnet sind, fehlen, so bliebe die Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktion ϕ_α

$$- \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \frac{\partial^2 \phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2} + E_\alpha(\dots \mathbf{R}_i \dots) \phi_\alpha(\dots \mathbf{R}_i \dots) = E \phi_\alpha(\dots \mathbf{R}_i \dots). \quad (1.7)$$

Dabei ist E_α das neue effektive Ionenpotential. In dieser Näherung separiert die Gleichung in eine für die Elektronen (ψ_α) und eine für die Gitterschwingungen (ϕ_α).

Der mit der Klammer bezeichnete Anteil in (1.6) stellt die Elektron-Phonon-Wechselwirkung dar.

Die zu Grunde liegende Vorstellung ist, dass sich die Elektronen rasch bewegen und damit den Ionen adiabatisch folgen. Da $m/M_p = 1/1836 \ll 1$, erfolgt die Bewegung der Elektronen und der Ionen auf zwei verschiedenen Zeitskalen.

Jedoch seien zwei Probleme dieser Näherung erwähnt:

- 1) Die ψ_α sind sehr schwer zu bestimmen, insbesondere wenn die \mathbf{R}_i kein reguläres Gitter bilden. Dazu kommt, dass es für spezielle Werte der \mathbf{R}_i Entartungen gibt.
- 2) Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung trägt meist nur wenig zur Grundzustandsenergie bei. Aber sie ist trotzdem für viele Festkörper-Effekte wichtig. (Peierls-Instabilität, Supraleitung, el. Leitfähigkeit).

Das gilt vor allem dann, wenn die wesentlichen Elektronen-Anregungsenergien in der Größenordnung der Phononen-Energien sind.

Als Ausgangspunkt hat sich die näherungsweise Entkopplung von Phonon- und Elektron-Freiheitsgraden sehr bewährt.

2 Periodische Gitter: Deckoperationen

Siehe Hunklinger-Enss: 1.3 Struktur der Kristalle S. 8-24

2.a Translationen

Ein periodisches Gitter geht unter Translationen um drei Vektoren $\mathbf{a}^{(1)}$, $\mathbf{a}^{(2)}$, $\mathbf{a}^{(3)}$, die nicht komplanar sind, in sich über. Dadurch entsteht ein Bravaisgitter oder primitives Gitter, das heißt ein Punktgitter, dessen Gitterpunkte sich schreiben lassen

$$\mathbf{R}^{(n)} = n_1 \mathbf{a}^{(1)} + n_2 \mathbf{a}^{(2)} + n_3 \mathbf{a}^{(3)} \quad (2.1)$$

mit ganzen Zahlen n_1, n_2, n_3 . Falls die $\mathbf{a}^{(i)}$ so gewählt sind, dass sämtliche Translationen, die das Gitter mit sich zur Deckung bringen, durch $\mathbf{R}^{(n)}$ darstellbar sind, spricht man von primitiven Gittervektoren. Diese $\mathbf{a}^{(i)}$ spannen eine Elementarzelle auf.

Unter einer Wigner-Seitz-Zelle versteht man alle Punkte, die einem Gitterpunkt am nächsten sind. Auf diese Weise entsteht eine Einteilung des Raumes in lauter gleiche Gitterzellen. Beispiele siehe Hunklinger, S. 24, Abb. 1.26 und 1.27, Madelung I, S. 60, Fig. 2.11 und 2.12. Ihr Volumen ist das der Elementarzelle.

Daneben verwendet man auch die (konventionelle) Einheitszelle, ein ganzzahliges Vielfaches der Elementarzelle. Das Volumen der Einheits- oder Elementarzelle ist

$$V_z = |(\mathbf{a}^{(1)} \times \mathbf{a}^{(2)}) \cdot \mathbf{a}^{(3)}|. \quad (2.2)$$

Innerhalb einer Einheits- oder Elementarzelle befinden sich r Atome $i = 1, \dots, r$, deren Orte man durch

$$\mathbf{R}_{n,i} = (n_1 + s_{1,i})\mathbf{a}^{(1)} + (n_2 + s_{2,i})\mathbf{a}^{(2)} + (n_3 + s_{3,i})\mathbf{a}^{(3)} \quad (2.3)$$

angibt.

Tabelle einiger kubischer Gitter mit einer Einheitszelle in Form eines Würfels der Seitenlänge a , $|\mathbf{a}^{(1)}| = |\mathbf{a}^{(2)}| = |\mathbf{a}^{(3)}| = a$, $\mathbf{a}^{(1)} \cdot \mathbf{a}^{(2)} = \mathbf{a}^{(2)} \cdot \mathbf{a}^{(3)} = \mathbf{a}^{(3)} \cdot \mathbf{a}^{(1)} = 0$.

Gitter	r	\mathbf{s}_1 (\mathbf{s}_5)	\mathbf{s}_2 (\mathbf{s}_6)	\mathbf{s}_3 (\mathbf{s}_7)	\mathbf{s}_4 (\mathbf{s}_8)	primitive Gittervektoren	Volumen der Elementarzelle
sc	1	(000)				$\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}, \mathbf{a}^{(3)}$	a^3
bcc	2	(000)	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$			$\frac{\mathbf{a}^{(1)} + \mathbf{a}^{(2)} - \mathbf{a}^{(3)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(1)} + \mathbf{a}^{(3)} - \mathbf{a}^{(2)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(2)} + \mathbf{a}^{(3)} - \mathbf{a}^{(1)}}{2}$	$a^3/2$
fcc	4	(000)	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$\frac{\mathbf{a}^{(1)} + \mathbf{a}^{(2)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(1)} + \mathbf{a}^{(3)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(2)} + \mathbf{a}^{(3)}}{2}$	$a^3/4$
NaCl	8	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Na} \\ \text{Cl} \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} (000) \\ (\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}) \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} (0\frac{1}{2}\frac{1}{2}) \\ (\frac{1}{2}0\frac{1}{2}) \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0) \\ (00\frac{1}{2}) \end{array} \right.$	wie fcc	$a^3/4$
CsCl	2	Cs, Cl	(000)	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$		wie sc	a^3
Diamant } ZnS }	8	$\left\{ \begin{array}{l} \text{C, Zn} \\ \text{C, S} \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} (000) \\ (\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}) \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} (0\frac{1}{2}\frac{1}{2}) \\ (\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}) \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} (\frac{1}{2}0\frac{1}{2}) \\ (\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}) \end{array} \right.$	wie fcc	$a^3/4$

(2.4)

Dabei steht sc für simple cubic (einfach kubisch), bcc für body-centered cubic (kubisch raumzentriert), fcc für face-centered cubic (kubisch flächenzentriert). Figuren dazu siehe Kittel, Fig. 28 bis 30.

2.b Allgemeine Deckoperationen

Ein Gitter geht im Allgemeinen nicht nur durch Translationen sondern auch durch Drehungen und /oder Spiegelungen in sich über. Im allgemeinen gibt es einen Satz von orthogonalen Transformationen α und Translationen \mathbf{a} , so dass das Gitter unter den Transformationen

$$\mathbf{r}' = \alpha \mathbf{r} + \mathbf{a} = \{\alpha, \mathbf{a}\} \mathbf{r} \quad (2.5)$$

in sich übergeht.

Die Determinante einer orthogonalen Matrix kann entweder +1 oder -1 sein. Wir beginnen mit $\det(\alpha) = +1$. Dann gehört die Matrix α zur $SO(3)$.

Ein Spezialfall ist die Einheits-Matrix (Identität): Alle Eigenwerte von α sind $+1$. Dann stellt $(\alpha, \mathbf{a}) = (1, \mathbf{R}^{(n)})$ die **Translationen** dar.

Da alle Eigenwerte einer orthogonalen Matrix betragsmäßig gleich 1 sind, ist ein Eigenwert von α gleich $+1$ (Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$, Richtung der Drehachse), die beiden anderen sind $e^{\pm i\phi}$ mit dem Drehwinkel ϕ . Falls $\mathbf{an}^{(0)} = 0$, dann ist dies eine **Drehung**, falls aber $\mathbf{an}^{(0)} \neq 0$, dann muss man das Gitter auch noch in Richtung der Drehachse verschieben und man spricht von einer **Schraubung**.

Im zweiten Fall ist $\det(\alpha) = -1$. Wir betrachten zunächst zwei Spezialfälle:

Falls alle Eigenwerte gleich -1 sind, $(\alpha, \mathbf{a}) = (-1, \mathbf{a})$, dann stellt die Operation eine **Inversion** am Zentrum $\mathbf{a}/2$ dar, $\mathbf{r}' = \mathbf{a} - \mathbf{r}$.

Ist dagegen ein Eigenwert -1 mit Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$ und sind zwei Eigenwerte $+1$, dann hat man es bei $\mathbf{a} \parallel \mathbf{n}^{(0)}$ mit einer **Spiegelung** an einer Ebene senkrecht zu $\mathbf{n}^{(0)}$ durch $\mathbf{a}/2$ und andernfalls mit einer **Gleitspiegelung** zu tun. Generell gilt: Falls die Verschiebung \mathbf{a} Komponenten in den Richtungen mit Eigenwerten $+1$ hat, dann benötigt man zusätzlich zur Drehung oder Spiegelung noch eine Verschiebung. Andernfalls kann man Drehachse oder Spiegelebene so wählen, dass eine Verschiebung nicht notwendig ist.

Allgemein hat man für $\det(\alpha) = -1$ einen Eigenwert -1 mit Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$ und ein Eigenwert-paar $e^{\pm i\phi}$. Dies beschreibt dann eine **Drehspiegelung** mit Drehachse parallel zu $\mathbf{n}^{(0)}$ und Spiegelebene senkrecht darauf.

Wir betrachten noch, welche Drehwinkel ϕ möglich sind (wir tun das hier nur für ein Bravais-Gitter, doch lässt sich der Beweis leicht verallgemeinern): Mit der Notation $R_\mu^{(n)} = \sum_i A_{\mu i} n_i$ mit $A_{\mu i} = a_\mu^{(i)}$, beschreiben wir die Operation $\alpha \mathbf{R}^{(n)} = \mathbf{R}^{(m)}$ in der Matrix-Form $\alpha A n = A m$ oder $m = A^{-1} \alpha A n$. Diese Gleichung ergibt für ein beliebiges ganzzahliges Tripel (n_1, n_2, n_3) ganzzahlige (m_1, m_2, m_3) . Daher muss die Matrix $A^{-1} \alpha A$ lauter ganzzahlige Einträge haben. Dann ist aber die Spur

$$\text{Sp}(A^{-1} \alpha A) = \text{Sp}(\alpha) = \pm 1 + 2 \cos \phi \quad (2.6)$$

ganzzahlig. Daher bleiben nur die Möglichkeiten

$\cos \phi =$ <table style="display: inline-table; border: none;"> <tr> <td style="padding: 0 10px;">+1</td> <td style="padding: 0 10px;">+1/2</td> <td style="padding: 0 10px;">0</td> <td style="padding: 0 10px;">-1/2</td> <td style="padding: 0 10px;">-1</td> </tr> <tr> <td></td> <td style="padding: 0 10px;">6-</td> <td style="padding: 0 10px;">4-</td> <td style="padding: 0 10px;">3-</td> <td style="padding: 0 10px;">2-</td> </tr> </table> zählige Drehachse.	+1	+1/2	0	-1/2	-1		6-	4-	3-	2-	(2.7)
+1	+1/2	0	-1/2	-1							
	6-	4-	3-	2-							

2.c Gruppeneigenschaften, Raumgruppe und Punktgruppe

Die zweimalige Anwendung einer Deckoperation stellt wieder eine Deckoperation dar. Auch ist die Rückgängigmachung (also das Inverse) einer Deckoperation wieder eine Deckoperation. Diese stellen also eine Gruppe dar, die Raumgruppe. Man findet für die zweimalige Anwendung und das Inverse

$$\{\alpha | \mathbf{a}\} \{\alpha' | \mathbf{a}'\} = \{\alpha \alpha' | \alpha \mathbf{a}' + \mathbf{a}\}, \quad (2.8)$$

$$\{\alpha | \mathbf{a}\}^{-1} = \{\alpha^{-1} | -\alpha^{-1} \mathbf{a}\}. \quad (2.9)$$

Die Menge der Operationen α bildet selbst eine Gruppe, die Punktgruppe. Je nachdem, ob man a) das Bravaisgitter oder die Kristallstruktur, b) die Punktgruppe oder die Raumgruppe betrachtet, unterscheidet man

	Bravaisgitter	Kristallstruktur
Punktgruppe	7 Kristallsysteme	32 kristallographische Punktgruppen
Raumgruppe	14 Bravaisgitter	230 Kristallklassen

3 Reziprokes Gitter und Streuung

3.a Etwas elastische Streuung

Siehe Hunklinger-Enss: 2.2 Einfache Theorie der Streuung S. 33-35

Trifft ein Teilchen (Elektron, Photon, Neutron) auf einen Körper, so kann unterschiedliches geschehen: Das Teilchen kann unverändert hindurchlaufen, es kann streuen, ohne den Körper zu verändern (elastische Streuung), es kann den Körper in einen anderen Zustand überführen (inelastische Streuung) einschließlich der Möglichkeit, dass dabei andere Teilchen erzeugt oder herausgeschlagen werden, und es kann absorbiert werden. Wir betrachten zunächst nur den einfachsten Fall der elastischen Streuung (tatsächlich nimmt der Körper dabei zumindest Impuls auf, wobei die dadurch bedingte Änderung der Schwerpunktsenergie aber vernachlässigbar ist).

Bei Streuung an einem einzelnen Teilchen (Ion oder Elektron) geht von diesem eine Streuwelle aus. Im einfachsten Fall kann man diese durch die Streulänge f darstellen, die zu einer isotropen Streuung führt. Wird die einlaufende ebene Welle durch eine Amplitude

$$A = A_0 e^{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t)} \quad (3.1)$$

beschrieben, so erhält man für die Streuwelle, die am Ort r' gestreut wird, die Streuamplitude

$$A_s = A_0 \frac{f}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}' + k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - \omega_0 t)} \quad (3.2)$$

Unter der Annahme, dass die Streuwelle in einer Entfernung groß gegenüber der Ausdehnung des Körpers beobachtet wird, vernachlässigt man in Nenner r' , ersetzt dort also $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r$, während man im Exponenten den von \mathbf{r}' abhängigen Wegunterschied berücksichtigen muss, $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'/r$. Man führt noch den Wellenvektor \mathbf{k} in Richtung des Beobachtungspunktes \mathbf{r} ein, $\mathbf{k} = k_0 \mathbf{r}/r$ und erhält dann für die Streuamplitude

$$A_s = A_0 \frac{f e^{ik_0 r}}{r} e^{i((\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}' - \omega_0 t)}. \quad (3.3)$$

Die Streuamplitude hängt also wesentlich vom Streuvektor $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ ab.

Die Streuung erfolgt im Körper an vielen Streuern und auch diese sind nicht unbedingt punktförmig. Man muss daher die Dichte $\rho(\mathbf{r})$ der Streuer berücksichtigen. Unter Einführung dieser Dichte erhält man die Amplitude in der Form

$$A_s = A_0 \frac{e^{ik_0 r - \omega_0 t}}{r} \mathcal{A} \quad (3.4)$$

mit der Streuamplitude

$$\mathcal{A} = f \int d^3 r \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}. \quad (3.5)$$

Bei Anwesenheit verschiedener Streuer ist $f\rho(\mathbf{r})$ durch $\sum_i f_i \rho_i(\mathbf{r})$ zu ersetzen.

Der Streuquerschnitt ergibt sich dann zu

$$d\sigma = |A_s|^2 r^2 d\Omega / |A_0|^2 = |\mathcal{A}|^2 d\Omega = f^2 \int d^3 r d^3 r' \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\Omega. \quad (3.6)$$

Nehmen wir zunächst an, ρ sei konstant. Dann finden wir für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f^2 \rho^2 \int d^3 r e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \int d^3 r' e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} \quad (3.7)$$

Im Wesentlichen folgt für einen makroskopischen Körper hieraus ein $\delta(\mathbf{K})$. Wir können das folgendermaßen sehen: Nehmen wir an, der Körper sei ein Quader. In x-Richtung sei er von 0 bis a ausgedehnt. Die x-Integrationen liefern dann

$$\int_0^a dx e^{-iK_x x} \int_0^a dx' e^{iK_x x'} = \frac{4 \sin^2(\frac{K_x a}{2})}{K_x^2}. \quad (3.8)$$

Diese Funktion ist bereits von der Beugung am Schlitz bekannt. Sie hat ein ausgeprägtes Maximum bei $K_x = 0$, eine erste Nullstelle bei $K_x = \pi/a$, was für eine makroskopische Ausdehnung a sehr klein ist und fällt unter Oszillationen für größeres K_x wie $1/K_x^2$ ab. Für makroskopische Ausdehnung a kann man sie durch eine δ -Funktion ersetzen. Den Vorfaktor findet man durch Integration

$$\int_{-\infty}^{\infty} dK_x \frac{4 \sin^2(\frac{K_x a}{2})}{K_x^2} = 2a \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\sin^2 k}{k^2} = 2\pi a. \quad (3.9)$$

Entsprechend werden die Integrationen in den beiden anderen Raumrichtungen durch geführt, so dass man für konstantes ρ schließlich

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f^2 \rho^2 (2\pi)^3 V_P \delta^3(\mathbf{K}) \quad (3.10)$$

mit dem Volumen V_P des Körpers erhält. Dies ist eine Streuung in Vorwärtsrichtung (Schatten und Beugung). Sie trägt aber auch dazu bei, dass die Welle nach vorne oder rückwärts phasenverschoben wird, was zu einer Brechzahl verschieden von 1 führt. Für einen Körper anderer (aber hinreichend kompakter) Form gilt (3.10) ebenfalls. Je größer der Körper desto kleiner ist der Bereich, in der die Fourier-Transformierte wesentlich von 0 verschieden ist. Ansonsten verwendet man, dass das Integral über \mathbf{K} eine δ -Funktion in $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ergibt,

$$\begin{aligned} \int d^3 K \int_V d^3 r \int_V d^3 r' e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} &= \int_V d^3 r \int_V d^3 r' \int d^3 K e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ &= \int_V d^3 r \int_V d^3 r' (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (2\pi)^3 V_P. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Interessanter sind die Beiträge, die dadurch entstehen, dass $\rho(\mathbf{r})$ von seinem Mittelwert abweicht. Ersetzen wir \mathbf{r} durch $\mathbf{r} + \mathbf{r}'$, dann bleibt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f^2 V_P (\rho^2 (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{K}) + \int d^3 r g(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}) \quad (3.12)$$

mit der Korrelationsfunktion

$$g(\mathbf{r}) = \langle \rho(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}' + \mathbf{r}) \rangle - \langle \rho \rangle^2, \quad (3.13)$$

wobei $\langle \dots \rangle$ die Raummittelung über \mathbf{r}' anzeigt. In einer amorphen Substanz oder einer Flüssigkeit hängt g nur vom Abstand (nicht von der Richtung) r ab. Der Streuquerschnitt ergibt die (dreidimensionale) Fouriertransformierte von $g(r)$.

Man beachte, dass wir hier nur die Einfach-Streuung betrachtet haben. Der Probekörper muss also so dünn sein, dass Mehrfach-Streuung vernachlässigbar ist.

3.b Gitter und reziprokes Gitter

Siehe Hunklinger-Enss: 2.3 Fourier-Entwicklung von Punktgittern S. 36-42

In einem idealen Kristall berücksichtigt man die langreichweitige Ordnung, die sich darin ausdrückt, dass ρ gitterperiodisch ist

$$\rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \rho(\mathbf{r}). \quad (3.14)$$

Entwickelt man ρ in eine Fourier-Reihe

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.15)$$

dann ist

$$\rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}. \quad (3.16)$$

Aus der Gitterperiodizität folgt also, dass $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_n}$ für alle \mathbf{R}_n gleich 1 sein muss. Das ist genau dann erfüllt, wenn es für die Basisvektoren \mathbf{a} gilt. Man muss daher

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G} = 2\pi m_i \quad (3.17)$$

mit ganzzahligen m_i fordern. Für allgemeines \mathbf{R}_n gilt dann $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} = e^{2\pi i \sum_i n_i m_i} = 1$.

Die Vektoren \mathbf{G} , die (3.17) erfüllen, heißen reziproke Gittervektoren. Wir bezeichnen sie mit \mathbf{G}_m , wobei m aus den drei Indices m_1, m_2, m_3 besteht. (Im Skriptum Hunklinger/Enss mit h, k, l bezeichnet) Die Lösung der Gleichung

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G}_m = 2\pi m_i \quad (3.18)$$

kann zunächst in der Form

$$\mathbf{G}_m = \sum_{j=1}^3 m_j \mathbf{b}_j, \quad \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{i,j} \quad (3.19)$$

geschrieben werden. Die letztere Gleichung hat die Lösung

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V_Z} (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{V_Z} (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{V_Z} (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2). \quad (3.20)$$

Dabei ist $V_Z = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3$ das Volumen der Elementarzelle, das mit dem Volumen der Elementarzelle des reziproken Gitters über $(\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{b}_3 = (2\pi)^3 / V_Z$ verknüpft ist.

Man sieht aus der Darstellung (3.19), dass die reziproken Gittervektoren selbst ein Gitter bilden mit den Basisvektoren \mathbf{b} , das reziproke Gitter.

3.c Streuung am Gitter

Siehe Hunklinger-Enss: 2.4 Streuung an Kristallen S. 43-46

Wir betrachten zunächst die Entwicklungskoeffizienten ρ_m in der Entwicklung

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_m \rho_m e^{i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.21)$$

wobei wir jetzt ρ_m statt $\rho_{\mathbf{G}_m}$ schreiben. Wir erhalten diese Koeffizienten durch Integration über die Elementarzelle, in dem wir über das von den Basisvektoren \mathbf{a} aufgespannte Parallelepipid integrieren,

$$\rho_m = \frac{1}{V_Z} \int_{V_Z} e^{-i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.22)$$

Man führt hier die Fourier-Entwicklung bezüglich der drei Richtungen der \mathbf{a} durch analog zur eindimensionalen Fourier-Entwicklung. Man beachte, dass

$$\int_{V_Z} e^{-i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \begin{cases} V_Z & \text{für } \mathbf{G} = 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.23)$$

(Man findet das leicht, indem man $\mathbf{r} = \sum_i s_i \mathbf{a}^{(i)}$, $0 \leq s_i \leq 1$ parametrisiert.) Nachdem aber $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} = 1$, muss die Integration nicht unbedingt über das Parallelepipid erfolgen. Vielmehr können Volumen-Bereiche auch um Gittervektoren verschoben berücksichtigt werden. Zum Beispiel kann man auch über die Wigner-Seitz-Zelle integrieren, die im vorhergehenden Abschnitt eingeführt wurde.

Für mehrere Arten von Streuern erhält man dann den differentiellen Streuquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A|^2 = (2\pi)^3 V_P \sum_m \left| \sum_i f_i \rho_{i,m} \right|^2 \delta^3(\mathbf{G}_m - \mathbf{K}). \quad (3.24)$$

Es entstehen also diskrete Streupeaks an den reziproken Gittervektoren, die über die Fourier-Transformierten von ρ Auskunft geben. Insbesondere findet man die reziproken Gittervektoren, die die Berechnung der \mathbf{a} erlauben. Damit erhält man Aufschluss über die Gitterstruktur.

4 Phononen in harmonischer Näherung

Siehe Hunklinger-Enss: 5.2 Bewegungsgleichung der Gitteratome S. 128-131

Siehe Hunklinger-Enss: 5.3 Gitterschwingungen S. 131-141

4.a Bewegungsgleichungen

In diesem Abschnitt betrachten wir die klassischen Bewegungsgleichungen für die Phononen. Wir tun das, da sehr vieles davon für den quantenmechanischen Fall übernommen werden kann. Das liegt daran, dass die Bewegungsgleichungen für die klassischen Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ und die quantenmechanischen Operatoren der Auslenkungen die gleichen sind.

Die Ionen befinden sich an den Orten $\mathbf{R}_{n,i} + \boldsymbol{\eta}_{ni}$. Dabei nummeriert $n = (n_1, n_2, n_3)$ die Einheitszellen und i nummeriert das Ion innerhalb dieser Zelle, $i = 1, \dots, r$. Die kinetische Energie lässt sich dann

$$\mathcal{T} = \sum_{ni\alpha} \frac{M_i}{2} \dot{\eta}_{ni\alpha}^2 \quad (4.1)$$

schreiben. Dabei nummeriert α die kartesischen Komponenten. Die potentielle Energie schreiben wir in harmonischer Näherung

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum V_{ni\alpha}^{mj\beta} \eta_{ni\alpha} \eta_{mj\beta} + O(\eta^3). \quad (4.2)$$

Dabei sind die Matrix-Elemente $V_{ni\alpha}^{mj\beta}$ die zweiten Ableitungen des Potentials nach den Auslenkungen. Die harmonische Näherung besteht darin, dass wir die Terme der Ordnung η^3 vernachlässigen. Daraus ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$M_i \ddot{\eta}_{ni\alpha} = - \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \eta_{ni\alpha}} = - \sum_{mj\beta} V_{ni\alpha}^{mj\beta} \eta_{mj\beta}. \quad (4.3)$$

4.b Symmetrien

Wir betrachten nun die Symmetrien der $V_{ni\alpha}^{mj\beta}$. Die Matrix V ist reell. Sie ist auch symmetrisch. Nur in dieser symmetrischen Form ist die Bewegungsgleichung (4.3) richtig. Andernfalls müsste $V_{ni\alpha}^{mj\beta}$ durch $\frac{1}{2}(V_{ni\alpha}^{mj\beta} + V_{mj\beta}^{ni\alpha})$ ersetzt werden, was dann der Symmetrisierung entspricht,

$$V_{ni\alpha}^{mj\beta} = V_{mj\beta}^{ni\alpha}. \quad (4.4)$$

Bei Verschiebung des Festkörpers um einen konstanten Vektor $\delta\boldsymbol{\eta}$, $\eta_{mi\beta} \rightarrow \eta_{mi\beta} + \delta\eta_\beta$ ändert sich die Kraft nicht,

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta} = 0. \quad (4.5)$$

Bei Rotation des Gitters um einen konstanten Winkel tritt keine rücktreibende Kraft auf. Die infinitesimale Rotation stellen wir durch die orthogonale Matrix $1 + \delta\phi$ dar. Aus der Orthogonalität folgt $(1 + \delta\phi)(1 + \delta\phi^t) = 1$ in linearer Ordnung in $\delta\phi$. Dabei zeigt der Index t das Transponierte an. Es muss also

$$\delta\phi + \delta\phi^t = 0 \quad (4.6)$$

gelten. $\delta\phi$ ist also eine antisymmetrische Matrix. Die drei unabhängigen Komponenten $\delta\phi_{12}$, $\delta\phi_{23}$ und $\delta\phi_{31}$ sind die drei infinitesimalen Drehwinkel um z -, x - und y -Achse. Die durch die Rotation aus der Ruhelage entstehende Auslenkung ist gegeben durch

$$\mathbf{R} + \boldsymbol{\eta} = (1 + \delta\phi)\mathbf{R}, \quad \eta_{ni\alpha} = \sum_{\beta} \delta\phi_{\alpha\beta} R_{ni\beta}. \quad (4.7)$$

Daraus folgt dann

$$\sum_{mj\beta\gamma} V_{ni\alpha}^{mj\beta} \delta\phi_{\beta\gamma} R_{mj\gamma} = 0, \quad (4.8)$$

woraus dann für gegebenes $\beta\gamma$

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta} R_{mj\gamma} = \sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\gamma} R_{mj\beta} \quad (4.9)$$

folgt. Unter Verwendung von (4.5) können wir das auch

$$\sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\beta} (R_{mj\gamma} - R_{ni\gamma}) = \sum_{mj} V_{ni\alpha}^{mj\gamma} (R_{mj\beta} - R_{ni\beta}) \quad (4.10)$$

schreiben. Schließlich gilt für ein periodisches Gitter noch

$$V_{ni\alpha}^{mj\beta} = V_{n+l,i\alpha}^{m+l,j\beta} = V_{i\alpha}^{j\beta} (m - n). \quad (4.11)$$

4.c Lösung der Bewegungsgleichungen

Die allgemeine Lösung (siehe Mechanik-Vorlesung) ist durch die Überlagerung von zeitlich periodischen partikulären Lösungen der Form

$$\eta_{ni\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_i}} u_{ni\alpha} e^{-i\omega t} \quad (4.12)$$

gegeben. Die Amplitude der Auslenkungen sind die u/\sqrt{M} . Der Faktor $1/\sqrt{M}$ wurde eingeführt, damit wir anschließend eine symmetrische Matrix zu diagonalisieren haben. Wir erhalten dann durch Einsetzen und Ausfaktorieren von $e^{-i\omega t}$ die Eigenwertgleichung

$$\omega^2 u_{ni\alpha} = \sum_{mj\beta} \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} u_{mj\beta}, \quad \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} = \frac{V_{ni\alpha}^{mj\beta}}{\sqrt{M_i M_j}}. \quad (4.13)$$

Da die Matrix Φ symmetrisch ist, wissen wir, dass die $3rN$ Eigenwerte ω^2 reell sind. Ist ω^2 positiv, so handelt es sich tatsächlich um Oszillatoren. Ist $\omega^2 = 0$, so ist $e^{-i\omega t}$ durch $t - t_0$ zu ersetzen; dies findet man für die Translationen und (für kleine Winkel) für die Rotationen. Ist schließlich $\omega^2 < 0$, dann ist $i\omega$ reell und man hat eine exponentiell anwachsende und eine exponentiell verschwindende Lösung; der Festkörper ist instabil. Die harmonische Näherung gilt nur für kleine Auslenkungen. Ist ω^2 negativ, dann wird der Festkörper in eine andere stabile Lage übergehen oder er verliert seine Festigkeit.

Die Matrix Φ hat die Größe $3rN \times 3rN$. Ihre Diagonalisierung wird aber für ein periodisches Gitter sehr vereinfacht. Hier setzt man

$$u_{ni\alpha} = c_{i\alpha}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n} \quad (4.14)$$

an. Die Amplitude der Auslenkung hängt also nur von dem Gitterplatz i innerhalb einer Gitterzelle ab und ist dann noch mit der Phase $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n}$ multipliziert; es handelt sich um eine ebene Welle mit dem Wellenvektor \mathbf{q} . Man beachte, dass \mathbf{q} nur bis auf reziproke Gittervektoren definiert ist.

Man findet mit diesem Ansatz die Eigenwertgleichungen

$$\omega^2 c_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{mj\beta} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \Phi_{i\alpha}^{j\beta}(m - n) c_{j\beta}(\mathbf{q}) \quad (4.15)$$

oder mit der dynamischen Matrix

$$D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) = \sum_m \Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} = \frac{1}{\sqrt{M_i M_j}} \sum_m V_{i\alpha}^{j\beta}(m) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} \quad (4.16)$$

in der Form

$$\omega^2 c_{i\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{j\beta} D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) c_{j\beta}(\mathbf{q}). \quad (4.17)$$

Die Matrizen D haben die Größe $3r \times 3r$ und führen auf $3r$ Phononenäste $\omega = \omega_\lambda(\mathbf{q})$ mit Amplituden $c_{i\alpha} = c_{i\alpha}^\lambda(\mathbf{q})$. Die speziellen Lösungen haben dann die Form

$$\eta_{ni}(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{M_i}} c_i^\lambda(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q}\mathbf{R}_n - \omega^\lambda(\mathbf{q})t)}. \quad (4.18)$$

Wir betrachten noch einige Symmetrien:

a) Es gilt

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q} + \mathbf{G}), \text{ da } D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) = D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \quad (4.19)$$

für alle reziproken Gittervektoren \mathbf{G} .

b) Weiter gilt

$$\omega_\lambda(-\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q}) \text{ und } \mathbf{c}_i(-\mathbf{q}) = \mathbf{c}_i^*(\mathbf{q}), \text{ da } D_{i\alpha}^{j\beta}(-\mathbf{q}) = D_{i\alpha}^{j\beta*}(\mathbf{q}) \quad (4.20)$$

c) Weiter ist D hermitesch,

$$D_{i\alpha}^{j\beta}(\mathbf{q}) = \sum_m \Phi_{i\alpha}^{j\beta}(m) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} = \sum_m \Phi_{j\beta}^{i\alpha}(-m) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} = \sum_m \Phi_{j\beta}^{i\alpha}(m) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} = D_{j\beta}^{i\alpha*}(\mathbf{q}) = D_{j\beta}^{i\alpha}(-\mathbf{q}) \quad (4.21)$$

4.d Periodische Randbedingungen

Genau genommen ist diese Behandlung nur zulässig für einen Körper mit periodischen Randbedingungen. Für große Körper wird das Volumen-Verhalten (bulk) hierdurch korrekt beschrieben. Dagegen sind Oberflächenwellen hier vernachlässigt. Bei periodischen Randbedingungen etwa von der Form

$$\eta_{(n_1, n_2, n_3)i\alpha} = \eta_{(n_1 + N_1, n_2 + N_2, n_3 + N_3)i\alpha}, \quad (4.22)$$

besteht das Periodizitätsvolumen V_P aus $N = N_1 N_2 N_3$ Elementar- oder Einheitszellen. Dementsprechend gibt es dann N verschiedene q -Werte. Sie müssen den Bedingungen

$$N_i \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}^{(i)} = 2\pi\nu_i \quad (4.23)$$

mit ganzen ν_i genügen. Die Lösung findet man am einfachsten, indem man \mathbf{q} nach reziproken Gittervektoren entwickelt

$$\mathbf{q} = \sum_j \alpha_j \mathbf{b}^{(j)} \quad (4.24)$$

Dann folgt mit (3.19)

$$N_i \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}^{(i)} = 2\pi N_i \alpha_i = 2\pi\nu_i, \quad \alpha_i = \frac{\nu_i}{N_i}. \quad (4.25)$$

Benachbarte \mathbf{q} -Vektoren sind daher um die Vektoren $\mathbf{b}^{(1)}/N_1$, $\mathbf{b}^{(2)}/N_2$, $\mathbf{b}^{(3)}/N_3$ entfernt. Ihre Dichte um \mathbf{q} -Raum beträgt daher

$$\frac{N_1 N_2 N_3}{|(\mathbf{b}^{(1)} \times \mathbf{b}^{(2)}) \cdot \mathbf{b}^{(3)}|} = \frac{NV_z}{(2\pi)^3} = \frac{V_P}{(2\pi)^3}, \quad (4.26)$$

weshalb man für makroskopische Systeme die Summe über \mathbf{q} ersetzt durch das Integral

$$\frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{q}} \dots \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \dots \quad (4.27)$$

5 Kontinuumstheorie

Siehe Hunklinger-Enss: 5.1 Schallausbreitung S. 125-128

5.a Mikroskopische Kontinuumstheorie

Wir beschränken uns auf ein Bravais-Gitter. Sonst ist noch die Verschiebung der Untergitter gegeneinander zu berücksichtigen, was zu umfangreicheren Rechnungen führt. Wir beginnen mit der Bewegungsgleichung

$$M \ddot{\eta}_{m\alpha} = - \sum_{m\beta} V_{n\alpha}^{m\beta} \eta_{m\beta}. \quad (5.1)$$

Wir nehmen nun an, die Auslenkung η sei eine langsam veränderliche Funktion des Ortes und entwickeln η_m in eine Taylor-Reihe um \mathbf{R}_n .

$$\eta_{m\beta} = \eta_\beta(\mathbf{R}_n) + \sum_\gamma (R_{m\gamma} - R_{n\gamma}) \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma,\delta} (R_{m\gamma} - R_{n\gamma})(R_{m\delta} - R_{n\delta}) \frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} + \dots \quad (5.2)$$

Es folgt dann die Bewegungsgleichung

$$M \ddot{\eta}_\alpha = - \sum_{m,\beta} V_{n\alpha}^{m\beta} \eta_\beta - \sum_{m,\beta,\gamma} (R_{m\gamma} - R_{n\gamma}) V_{n\alpha}^{m\beta} \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} - \frac{1}{2} \sum_{m,\beta,\gamma,\delta} (R_{m\gamma} - R_{n\gamma})(R_{m\delta} - R_{n\delta}) V_{n\alpha}^{m\beta} \frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta} - \dots \quad (5.3)$$

Wir betrachten nun die verschiedenen Terme in der Entwicklung: Der erste Term verschwindet, da $\sum_m V_{n\alpha}^{m\beta} = 0$ wegen der Translationsinvarianz (4.5).

Wir gehen davon aus, dass im Inneren die Summe

$$\Gamma_{\alpha\gamma}^\beta := \sum_m V_{n\alpha}^{m\beta} (R_{m\gamma} - R_{n\gamma}) \quad (5.4)$$

vom Gitterpunkt n unabhängig ist, und dass die Beiträge am Rand nur von der Größenordnung aV sind, so dass etwaige Abweichungen am Rand in der folgenden Mittelung vernachlässigbar sind. Dann können wir Γ ersetzen durch

$$\Gamma_{\alpha\gamma}^\beta = \frac{1}{N} \sum_{mn} V_{n\alpha}^{m\beta} (R_{m\gamma} - R_{n\gamma}) = \frac{1}{N} \sum_m R_{m\gamma} \sum_n V_{n\alpha}^{m\beta} - \frac{1}{N} \sum_n R_{n\gamma} \sum_m V_{n\alpha}^{m\beta}. \quad (5.5)$$

Da die jeweils innere Summe verschwindet, verschwindet Γ und damit der Entwicklungskoeffizient vor der Ableitung $\frac{\partial \eta}{\partial x}$.

Ähnlich behandeln wir auch die Entwicklungskoeffizienten der zweiten Ableitungen. Wir definieren

$$2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = -\frac{1}{V_Z} \sum_m (R_{m\gamma} - R_{n\gamma})(R_{m\delta} - R_{n\delta}) V_{n\alpha}^{m\beta} \quad (5.6)$$

Auch hier gehen wir davon aus, dass die Größen innerhalb des Gitters unabhängig von n sind. Dann haben wir

$$\begin{aligned} 2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= -\frac{1}{V_P} \sum_{mn} (R_{m\gamma} - R_{n\gamma})(R_{m\delta} - R_{n\delta}) V_{n\alpha}^{m\beta} \\ &= -\frac{1}{V_P} \sum_m R_{m\gamma} R_{m\delta} \sum_n V_{n\alpha}^{m\beta} + C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + C_{\alpha\gamma,\beta\delta} - \frac{1}{V_P} \sum_n R_{n\gamma} R_{n\delta} \sum_m V_{n\alpha}^{m\beta} \end{aligned} \quad (5.7)$$

mit

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \frac{1}{V_P} \sum_{mn} R_{m\gamma} R_{n\delta} V_{n\alpha}^{m\beta}. \quad (5.8)$$

Die Koeffizienten C heißen Elastizitäts-Moduln. Die in (5.7) angegebenen expliziten Summen verschwinden, da die innere Summe wegen (4.5) verschwindet. Es bleibt also

$$2\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + C_{\alpha\gamma,\beta\delta} \quad (5.9)$$

und die Bewegungsgleichung

$$\rho\ddot{\eta}_\alpha = \sum_{\beta\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} \frac{\partial^2 \eta_\beta}{\partial x_\gamma \partial x_\delta}. \quad (5.10)$$

Symmetrien: Vertauschen wir in der Definition von C die Indices $n\alpha\delta$ mit $m\beta\gamma$, so ändert sich C nicht. C ist daher invariant gegenüber Vertauschung des vorderen mit dem hinteren Index-Paar,

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = C_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \quad (5.11)$$

Aus der Rotationsinvarianz (4.9) folgt, dass man die vorderen beiden Indices α und δ miteinander vertauschen kann, wie auch die hinteren beiden β und γ ,

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = C_{\delta\alpha,\beta\gamma} = C_{\delta\alpha,\gamma\beta}. \quad (5.12)$$

Aus diesen Gleichungen leitet man auch leicht her, dass die gleichen Symmetrien auch für die \hat{C} gelten,

$$\hat{C}_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{C}_{\delta\alpha,\beta\gamma} = \hat{C}_{\delta\alpha,\gamma\beta} = \hat{C}_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \quad (5.13)$$

Wir bemerken, dass sich mit Hilfe der Symmetrie-Relationen die C durch die \hat{C} ausdrücken lassen

$$C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} + \hat{C}_{\alpha\gamma,\beta\delta} - \hat{C}_{\alpha\delta,\beta\gamma}. \quad (5.14)$$

Da C invariant ist gegen Vertauschung der beiden hinteren Indices können wir die Bewegungsgleichung auch in der Form

$$\rho\ddot{\eta}_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial}{\partial x_\delta} \left(\sum_{\beta\gamma} C_{\alpha\delta,\beta\gamma} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\beta} \right) \right) \quad (5.15)$$

schreiben. Man bezeichnet die Grösse

$$\epsilon_{\beta\gamma} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial \eta_\gamma}{\partial x_\beta} \right) \quad (5.16)$$

als den Verzerrungstensor. Er ist offensichtlich symmetrisch

$$\epsilon_{\beta\gamma} = \epsilon_{\gamma\beta}. \quad (5.17)$$

Die Größe

$$\sigma_{\alpha\delta} = \sum_{\beta\gamma} C_{\alpha\delta,\beta\gamma} \epsilon_{\beta\gamma} \quad (5.18)$$

bezeichnet man als Spannungstensor. Er ist ebenfalls symmetrisch auf Grund der Symmetrie von C , (5.12)

$$\sigma_{\alpha\delta} = \sigma_{\delta\alpha}. \quad (5.19)$$

Daher kann die Bewegungsgleichung auch

$$\rho\ddot{\eta}_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} \quad (5.20)$$

geschrieben werden. Auf Grund der Symmetrien ist es üblich, die Indices der 6 unabhängigen Komponenten des Verzerrungstensors ϵ und des Spannungstensors σ in folgender Weise zusammen zu fassen:

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline 11 & 22 & 33 & 23 & 13 & 12 \\ \hline 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ \hline \end{array} \quad (5.21)$$

$C_{i,j}$, $i, j = 1..6$ ist dann symmetrisch und hat im Allgemeinen 21 unabhängige Komponenten. Durch Kristallsymmetrie reduziert sich deren Anzahl aber häufig.

5.b Verzerrungs- und Spannungstensor

5.b.α Verzerrungstensor

Wir haben oben den Verzerrungs- und den Spannungstensor definiert. Der Verzerrungstensor ist verknüpft mit den Ableitungen $\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma}$. Im allgemeinen hat man neun derartige Komponenten. Man zerlegt sie üblicherweise in den symmetrischen und den antisymmetrischen Anteil

$$\frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\gamma} = \epsilon_{\beta\gamma} + \omega_{\beta\gamma}, \quad \epsilon_{\beta\gamma} = \epsilon_{\gamma\beta}, \quad \omega_{\beta\gamma} = -\omega_{\gamma\beta}. \quad (5.22)$$

Der symmetrische Anteil beschreibt (in linearer Ordnung) die Verzerrung. Hierzu bilden wir zunächst die Veränderung des Ortes des Gitters in Abhängigkeit von ihrer Ruhelage

$$d(\mathbf{R} + \boldsymbol{\eta})_\alpha = dx_\alpha + \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta} dx_\beta. \quad (5.23)$$

Hieraus ergibt sich für das Quadrat eines infinitesimalen Abstands dl

$$(dl)^2 = d(\mathbf{R} + \boldsymbol{\eta}) \cdot d(\mathbf{R} + \boldsymbol{\eta}) = (dx_\alpha)^2 + 2 \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta} dx_\alpha dx_\beta + \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\alpha} \cdot \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta} dx_\alpha dx_\beta = (\delta_{\alpha\beta} + 2\epsilon_{\alpha\beta}) dx_\alpha dx_\beta \quad (5.24)$$

mit

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\alpha} \cdot \frac{\partial \eta_\beta}{\partial x_\beta} \right). \quad (5.25)$$

In linearer Ordnung stimmt ϵ mit dem oben definierten überein. Man kann ϵ diagonalisieren. Der Körper ist in Richtung der Eigenvektoren um den Faktor $1 + \epsilon^{(i)}$ verlängert, wenn $\epsilon^{(i)}$ die Eigenwerte sind. (Dies gilt in linearer Näherung in $\frac{\partial \eta}{\partial x}$. Exakt gilt es, wenn man ϵ durch

$$(dl)^2 = ((1 + \epsilon)^2)_{\alpha\beta} dx_\alpha dx_\beta \quad (5.26)$$

definiert. Das Volumen vergrößert sich dann um den Faktor $\prod_i (1 + \epsilon^{(i)})$, was in linearer Näherung mit $1 + \sum_i \epsilon^{(i)} = 1 + \text{Spur}(\epsilon)$ übereinstimmt.

Der antisymmetrische Anteil von $\frac{\partial \eta}{\partial x}$ beschreibt eine Drehung. Wir hatten ja schon infinitesimale Rotationen eingeführt, die auf Auslenkungen

$$\eta_\alpha = \Phi_{\alpha\beta} x_\beta, \quad \text{d.h.} \quad \frac{\partial \eta_\alpha}{\partial x_\beta} = \Phi_{\alpha\beta} \quad (5.27)$$

mit antisymmetrischem Φ führten.

5.b.β Spannungstensor

In Gleichung (5.20) haben wir die Kraftdichte als Divergenz des Spannungstensors σ ausgedrückt

$$\rho \ddot{\eta}_\alpha = k_\alpha = \sum_\delta \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} \quad (5.28)$$

Die Kraft, die auf ein Volumen V wirkt, kann daher mittels des Gaußschen Satzes in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden

$$K_\alpha = \int_V d^3r \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_\delta} = \int_{\partial V} df_\delta \sigma_{\alpha\delta}. \quad (5.29)$$

Das Drehmoment, das auf das Volumen wirkt, kann nun wahlweise durch die im Volumen wirkende Kraftdichte oder die Oberflächenkraft ausgedrückt werden. Dabei schreiben wir das Drehmoment als antisymmetrischen Tensor

$$M_{\alpha\beta}^V = \int_V d^3r (x_\alpha k_\beta - x_\beta k_\alpha), \quad (5.30)$$

$$M_{\alpha\beta}^F = \int_{\partial V} df_\delta (x_\alpha \sigma_{\beta\delta} - x_\beta \sigma_{\alpha\delta}). \quad (5.31)$$

Formen wir den zweiten Ausdruck in ein Volumen-Integral um, so erhalten wir

$$\begin{aligned} M_{\alpha\beta}^{\text{F}} &= \int_{\partial V} df_{\delta} (x_{\alpha}\sigma_{\beta\delta} - x_{\beta}\sigma_{\alpha\delta}) = \int_V d^3r \frac{\partial}{\partial x_{\delta}} (x_{\alpha}\sigma_{\beta\delta} - x_{\beta}\sigma_{\alpha\delta}) \\ &= M_{\alpha\beta}^{\text{V}} + \int_V \left(\frac{\partial x_{\alpha}}{\partial x_{\delta}} \sigma_{\beta\delta} - \frac{\partial x_{\beta}}{\partial x_{\delta}} \sigma_{\alpha\delta} \right) = M_{\alpha\beta}^{\text{V}} + \int_V (\sigma_{\beta\alpha} - \sigma_{\alpha\beta}). \end{aligned} \quad (5.32)$$

Da die Ausdrücke für das Volumen- und das Flächenintegral übereinstimmen müssen, muss $\sigma_{\beta\alpha} - \sigma_{\alpha\beta}$ verschwinden, das heißt σ muss ein symmetrischer Tensor sein. Die Oberflächenkraftdichte σdf gibt die Kraft an, die von außen auf das Volumen wirkt. Umgekehrt übt das Volumen auf seine Umgebung die Kraftdichte $-\sigma df$ aus. Befindet sich der Körper in einem isotropen Druck p , so ist σ diagonal $\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta}$ und die Oberflächenkraft ergibt sich zu $-pdf$. Sie steht also senkrecht auf der Oberfläche. Im allgemeinen ist aber σ nicht proportional zur Einheits-Matrix. Dann treten auch Scherkräfte, das heißt Kräfte parallel zur Oberfläche auf.

5.c Akustische Äste

Die Bewegungsgleichung ergibt sich aus (5.10) mit dem Ansatz einer ebenen Welle

$$\boldsymbol{\eta} = \mathbf{u} e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (5.33)$$

wobei \mathbf{u} die Richtung der Auslenkung angibt. Damit erhält man das Eigenwertproblem

$$\rho\omega^2 u_{\alpha} = \sum_{\beta\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} q_{\gamma} q_{\delta} u_{\beta} \quad (5.34)$$

mit der Eigenwertgleichung

$$\det_{\alpha\beta} \left(\sum_{\gamma\delta} \hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} q_{\gamma} q_{\delta} - \rho\omega^2 \delta_{\alpha\beta} \right) = 0. \quad (5.35)$$

In diesen Gleichungen kann man auch \hat{C} durch C ausdrücken und wegen der Symmetrie in γ und δ letztendlich $\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ durch $C_{\alpha\delta,\beta\gamma}$ ersetzen. Man erkennt aus (5.35), dass sich die Eigenfrequenzen in der Form

$$\omega_{\lambda}(\mathbf{q}) = qc_{\lambda}(\hat{q}), \quad \hat{q} = \mathbf{q}/q \quad (5.36)$$

schreiben lassen. Die Frequenzen sind also proportional q , der Proportionalitätsfaktor c ist die Schallgeschwindigkeit. Sie ist im Allgemeinen richtungsabhängig.

5.c.α Spezialfall: Kubischer Kristall

Für den kubischen Kristall setzen wir voraus, dass er durch orthogonale Transformationen, die die x-, y-, und z-Achse ineinander überführen, in sich übergeht. Dann ist

$$C_{11} = C_{22} = C_{33}, \quad C_{12} = C_{13} = C_{23}, \quad C_{44} = C_{55} = C_{66}. \quad (5.37)$$

Hier waren die vier Indices $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ von C jeweils paarweise gleich. Vorzeichenfaktoren bei den orthogonalen Transformationen traten daher jeweils paarweise auf. Sind von den vier Indices drei gleich und der vierte verschieden, so führt eine Drehung um eine dieser beiden Achsen um 180° diese Komponente von C in ihr Negatives über (z.B. $x, x, x, y \rightarrow x, x, x, -y$ bei Drehung um x-Achse); daher ist diese Komponente gleich 0. Sind von den vier Indices zwei gleich und die beiden anderen jeweils verschieden, so führt eine Drehung um 90° um die Achse, die zweifach vorkommt, C in sein Negatives über (z.B. $x, x, y, z \rightarrow x, x, z, -y$); daher verschwindet diese Komponente auch.

Mit den Abkürzungen

$$A = C_{11} - C_{44}, \quad B = C_{12} + C_{44}, \quad E = \rho\omega^2 - C_{44}q^2 \quad (5.38)$$

und

$$\sum_{\gamma\delta} C_{1\delta,1\gamma} q_\gamma q_\delta = C_{11} q_1^2 + C_{44} (q_2^2 + q_3^2) = A q_1^2 + C_{44} q^2, \quad (5.39)$$

$$\sum_{\gamma\delta} C_{1\delta,2\gamma} q_\gamma q_\delta = (C_{12} + C_{44}) q_1 q_2 = B q_1 q_2 \quad (5.40)$$

folgt dann die Eigenwertgleichung

$$\begin{vmatrix} Aq_1^2 - E & Bq_1q_2 & Bq_1q_3 \\ Bq_1q_2 & Aq_2^2 - E & Bq_2q_3 \\ Bq_1q_3 & Bq_2q_3 & Aq_3^2 - E \end{vmatrix} = 0. \quad (5.41)$$

Diese Gleichung dritten Grades in E , das die Eigenfrequenz ω enthält, vereinfacht sich für die Symmetrie-Richtungen

$$\mathbf{q} = q \cdot (1, 0, 0) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = C_{11}q^2 \quad (5.42)$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = C_{44}q^2 \quad (5.43)$$

$$\mathbf{q} = \frac{q}{\sqrt{2}} \cdot (1, 1, 0) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = \left(\frac{1}{2}C_{11} + \frac{1}{2}C_{12} + C_{44}\right)q^2 \quad (5.44)$$

$$t \quad \rho\omega_2^2 = \left(\frac{1}{2}C_{11} - \frac{1}{2}C_{12}\right)q^2 \quad (5.45)$$

$$t \quad \rho\omega_3^2 = C_{44}q^2 \quad (5.46)$$

$$\mathbf{q} = \frac{q}{\sqrt{3}} \cdot (1, 1, 1) \quad l \quad \rho\omega_1^2 = \left(\frac{1}{3}C_{11} + \frac{2}{3}C_{12} + \frac{4}{3}C_{44}\right)q^2 \quad (5.47)$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = \left(\frac{1}{3}C_{11} - \frac{1}{3}C_{12} + \frac{1}{3}C_{44}\right)q^2 \quad (5.48)$$

Man sieht hier explizit, dass die Schallgeschwindigkeiten richtungsabhängig sind. Im Allgemeinen sind alle drei Schallgeschwindigkeiten wie hier im Fall der (1,1,0)-Richtung voneinander verschieden. Man vergleiche mit Abb. 5.13 auf Seite 149 im Skriptum Hunklinger/Enss.

Im isotropen Fall reduzieren sich die drei Elastizitäts-Konstanten auf zwei. Der Tensor vierter Stufe C muss dann gegenüber beliebigen Rotationen invariant sein. Er reduziert sich dann auf die Form

$$C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}C_{12} + (\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})C_{44}, \quad (5.49)$$

woraus

$$C_{11} = C_{12} + 2C_{44} \quad (5.50)$$

folgt. In diesem Fall erhält man unabhängig von der Richtung die Frequenzen

$$l \quad \rho\omega_1^2 = C_{11}q^2 \quad (5.51)$$

$$t \quad \rho\omega_{2,3}^2 = C_{44}q^2. \quad (5.52)$$

5.d Ergänzungen

5.d.α Lagrange-Formulierung

Im Rahmen einer phänomenologischen Kontinuumstheorie geht man davon aus, dass man kinetische und potentielle Energie durch die Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ als Funktion des Ortes und der Zeit ausdrücken kann. Die kinetische Energie lässt sich dann schreiben als

$$\mathcal{T} = \frac{\rho}{2} \int d^3r r \dot{\boldsymbol{\eta}}^2(\mathbf{r}, t). \quad (5.53)$$

Die potentielle Energie drückt man durch den Verzerrungstensor aus

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int d^3r C_{\alpha\beta,\gamma\delta} \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon_{\gamma\delta}. \quad (5.54)$$

Die Bewegungsgleichungen erhält man am einfachsten aus der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}, \quad (5.55)$$

wobei sich die Lagrange-Funktion als Integral über die Lagrange-Dichte schreiben lässt.

$$\mathcal{L} = \int d^3r L(\dot{\eta}, \frac{\partial \eta}{\partial x}) \quad (5.56)$$

$$L = \frac{\rho}{2} \sum_{\alpha} \dot{\eta}_{\alpha}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon_{\gamma\delta}. \quad (5.57)$$

Die Bewegungsgleichung erhält man durch Variation der Wirkung

$$S = \int dt \mathcal{L} \quad (5.58)$$

bezüglich η ,

$$\delta S = \int dt d^3r \sum_{\alpha} \delta L = \int dt d^3r \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_{\alpha}} \delta \dot{\eta}_{\alpha} + \sum_{\beta} \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial x_{\beta}}} \delta \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} \right) \quad (5.59)$$

$$= \text{Randterme} - \int dt d^3r \sum_{\alpha} \delta \eta_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_{\alpha}} + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial x_{\beta}}} \right), \quad (5.60)$$

woraus dann die generelle Form der Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_{\alpha}} + \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial x_{\beta}}} = 0 \quad (5.61)$$

folgt. Die Auswertung dieser Gleichung führt wieder auf die Bewegungsgleichung (5.10).

5.d.β Kristall unter äußerer Spannung

Wir hatten früher argumentiert, dass das Potential keine Beiträge linear in η hat, da sonst bereits unausgelenkt Kräfte auftreten würden. Steht allerdings ein Kristall unter einer äußeren Spannung, dann gibt es lineare Beiträge des Potentials, die durch die äußeren Kräfte kompensiert werden

$$\mathcal{V}^{\text{Kristall}} = \sum K_{n\alpha} \eta_{n\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{mn} V_{n\alpha}^{m\beta} \eta_{n\alpha} \eta_{m\beta}. \quad (5.62)$$

Hinzu kommen dann die äußeren Kräfte, die durch das Potential

$$\mathcal{V}^{\text{aus}} = - \sum K_{n\alpha} \eta_{n\alpha} \quad (5.63)$$

beschrieben werden.

Steht der Kristall unter homogener Spannung, dann bilden wir das Integral über die auf den Kristall wirkende Kraftdichte multipliziert mit den Ortskoordinaten

$$\int d^3r k_{\alpha} x_{\beta} = \int d^3r x_{\beta} \frac{\partial \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_{\delta}} = \int d^3r \frac{\partial x_{\beta} \sigma_{\alpha\delta}}{\partial x_{\delta}} - \int d^3r \frac{\partial x_{\beta}}{\partial x_{\delta}} \sigma_{\alpha\delta} = - \int d^3r \sigma_{\alpha\beta} = -V_{\text{P}} \sigma_{\alpha\beta}. \quad (5.64)$$

Hierbei haben wir verwendet, dass die Spannung im Kristall natürlich nur im Kristallvolumen besteht. Ersetzen wir das Integral über die Kraftdichte durch die Summe über die Kräfte, so folgt

$$\sum_n K_{n\alpha} R_{n\beta} = -V_{\text{P}} \sigma_{\alpha\beta}. \quad (5.65)$$

Als nächstes betrachten wir die Rotationsinvarianz. Sie trifft auf das Kristallpotential, aber in der Regel nicht auf das Potential der äußeren Kraft zu. Wir erhalten daher unter der Rotation (4.7)

$$\delta\mathcal{V}^{\text{Kristall}} = \sum K_{n\alpha} \Phi_{\alpha\beta}(R_{n\beta} + \eta_{n\beta}) + \sum V_{n\alpha}^{m\beta} \eta_{m\alpha} \Phi_{\beta\gamma} R_{m\gamma} + O(\eta^2) \quad (5.66)$$

Dieses $\delta\mathcal{V}$ muss identisch verschwinden. Daher folgt für den von η unabhängigen Beitrag

$$\sum K_{n\alpha} R_{n\beta} = \sum K_{n\beta} R_{n\alpha}, \quad (5.67)$$

also die Symmetrie des Spannungstensors. Der mit $\Phi_{\beta\gamma}\eta_{m\alpha}$ multiplizierte Beitrag aus (5.66) muss mit dem mit $\Phi_{\gamma\beta}\eta_{m\alpha}$ multiplizierten übereinstimmen. Daraus folgt

$$\delta_{\alpha\gamma} K_{n\beta} + \sum_m V_{n\alpha}^{m\beta} R_{m\gamma} = \delta_{\alpha\beta} K_{n\gamma} + \sum_m V_{n\alpha}^{m\gamma} R_{m\beta}. \quad (5.68)$$

Multiplizieren wir mit $R_{n\delta}$, summieren über n und setzen wir die Definitionen von C und σ ein, so finden wir

$$-\delta_{\alpha\gamma}\sigma_{\beta\delta} + C_{\alpha\delta,\beta\gamma} = -\delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} + C_{\alpha\delta,\gamma\beta}. \quad (5.69)$$

Daraus folgt, dass die Grösse

$$S_{\alpha\delta,\beta\gamma} := C_{\alpha\delta,\beta\gamma} + \delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} = C_{\alpha\delta,\gamma\beta} + \delta_{\alpha\gamma}\sigma_{\beta\delta} \quad (5.70)$$

die Symmetrien

$$S_{\alpha\delta,\beta\gamma} = S_{\alpha\delta,\gamma\beta} = S_{\delta\alpha,\beta\gamma} = S_{\beta\gamma,\alpha\delta} \quad (5.71)$$

hat. Für die Größen \hat{C} folgt dann

$$\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} - \delta_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta}, \quad \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} := \frac{1}{2}(S_{\alpha\delta,\beta\gamma} + S_{\alpha\gamma,\beta\delta}), \quad (5.72)$$

wobei auch \hat{S} wieder die Symmetrien

$$\hat{S}_{\alpha\delta,\beta\gamma} = \hat{S}_{\alpha\delta,\gamma\beta} = \hat{S}_{\delta\alpha,\beta\gamma} = \hat{S}_{\beta\gamma,\alpha\delta}. \quad (5.73)$$

folgen. Für einen isotropen Druck $\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta}$ folgen die Symmetrien (5.13) auch für die

$$\hat{C}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \hat{S}_{\alpha\beta,\gamma\delta} + p\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}. \quad (5.74)$$

6 Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen

Siehe Hunklinger-Enss: 5.4 Experimentelle Bestimmung von Dispersionskurven S. 141-155

6.a Diagonalisierung und Normalkoordinaten

In diesem Abschnitt behandeln wir die Phononen quantenmechanisch unter Verwendung dessen, was wir bereits bei der klassischen Behandlung in Abschnitt 4 hergeleitet haben. Wir schreiben dazu den Hamilton-Operator in einer etwas kompakten Schreibweise mittels Matrizen

$$H = \frac{1}{2} \left(\frac{p}{\sqrt{M}} \right)^\dagger \left(\frac{p}{\sqrt{M}} \right) + \frac{1}{2} \left(\sqrt{M}\eta \right)^\dagger \Phi \left(\sqrt{M}\eta \right). \quad (6.1)$$

Dabei sind p und η Spaltenvektoren, M ist diagonal. Die Diagonalisierung von Φ geschieht mittels einer unitären Transformation

$$\Phi = U^\dagger \hat{\omega}^2 U, \quad U^\dagger U = 1, \quad (6.2)$$

wobei $\hat{\omega}^2$ die Diagonalmatrix mit den Quadraten der Eigenfrequenzen ist. Wir können dann

$$H = \frac{1}{2} \left(U \frac{p}{\sqrt{M}} \right)^\dagger \left(U \frac{p}{\sqrt{M}} \right) + \frac{1}{2} \left(U \sqrt{M}\eta \right)^\dagger \hat{\omega}^2 \left(U \sqrt{M}\eta \right) \quad (6.3)$$

mit

$$\Phi_{n\alpha}^{mj\beta} = \sum_{\lambda, \mathbf{q}} U_{n\alpha}^{(\lambda)*}(\mathbf{q}) \omega_\lambda^2(\mathbf{q}) U_{mj\beta}^{(\lambda)}(\mathbf{q}) \quad (6.4)$$

$$U_{n\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q}) = \frac{u_{n\alpha}^\lambda(\mathbf{q})}{\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} c_{i\alpha}^\lambda(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} \quad (6.5)$$

schreiben. Dabei werden die Indices λ, \mathbf{q} als vordere, m, j, β als hintere Indices von $U_{mj\beta}^{(\lambda)}(\mathbf{q})$ angesehen.

Von hier aus können wir die Normalkoordinaten einführen

$$P_\lambda(\mathbf{q}) = \left(U \frac{p}{\sqrt{M}} \right)^\dagger(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n\alpha} c_{i\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} \frac{p_{n\alpha}}{\sqrt{M_i}} \quad (6.6)$$

$$Q_\lambda(\mathbf{q}) = \left(U \sqrt{M}\eta \right)^\dagger(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n\alpha} c_{i\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} \sqrt{M_i} \eta_{n\alpha}. \quad (6.7)$$

Diese Transformation haben wir im Abschnitt 4 in zwei Schritten durchgeführt: Erst führten wir eine Fourier-Transformation durch; dies ist eine unitäre Transformation, anschließend diagonalisierten wir die $3r \times 3r$ -Matrizen ebenfalls durch eine unitäre Transformation.

Da nach (4.21) $D(-\mathbf{q}) = D^*(\mathbf{q})$, kann man $c_{i\alpha}^\lambda(-\mathbf{q}) = c_{i\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q})$ wählen. Dann erhält man

$$P_\lambda(-\mathbf{q}) = P_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), \quad Q_\lambda(-\mathbf{q}) = Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}). \quad (6.8)$$

Die Kommutatoren erhält man zu

$$[Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), Q_\mu(\mathbf{q}')] = 0, \quad [P_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = 0. \quad (6.9)$$

und

$$[Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = \sum_{n\alpha, mj\beta} U_{n\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q}) \sqrt{M_i} U_{mj\beta}^\mu(\mathbf{q}') \frac{1}{\sqrt{M_j}} [\eta_{n\alpha}, p_{mj\beta}]. \quad (6.10)$$

Der Kommutator auf der rechten Seite ergibt $i\hbar \delta_{nm} \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$. Damit reduziert sich der Kommutator auf

$$[Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = \sum_{n\alpha} U_{n\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q}) U_{n\alpha}^\mu(\mathbf{q}') = i\hbar (U U^\dagger)_{\mu\mathbf{q}', \lambda\mathbf{q}} = i\hbar \delta_{\lambda, \mu} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}. \quad (6.11)$$

Der Hamilton-Operator selbst nimmt die Diagonalform

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mathbf{q}} (P_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) P_\lambda(\mathbf{q}) + \omega_\lambda^2(\mathbf{q}) Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) Q_\lambda(\mathbf{q})) \quad (6.12)$$

in Form von entkoppelten Oszillatoren an. (Lediglich die Oszillatoren für \mathbf{q} und $-\mathbf{q}$ sind noch miteinander verknüpft.

6.b Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Wir definieren die Phononen-Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren durch

$$a_\lambda(\mathbf{q}) := \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(\omega_\lambda(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) + iP_\lambda(\mathbf{q})), \quad (6.13)$$

$$a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) := \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(\omega_\lambda(\mathbf{q})Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) - iP_\lambda^\dagger(\mathbf{q})). \quad (6.14)$$

Für die Kommutatoren findet man

$$\begin{aligned} [a_\lambda(\mathbf{q}), a_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] &= \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_\lambda(\mathbf{q})\omega_\mu(\mathbf{q}')}}(-i\omega_\lambda(\mathbf{q})[Q_\lambda(\mathbf{q}), P_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] + i\omega_\mu(\mathbf{q}')[P_\lambda(\mathbf{q}), Q_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] \\ &= \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_\lambda(\mathbf{q})\omega_\mu(\mathbf{q}')}}(\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})\delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \hbar\omega_\mu(\mathbf{q}')\delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}) = \delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Ähnlich zeigt man auch

$$[a_\lambda(\mathbf{q}), a_\mu(\mathbf{q}')] = 0, \quad [a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), a_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] = 0. \quad (6.16)$$

Für den Phonon-Teilchenzahl-Operator erhalten wir dann

$$a_\lambda^\dagger(\mathbf{q})a_\lambda(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})} \left(\omega_\lambda^2(\mathbf{q})Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) + P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})P_\lambda(\mathbf{q}) \right) + \frac{i}{2\hbar} \left(Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q})P_\lambda(\mathbf{q}) - P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) \right). \quad (6.17)$$

Unter Verwendung von (6.8) und (6.11) können wir den letzten Term umformen $P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) = Q_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})P_\lambda(-\mathbf{q}) - i\hbar$. Berücksichtigen wir noch, dass $\omega_\lambda(-\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q})$, so können wir den Hamilton-Operator durch den Phonon-Teilchenzahl-Operator ausdrücken

$$H = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})(a_\lambda^\dagger(\mathbf{q})a_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \quad (6.18)$$

Der Grundzustand des Hamilton-Operators ist gegeben durch $a_\lambda(\mathbf{q})|0\rangle = 0$. Der Zustand mit jeweils $n_\lambda(\mathbf{q})$ Phononen in der (λ, \mathbf{q}) -Mode

$$|\{n_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle = \prod_{\lambda\mathbf{q}} \left(\frac{1}{\sqrt{n_\lambda(\mathbf{q})!}} (a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}))^{n_\lambda(\mathbf{q})} \right) |0\rangle \quad (6.19)$$

mit der Energie

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})(n_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \quad (6.20)$$

Für spätere Zwecke drücken wir die Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ durch die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren aus. Hierzu machen wir die orthogonale Transformation(6.7) rückgängig,

$$\sqrt{M}\boldsymbol{\eta} = U^\dagger Q, \quad (6.21)$$

und setzen aus (6.13) und (6.14)

$$Q_\lambda(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})), \quad (6.22)$$

was explizit

$$\boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M_i\omega_\lambda(\mathbf{q})}} c_i^\lambda(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} (a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})) \quad (6.23)$$

ergibt. Ersetzen wir für den a^\dagger -Term noch $-\mathbf{q}$ durch \mathbf{q} , so können wir

$$\boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda\mathbf{q}} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2M_i\omega_\lambda(\mathbf{q})}} c_i^{\lambda*}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) + \text{h.c.} \right) \quad (6.24)$$

schreiben.

7 Phononenstatistik und spezifische Wärme

Siehe Hunklinger-Enss: 5.5 Spezifische Wärmekapazität S. 155-167

7.a Bose-Statistik

Wie wir gesehen haben, können harmonische Phononen

$$n_\lambda(\mathbf{q}) = 0, 1, 2, \dots \quad (7.1)$$

fach angeregt sein; sie genügen daher der Bose-Statistik. Die Wahrscheinlichkeit für eine n -fache Besetzung beträgt

$$p_n = \frac{r^{n+\frac{1}{2}}}{\sum_{n'=0}^{\infty} r^{n'+\frac{1}{2}}} = r^n - r^{n+1}, \quad r = e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \quad (7.2)$$

Als mittlere Besetzung ergibt sich die Bose-Funktion

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} n p_n = 0 \cdot (1-r) + 1 \cdot (r-r^2) + 2 \cdot (r^2-r^3) + \dots = r + r^2 + r^3 + \dots = \frac{r}{1-r} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (7.3)$$

7.b Energie und spezifische Wärme I

Die mittlere Energie (Energie-Erwartungswert) ist dann

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} + \frac{1}{2} \right). \quad (7.4)$$

Bei **hohen Temperaturen** $k_B T \gg \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})$ für alle Äste λ und Wellenvektoren \mathbf{q} folgt

$$\frac{1}{e^x - 1} + \frac{1}{2} = \frac{1}{x + \frac{x^2}{2} + \dots} + \frac{1}{2} = \frac{1}{x} + O(x). \quad (7.5)$$

Damit folgt

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} k_B T + O\left(\frac{1}{k_B T}\right) = 3rNk_B T + O\left(\frac{1}{k_B T}\right). \quad (7.6)$$

Der führende Term ist das klassische Ergebnis (Dulong-Petit). Bei **tiefen Temperaturen**, das heißt sobald $k_B T \gg \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})$ für die optischen Phononen, sind deren Beiträge (bis auf das $\hbar\omega/2$) vernachlässigbar. Für die akustischen Phononen kann man bei hinreichend tiefen Temperaturen

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = c_\lambda(\Omega)q \quad (7.7)$$

setzen. Dabei sind die $c_\lambda(\Omega)$ die Schallgeschwindigkeiten der drei akustischen Äste in Richtung Ω . Dann folgt für die Energie

$$E = E_0 + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar c_\lambda(\Omega)q \frac{1}{e^{\frac{\hbar c_\lambda q}{k_B T}} - 1} = E_0 + \frac{V_P}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int d^3q \hbar c_\lambda q \frac{1}{e^{\frac{\hbar c_\lambda q}{k_B T}} - 1}. \quad (7.8)$$

Substituieren wir nun im Integral

$$x := \frac{\hbar c_\lambda}{k_B T} q, \quad d^3q = q^2 dq d\Omega = \left(\frac{k_B T}{\hbar c_\lambda(\Omega)} \right)^3 x^2 dx d\Omega, \quad (7.9)$$

dann folgt

$$E = E_0 + \frac{V_P (k_B T)^4}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\lambda} \int d\Omega \frac{1}{c_\lambda^3(\Omega)} \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (7.10)$$

Dabei ergibt die λ -Summe über die drei akustischen Äste und das Integral über den Raumwinkel Ω gerade $3 \cdot 4\pi c^{-3}$. Das x -Integral ist bis $\frac{\hbar c}{k_B T} q_{\max}$ zu erstrecken, was im Tieftemperatur-Bereich sehr groß wird, so dass wir bis $x_{\max} = \infty$ integrieren können. Dann erhält man mit

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15} \quad (7.11)$$

den Beitrag der Phononen zur Energie

$$E - E_0 = \frac{\pi^2}{10\hbar^3} V_P (k_B T)^4 c^{-3}, \quad (7.12)$$

woraus dann auch das T^3 -Gesetz der spezifischen Wärme folgt. Speziell für einen isotropen Körper hängt c nicht von der Richtung ab. Man erhält dann

$$\overline{c^{-3}}_{\text{iso}} = \frac{1}{3c_l^3} + \frac{2}{3c_t^3}. \quad (7.13)$$

7.c Zustandsdichte

Es sei $z(\omega)d\omega$ die Anzahl von Phononenzuständen im Intervall $\omega \dots \omega + d\omega$. Dann können wir die Energie schreiben als

$$E - E_0 = \int d\omega z(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (7.14)$$

Für die akustischen Phononen hat man im linearen Bereich $\omega \propto q$

$$\int_0^{\omega_0} z(\omega) d\omega = C\omega_0^3, \quad (7.15)$$

da die Ausdehnung des Bereichs der Phononen im q -Raum in allen drei Richtungen proportional ω_0 ist. Durch Ableiten nach der oberen Grenze folgt

$$z(\omega) = 3C\omega^2. \quad (7.16)$$

Wir berechnen hieraus die Energie bei tiefen Temperaturen

$$E - E_0 = 3C \int d\omega \hbar\omega^3 \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} = 3C\hbar \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^4 \int dx \frac{x^3}{e^x - 1} = 3C\hbar \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^4 \frac{\pi^4}{15} \quad (7.17)$$

Durch Vergleich mit (7.12) finden wir

$$C = \frac{V_P}{2\pi^2} c^{-3}, \quad z(\omega) = \frac{3V_P}{2\pi^2} \omega^2 c^{-3}. \quad (7.18)$$

7.d Debye-Frequenz und Phononen-Energie II

Die Zustandsdichte (7.18) gilt nur für niedrige Frequenzen. Da keine beliebig hohen Frequenzen auftreten, muss sie für hinreichend große Frequenzen verschwinden. Debye setzte daher näherungsweise

$$z(\omega) = \begin{cases} \frac{3V_P}{2\pi^2} \omega^2 c^{-3} & \omega \leq \omega_D \\ 0 & \omega > \omega_D \end{cases} \quad (7.19)$$

an. Das heißt, er nahm an, dass das ω^2 -Gesetz bis zu einer Grenzfrequenz ω_D gilt, es aber keine Phononen mit höheren Frequenzen gibt. Man bezeichnet diese Abschneidfrequenz heute als Debye-Frequenz. Die Debye-Frequenz selbst errechnet sich daraus, dass es insgesamt $3N$ akustische Phononen gibt,

$$\int_0^\infty d\omega = 3N = \frac{V_P}{2\pi^2} \omega_D^3 c^{-3}. \quad (7.20)$$

Daraus erhält man die Debye-Frequenz.

Wir können nun die Energie ausdrücken als

$$E - E_0 = \frac{3V_P}{2\pi^2} \overline{c^{-3}} \int_0^{\omega_D} d\omega \hbar \omega^3 \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} = \frac{3V_P}{2\pi^2} \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3} \overline{c^{-3}} \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}} dx \frac{x^3}{e^x - 1}. \quad (7.21)$$

Mit der Debye-Temperatur $k_B \Theta_D = \hbar \omega_D$ erhält man aus (7.20)

$$V_P \overline{c^{-3}} = \frac{6\pi^2 N}{\omega_D^3} = 6\pi^2 N \left(\frac{\hbar}{k_B \Theta_D} \right)^3 \quad (7.22)$$

und damit

$$E - E_0 = 9N k_B \frac{T^4}{\Theta_D^3} \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (7.23)$$

Ähnlich erhält man durch Differenzieren von (7.21) nach der Temperatur die spezifische Wärme, die von den Phononen herrührt

$$c_D(t) = \frac{dE}{dT} = 3N k_B \frac{T^3}{\Theta_D^3} \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{x^4 dx}{(e^x - 1)^2}, \quad (7.24)$$

eine Funktion, die bis auf den Faktor N nur vom Verhältnis T/Θ_D abhängt. Allerdings wird die Zustandsdichte von der Debye-Näherung im Allgemeinen abweichen, so dass diese Funktion nur eine Näherung darstellt.

Zusätzlich hat man optische Phononen. Im einfachsten Fall nimmt man an, sie haben unabhängig von Wellenvektor und den $3(r-1)$ Ästen die gleiche (Einstein-)Frequenz ω_E . Dann erhält man den Beitrag

$$c_E(T) = 3N(r-1) k_B \frac{(\Theta_E/T)^2}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2} \quad (7.25)$$

mit der Einstein-Temperatur Θ_E definiert durch $k_B \Theta_E = \hbar \omega_E$.

Selbst wenn man die für harmonische Phononen korrekte Gleichung (7.14) verwendet, hat man für höhere Temperaturen Abweichungen auf Grund der Anharmonizitäten zu erwarten.

8 Neutronen-Streuung und Debye-Waller-Faktor

Siehe Hunklinger-Enss: 5.4 Experimentelle Bestimmung von Dispersionskurven S. 141-155

Wir gehen aus von einem Anfangszustand eines einfallenden Neutrons mit Impuls $\hbar\mathbf{k}_0$ und einem Festkörper, dessen Phononen $n_\lambda^0(\mathbf{q})$ -fach angeregt sind,

$$\Psi_0 = c_0 e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} |\{n_\lambda^0(\mathbf{q})\}\rangle \quad (8.1)$$

Wir betrachten nun die Streuwelle bei Streuung an Atomen der Streulänge f_i . Man findet für die Streuwelle

$$\Psi_{\text{str}} = c_0 \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r} \sum F_{n,n^0}(\mathbf{K}) |\{n_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle \quad (8.2)$$

mit

$$\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0, \quad \mathbf{k} = k \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad \frac{\hbar^2}{2m_n} k^2 + E(\{n_\lambda\}) = \frac{\hbar^2}{2m_n} k_0^2 + E(\{n_\lambda^0\}) \quad (8.3)$$

und

$$F_{n,n^0}(\mathbf{K}) = \sum_{mi} \langle \{n_\lambda(\mathbf{q})\} | f_i e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_{mi} + \boldsymbol{\eta}_{mi})} | \{n_\lambda^0(\mathbf{q})\} \rangle. \quad (8.4)$$

Der einfallende Neutronenstrom ist gegeben durch $J_0 = c_0^2 A v_0$, wobei A die Querschnittsfläche des Probekörpers und v_0 die Geschwindigkeit der Neutronen ist. Der gestreute Strom ergibt sich zu $dJ_1 = \sum_{\{n\}} v |F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2 c_0^2 d\Omega$. Daraus errechnet sich der Wirkungsquerschnitt (pro Elementarzelle)

$$\frac{dJ_1}{d\Omega} = \frac{N}{A} \frac{d\sigma}{d\Omega} J_0 = N \frac{d\sigma}{d\Omega} c_0^2 v_0, \quad (8.5)$$

d.h. zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{N} \sum_{\{n\}} \frac{k}{k_0} |F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2. \quad (8.6)$$

Mitteln wir über die Besetzungen $\{n^0\}$ und ziehen wir die Abhängigkeit von ω heraus $\hbar\omega = E_n - E_{n^0}$, so folgt der doppelt differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} &= \frac{1}{N} \sum_{\{n\}, \{n^0\}} \frac{k}{k_0} |F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2 \delta(\omega - \frac{1}{\hbar}(E_n - E_{n^0})) p(\{n^0\}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{ij\delta n} \frac{k}{k_0} f_i f_j \delta(\omega - \sum \omega_\lambda(\mathbf{q}) \delta n_\lambda(\mathbf{q})) \sum_{mn} e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_{mi} - \mathbf{R}_{nj})} \\ &\quad \times \sum_{\{n^0\}} \langle \{n^0 + \delta n\} | e^{-i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\eta}_{mi}} | \{n^0\} \rangle \langle \{n^0\} | e^{i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\eta}_{nj}} | \{n^0 + \delta n\} \rangle p(\{n^0\}), \end{aligned} \quad (8.7)$$

wobei $p(\{n^0\})$ die Besetzungswahrscheinlichkeit im Festkörper angibt.

Wir entwickeln nun unter Verwendung von (6.24)

$$\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda\mathbf{q}} \left(e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} \gamma_i^\lambda(\mathbf{q}) a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) + \text{h.c.} \right), \quad \gamma_i^\lambda(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2M_i \omega_\lambda(\mathbf{q})}} \mathbf{K} \cdot \mathbf{c}_i^{*\lambda}(\mathbf{q}). \quad (8.8)$$

Die Matrixelemente $\langle n^0 + \delta n | \dots | n^0 \rangle$ können wir nun faktorisieren in ein Produkt von Matrixelemente für jeweils einen Oszillator

$$\langle \{n^0 + \delta n\} | e^{-i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\eta}_{mi}} | \{n^0\} \rangle = \prod_{\lambda\mathbf{q}} \langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) + \delta n_\lambda(\mathbf{q}) | \exp\left(-\frac{i}{\sqrt{N}} (\gamma_i^\lambda(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) + \text{h.c.})\right) | n_\lambda^0(\mathbf{q}) \rangle. \quad (8.9)$$

Da sich die Besetzungszahlen für die meisten Phononen-Moden nicht oder nur um eins verändern, genügt es, die Matrix-Elemente zu betrachten, bei denen die Besetzungszahl ungeändert bleibt oder

sich nur um ± 1 ändern. Da bei fast allen die Änderung der Besetzungszahl 0 ist und N solche Matrix-Elemente zu multiplizieren sind, müssen wir in der Entwicklung der Exponentialfunktion auch noch die Terme der Ordnung $1/N$ mitnehmen. Falls alle $\delta n = 0$ (elastische Streuung), dann folgt durch Entwicklung der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned} \prod_{\lambda \mathbf{q}} \langle n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) | \exp(\dots) | n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) \rangle &= \prod_{\lambda \mathbf{q}} \langle n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) | 1 - |\gamma_i^{\lambda}(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{2N} (a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + a_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger}) | n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) \rangle \\ &= \exp\left(-\frac{1}{N} \sum_{\lambda \mathbf{q}} |\gamma_i^{\lambda}(\mathbf{q})|^2 (n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) + \frac{1}{2})\right) =: \exp(-\tilde{W}_i). \end{aligned} \quad (8.10)$$

Einige Phononen können aber angeregt oder absorbiert werden. Für diese einzelnen ersetzt man den entsprechenden Faktor im Produkt über alle λ, \mathbf{q} (der praktisch gleich 1 ist) durch

$$\begin{aligned} \langle n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) + 1 | \exp(\dots) | n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) \rangle &= \langle n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) + 1 | \frac{-i}{\sqrt{N}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} \gamma_i^{\lambda}(\mathbf{q}) a_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{q}) | n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) \rangle \\ &= \frac{-i}{\sqrt{N}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} \gamma_i^{\lambda}(\mathbf{q}) \sqrt{n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) + 1}, \end{aligned} \quad (8.11)$$

$$\begin{aligned} \langle n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) - 1 | \exp(\dots) | n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) \rangle &= \langle n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) - 1 | \frac{i}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} \gamma_i^{\lambda*}(\mathbf{q}) a_{\lambda}(\mathbf{q}) | n_{\lambda}^0(\mathbf{q}) \rangle \\ &= \frac{i}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m} \gamma_i^{\lambda*}(\mathbf{q}) \sqrt{n_{\lambda}^0(\mathbf{q})}. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Hierbei wurde ebenfalls die Exponentialfunktion entwickelt. Die 1 trägt nichts bei, der Beitrag linear im Erzeuger bzw. Vernichter ist der Wesentliche, da die höheren wegen der Faktoren $1/\sqrt{N}$ für große Systeme vernachlässigbar sind.

Mit jeder Phononenanregung ($\delta n = 1$) ist ein Phasenfaktor $e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m}$ verknüpft, mit jeder Phononenvernichtung ein Faktor $e^{+i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m}$ verknüpft. Bei der Mittelung über die verschiedenen Besetzungen n^0 wird aus \tilde{W}_i

$$W_i(\mathbf{K}) = \frac{1}{N} \sum_{\lambda \mathbf{q}} |\gamma_i^{\lambda}(\mathbf{q})|^2 (\bar{n}_{\lambda}(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \quad (8.13)$$

Unter Verwendung des Ausdrucks (8.8) für $\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\eta}_{mi}$ folgt

$$W_i(\mathbf{K}) = \frac{1}{2} \overline{(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\eta}_{mi})^2}. \quad (8.14)$$

Setzen wir die Ausdrücke in den differentiellen Wirkungsquerschnitt ein, so folgt

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} &= \frac{1}{N} \frac{k}{k_0} \sum_{\{\delta n\}ij} f_i f_j e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_{0i} - \mathbf{R}_{0j})} \delta(\omega - \sum_{\lambda \mathbf{q}} \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) \delta n_{\lambda}(\mathbf{q})) \\ &\times \sum_{mn} e^{-i(\mathbf{K} + \sum \delta n_{\lambda}(\mathbf{q}) \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} e^{-W_i(\mathbf{K}) - W_j(\mathbf{K})} \prod_{\lambda \mathbf{q}} S_{\lambda \mathbf{q}, i, j}(\delta n_{\lambda}(\mathbf{q})) \end{aligned} \quad (8.15)$$

mit

$$S(0) = 1, \quad (8.16)$$

$$S_{\lambda, \mathbf{q}, i, j}(+1) = \frac{1}{N} \gamma_i^{\lambda}(\mathbf{q}) \gamma_j^{\lambda*}(\mathbf{q}) (\bar{n}_{\lambda}(\mathbf{q}) + 1), \quad (8.17)$$

$$S_{\lambda, \mathbf{q}, i, j}(-1) = \frac{1}{N} \gamma_i^{\lambda*}(\mathbf{q}) \gamma_j^{\lambda}(\mathbf{q}) \bar{n}_{\lambda}(\mathbf{q}). \quad (8.18)$$

Es bleibt die Summe über m und n auszuwerten. Im Gitter mit periodischen Randbedingungen ergibt sie

$$\sum_{mn} e^{-i(\mathbf{K} + \sum \delta n_{\lambda}(\mathbf{q}) \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} = N^2 \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{K} + \sum \delta n_{\lambda}(\mathbf{q}) \mathbf{q}, \mathbf{G}} \quad (8.19)$$

wobei \mathbf{G} die reziproken Gittervektoren sind. Wir wollen nun das Kronecker- δ in ein Dirac- δ umwandeln. Hierzu verwenden wir aus (4.27)

$$\sum_{\mathbf{k}} \dots \rightarrow \frac{V_P}{(2\pi)^3} \int d^3k \dots \quad (8.20)$$

woraus dann mit

$$\sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k},0} = 1 = \int d^3k \delta^3(\mathbf{k}) \quad (8.21)$$

$$\delta_{\mathbf{k},0} \rightarrow \frac{(2\pi)^3}{V_P} \delta^3(\mathbf{K}) \quad (8.22)$$

folgt. Damit haben wir

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_{\text{coh}}}{d\Omega d\omega} &= \frac{k}{k_0} \frac{(2\pi)^3}{V_Z} \sum_{\mathbf{G}, \{\delta n\}} \delta(\omega - \sum_{\lambda\mathbf{q}} \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) \delta n_{\lambda}(\mathbf{q})) \delta^3(\mathbf{K} + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \delta n_{\lambda}(\mathbf{q}) \mathbf{q} - \mathbf{G}) \\ &\times \sum_{ij} f_i f_j e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_{0i} - \mathbf{R}_{0j})} e^{-W_i(\mathbf{K}) - W_j(\mathbf{K})} \prod_{\lambda\mathbf{q}} S_{\lambda\mathbf{q},i,j}. \end{aligned} \quad (8.23)$$

Man bezeichnet diesen Wirkungsquerschnitt als kohärenten Wirkungsquerschnitt. Es wurde angenommen, dass das Streuverhalten nur von den jeweiligen Platz in der Elementarzelle, das heißt von i abhängt. Wir finden dann zum einen den Debye-Waller-Faktor e^{-2W} oder für verschiedene Atomsorten $e^{-W_i(\mathbf{K}) - W_j(\mathbf{K})}$. Er hängt nach (8.13) von \mathbf{K} und von der Temperatur ab. Weiter beobachten wir die Energie-Erhaltung, die im $\delta(\omega - \dots)$ steckt, das heißt es gilt

$$\frac{\hbar^2}{2m_n} k^2 + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) \delta n_{\lambda}(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2}{m_n} k_0^2. \quad (8.24)$$

Weiter gibt es noch eine Quasi-Impuls-Erhaltung, die in der zweiten δ -Funktion steckt,

$$\mathbf{k} + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \delta n_{\lambda}(\mathbf{q}) \mathbf{q} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{G}. \quad (8.25)$$

Dies ist nicht die Impuls-Erhaltung. Abgesehen von den akustischen "Phononen" mit $\mathbf{q} = 0$, die gar keine Oszillatoren sind, tragen die Phononen keinen Impuls, da sie an den verschiedenen Orten in unterschiedlicher Phase schwingen. Tatsächlich wird der Impuls vollständig an diese akustischen "Phononen" mit $\mathbf{q} = 0$ übertragen, das heißt in die Translationsbewegung. Die Quasi-Impuls-Erhaltung rührt nicht von der Translationsinvarianz her (in dem Sinne, dass die Energie des Körpers invariant gegenüber einer Verschiebung aller Atome um einen konstanten Vektor ist), sondern von der Gitterperiodizität. Es handelt sich also um eine zusätzliche Symmetrie, die zu der zusätzlichen Erhaltung des Quasi-Impulses bis auf reziproke Gittervektoren \mathbf{G} führt.

Falls alle $\delta n = 0$ sind, haben wir die elastische Streuung mit der Energie-Erhaltung, $\delta(\omega)$, die als Bragg-Streuung auftritt, $\sum_{\mathbf{G}} \delta^3(\mathbf{K} - \mathbf{G})$, und mit der Amplitude $\sum_i f_i e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_{0i}} e^{-W_i(\mathbf{K})}$.

Falls ein $\delta n = \pm 1$, dann erhält man die Faktoren $\delta(\omega \mp \omega_{\lambda}(\mathbf{q}))$ und $\delta^3(\mathbf{K} \pm \mathbf{q} - \mathbf{G})$. Bis auf reziproke Gittervektoren ändert sich der Impuls des Neutrons um den Quasi-Impuls des Phonons. Die Faktoren $\bar{n}_{\lambda}(\mathbf{q}) + 1$ für die Erzeugung eines Phonons und $\bar{n}_{\lambda}(\mathbf{q})$ für die Vernichtung ergeben die Stokes- und die Anti-Stokes-Linie. Diese Ein-Phonon-Prozesse erlauben die Messung der Phonondispersion. Das Intensitätsverhältnis von Stokes- zu Anti-Stokes-Linie ist durch $(\bar{n} + 1)/\bar{n} = e^{\hbar\omega/(k_B T)}$ gegeben.

Falls zwei $\delta n = \pm 1$, hat man für festes $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \pm \mathbf{q}_1 \pm \mathbf{q}_2$ eine kontinuierliche Verteilung von $\pm\omega(\mathbf{q}_1) \pm \omega(\mathbf{q}_2)$.

Die Verteilung auf 0-, 1-, 2-Phononen-Prozesse hängt von der Temperatur ab. Der Debye-Waller-Faktor bietet für die Verteilung eine Abschätzung. Berechnen wir für ein primitives Gitter das folgende Integral über den Streuquerschnitt, wobei wir die Beiträge, bei denen insgesamt ν Phononen erzeugt und absorbiert werden, mit p^{ν} multiplizieren,

$$\begin{aligned} \int d\omega d^3K \frac{k_0}{k} \frac{d^2\sigma_{\text{coh}}}{d\Omega d\omega} p^{\sum |\delta n|} &= \frac{(2\pi)^3}{V_Z} f^2 e^{-2W} \prod_{\lambda\mathbf{q}} \sum_{\delta n} S_{\lambda\mathbf{q}}(\delta n) p^{|\delta n|} \\ &= \frac{(2\pi)^3}{V_Z} f^2 e^{-2W} e^{\frac{2}{N}} \sum_{\lambda\mathbf{q}} p^{|\gamma^{\lambda}(\mathbf{q})|^2 (\bar{n}_{\lambda}(\mathbf{q}) + \frac{1}{2})} = \frac{(2\pi)^3}{V_Z} f^2 e^{-2W + 2pW}. \end{aligned} \quad (8.26)$$

Durch Entwickeln nach p erhält man die Beiträge für verschiedene $\sum |\delta n|$. Gegenüber dem elastischen Streuquerschnitt ist der Beitrag für $\sum |\delta n| = 1$ um den Faktor $2W$ kleiner oder größer, der für $\sum |\delta n| = 2$ um den Faktor $2W^2$. Summiert man alle Beiträge auf ($p = 1$), so hebt sich der Debye-Waller-Faktor weg.

Inkohärente Streuung

Bisher waren wir davon ausgegangen, dass das Gitter streng periodisch ist, das heißt auch, dass an allen Gitterorten, die sich um Gittervektoren \mathbf{R}_m unterscheiden, das gleiche Isotop eines Elements mit der gleichen Streulänge sitzt. Dies ist aber in der Regel nicht der Fall, was dazu führt, dass auch die Streulängen unterschiedlich sind. Wir wollen nun annehmen, dass die Isotope zufällig und unkorreliert verteilt sind. Dann hängt die Streulänge nicht nur von i , sondern auch von der Gitterzelle m ab. Dann hat man im Ausdruck für den Wirkungsquerschnitt (8.15) die Mittelung über

$$\overline{f_{mi}f_{nj}} = \overline{f_i} \overline{f_j} + \delta_{mn} \delta_{ij} (\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2) \quad (8.27)$$

vorzunehmen. Der erste Term liefert den oben angegebenen Beitrag; man muss nur f_i durch den Mittelwert $\overline{f_i}$ ersetzen. Der zweite Term liefert aber den inkohärenten Beitrag

$$\frac{d^2\sigma_{\text{inc}}}{d\Omega d\omega} = \frac{k}{k_0} \sum_{\{\delta n\}_i} (\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2) \delta(\omega - \sum_{\lambda \mathbf{q}} \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) \delta n_{\lambda}(\mathbf{q})) e^{-2W_i(\mathbf{K})} \prod_{\lambda \mathbf{q}} S_{\lambda, \mathbf{q}, i, i}. \quad (8.28)$$

Man hat nach wie vor die Energieerhaltung, aber die Delta-Funktion für die Quasi-Impuls-Erhaltung fehlt. Einen ähnlichen Beitrag erhält man für Ionen mit Gesamtspin ungleich Null, da die Streulänge vom Gesamtspin Ion plus Neutron abhängt.

Abschätzung des Debye-Waller-Faktors im kubisch primitiven Kristall:

Aus

$$W(\mathbf{K}) = \frac{\hbar}{2mN} \sum_{\lambda \mathbf{q}} |\mathbf{K} \cdot \mathbf{c}_{\lambda}(\mathbf{q})|^2 \frac{\overline{n}_{\lambda}(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}}{\omega_{\lambda}(\mathbf{q})} \quad (8.29)$$

folgt nach Mittelung $|\mathbf{K} \cdot \mathbf{c}_{\lambda}(\mathbf{q})|^2 = \mathbf{K}^2 |\mathbf{c}_{\lambda}(\mathbf{q})|^2 / 3 = K^2 / 3$ und Verwendung der Debye-Näherung

$$W(\mathbf{K}) = \frac{\hbar \mathbf{K}^2}{6MN} \sum_{\lambda \mathbf{q}} \frac{\overline{n} + \frac{1}{2}}{\omega} = \frac{3\hbar^2 K^2}{2M} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^2 \frac{1}{2k_B \Theta_D} \int_0^{\Theta_D/T} x \frac{e^x + 1}{e^x - 1} dx. \quad (8.30)$$

Der Integrand kann für große x durch x , für kleine x durch 2 approximiert werden. Daraus folgt

$$\begin{aligned} \Theta_D \gg T & \quad \int \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^2, & W &= \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 K^2}{2M} \frac{1}{k_B \Theta_D} & (\text{Nullpunktsschwingungen}) \\ \Theta_D \ll T & \quad \int \approx 2 \frac{\Theta_D}{T} & W &= 3 \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \frac{k_B T}{(k_B \Theta_D)^2} & (\text{Ausdehnungsquadrat} \propto T) \end{aligned} \quad (8.31)$$

Mössbauer-Effekt

Beim Mössbauer-Effekt geht ein angeregtes Atom unter Abgabe eines γ -Quants in seinen Grundzustand über. Dies ist ein Prozess, der an einem Atom stattfindet. Der Rückstoss, den dieses eine Atom erleidet, wird nun auf eine unterschiedliche Anzahl von Phononen übertragen. Dabei kommt auch der Fall vor, dass kein Phonon angeregt wird. Die Verteilung ist ähnlich wie beim inkohärenten Wirkungsquerschnitt. An die Stelle des Faktors $\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2$ tritt die Zerfalls-Wahrscheinlichkeit des angeregten Zustands. Die Wahrscheinlichkeit, dass kein Phonon angeregt (oder absorbiert) wird ist durch den Debye-Waller-Faktor e^{-2W_i} gegeben. Es gibt umgekehrt auch den Fall, dass die Strahlung wieder absorbiert wird (Resonanz-Absorption). Da die Linie sehr scharf ist, können damit geringe Energieverschiebungen beobachtet werden, zum Beispiel der Energie-Verlust eines γ -Quants, das sich im Gravitationsfeld der Erde um etwa 10 m nach oben bewegt.

9 Polaritonen

Siehe Hunklinger-Enss: 11.2 Elektrische Polarisation S. 370-378

9.a Lagrange-Funktion

In diesem Abschnitt wollen wir das Polariton-Problem, das heißt die Kopplung zwischen optischen Phononen und elektrodynamischem Feld in eine quantenmechanische Form bringen. Wir tun das aus zwei Gründen: Zum einen ist es eine gute Gelegenheit, das elektromagnetische Feld in quantisierter Form einzuführen, zum anderen kann man an dieser Stelle lernen, wie man mit bosonischen Erzeugern und Vernichtern umgeht, wenn der Hamilton-Operator sich nicht als Teilchenzahl-Operator schreiben lässt. Allerdings behandeln wir das Problem in etwas vereinfachter Form: Wir vernachlässigen den elektronischen Anteil zur Dielektrizitätskonstante und berücksichtigen hier den Unterschied zwischen lokalem und mittlerem elektrischen Feld nicht.

Wir gehen aus von der Lagrange-Dichte für das elektromagnetische Feld

$$L_F = -\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = -\frac{1}{16\pi} (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu)(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) = -\frac{1}{8\pi} (\text{rot}\mathbf{A})^2 + \frac{1}{8\pi} \left(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \text{grad}\Phi\right)^2. \quad (9.1)$$

Der rein mechanische Anteil der Lagrange-Funktion lässt sich

$$L_M = \rho_1 \dot{\boldsymbol{\eta}}_1^2 + \rho_2 \dot{\boldsymbol{\eta}}_2^2 - \frac{C}{2} (\boldsymbol{\eta}_1 - \boldsymbol{\eta}_2)^2 \quad (9.2)$$

schreiben. Wir zerlegen in den akustischen und optischen Anteil (der Einfachheit halber haben wir hier nur den Beitrag zur potentiellen Energie mitgenommen, der von der Verschiebung der beiden Untergitter gegeneinander herrührt.)

$$\boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{\eta}_a + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \boldsymbol{\eta}_o, \quad \boldsymbol{\eta}_2 = \boldsymbol{\eta}_a - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \boldsymbol{\eta}_o. \quad (9.3)$$

Dann schreibt sich der mechanische Anteil der Lagrange-Funktion

$$L_M = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} \dot{\boldsymbol{\eta}}_a^2 + \frac{\hat{\rho}}{2} \dot{\boldsymbol{\eta}}_o^2 - \frac{C}{2} \boldsymbol{\eta}_o^2, \quad \hat{\rho} = \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_1 + \rho_2}, \quad (9.4)$$

wobei wir $\hat{\rho}$ als reduzierte Massendichte bezeichnen können. Im Folgenden lassen wir den akustischen Freiheitsgrad $\boldsymbol{\eta}_a$ weg und lassen bei dem optischen Freiheitsgrad den Index $_o$ weg.

An dieses wollen wir nun die optischen Phononen ankoppeln. Dieser Kopplungsterm hat die Form

$$L_K = -\frac{1}{c} A^\mu j_\mu = \frac{1}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{j}_P - \Phi \rho_P \quad (9.5)$$

Mit der Polarisations-Stromdichte $\mathbf{j}_P = \dot{\mathbf{P}}$ und der Polarisations-Ladungsdichte $\rho_P = -\text{div}\mathbf{P}$ folgt

$$L_K = \frac{1}{c} \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{P}} + \Phi \text{div}\mathbf{P} = \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}) + \nabla(\phi\mathbf{P}) - \left(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \text{grad}\Phi\right) \cdot \mathbf{P}. \quad (9.6)$$

Da partielle Zeit- und Ortsableitungen nichts zu den Bewegungsgleichungen beitragen, können wir sie vernachlässigen. Berücksichtigen wir jetzt, dass $\mathbf{P} = nq(\boldsymbol{\eta}_1 - \boldsymbol{\eta}_2) = nq\boldsymbol{\eta}$, dann folgt

$$L_K = -nq \left(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \text{grad}\Phi\right) \cdot \boldsymbol{\eta}. \quad (9.7)$$

Zur weiteren Behandlung zerlegen wir die Vektorfelder in ihre longitudinalen und transversalen Anteile. Entwickeln wir $\boldsymbol{\eta}$ nach seinen Fourier-Komponenten,

$$\boldsymbol{\eta} = \frac{1}{\sqrt{V_P}} \sum_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\eta}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (9.8)$$

so bezeichnen wir die Anteile von $\boldsymbol{\eta}_{\mathbf{k}}$, die parallel zu \mathbf{k} sind, als longitudinal, die senkrecht dazu stehenden als transversal. Weiter wollen wir die Coulomb-Eichung $\text{div}\mathbf{A} = 0$ verwenden, dann ist das Vektorpotential rein transversal, und die Lagrange-Funktion kann in einen Anteil, der nur longitudinale Komponenten enthält, und einen, der nur transversale Komponenten enthält, zerlegt werden,

$$L = L_F + L_K + L_M = L_l + L_t \quad (9.9)$$

mit

$$L_l = \frac{1}{8\pi}(\text{grad}\Phi)^2 - nq\text{grad}\Phi \cdot \boldsymbol{\eta}_l + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\eta}_l^2 - \frac{C}{2}\eta_l^2 \quad (9.10)$$

$$L_t = -\frac{1}{8\pi}(\text{rot}\mathbf{A})^2 + \frac{1}{8\pi c^2}\dot{\mathbf{A}}^2 - \frac{nq}{c}\dot{\mathbf{A}}\dot{\boldsymbol{\eta}}_t + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\boldsymbol{\eta}}_t^2 - \frac{C}{2}\boldsymbol{\eta}_t^2. \quad (9.11)$$

Wir untersuchen zunächst den longitudinalen Anteil. Die Variation nach dem Coulomb-Potential ergibt

$$\frac{\delta L}{\delta \Phi} - \nabla \left(\frac{\delta L}{\delta \nabla \Phi} \right) = -\text{div} \left(\frac{1}{4\pi} \text{grad}\Phi + nq\boldsymbol{\eta}_l \right) = 0. \quad (9.12)$$

Dies ist die Gleichung für das Coulomb-Potential. Hierdurch wird $\text{grad}\Phi - 4\pi nq\boldsymbol{\eta}_l = 0$ und man kann

$$L_l = \frac{1}{8\pi}(\text{grad}\Phi - 4\pi nq\boldsymbol{\eta}_l)^2 + \frac{\hat{\rho}}{2}\dot{\eta}_l^2 - \frac{C + 4\pi n^2 q^2}{2}\eta_l^2 \quad (9.13)$$

schreiben, wobei das erste Quadrat identisch verschwindet und auch unter Variation verschwindet, so dass man es weglassen kann. Dann bleibt noch die Lagrangefunktion für den harmonischen Oszillator mit dem Freiheitsgrad η_l übrig. Man erhält das Quadrat der longitudinalen Eigenfrequenz

$$\omega_l^2 = \frac{C}{\hat{\rho}} + \frac{4\pi n^2 q^2}{\hat{\rho}}. \quad (9.14)$$

Falls bei der Bewegung der beiden Untergitter gegeneinander kein Dipolmoment entsteht ($q = 0$, Beispiel Diamant), dann ist ω_l durch den mechanischen Anteil $\omega_0 = \sqrt{C/\hat{\rho}}$ gegeben. Falls der mechanische Anteil nicht vorhanden wäre, dann bliebe die Schwingung mit der Plasmafrequenz $\omega_P = nq\sqrt{4\pi/\hat{\rho}}$. Insgesamt hat man also

$$\omega_l^2 = \omega_0^2 + \omega_P^2. \quad (9.15)$$

Wir betrachten nun den transversalen Anteil. Wir entwickeln das Vektorpotential

$$\mathbf{A} = \frac{1}{V_P} \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^\lambda A_{\lambda, \mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (9.16)$$

wobei λ zwei transversale Polarisierungen beschreibt. Wir verlangen

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^\lambda \cdot \mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{\lambda*} = \mathbf{e}_{-\mathbf{k}}^\lambda, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^\lambda \cdot \mathbf{e}_{-\mathbf{k}}^{\lambda'} = \delta_{\lambda, \lambda'}. \quad (9.17)$$

Damit die Felder reell sind, verlangt man z.B. $\boldsymbol{\eta}_{\mathbf{k}}^* = \boldsymbol{\eta}_{-\mathbf{k}}$. Wir finden dann den transversalen Anteil der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L}_t = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \left(-\frac{1}{8\pi} k^2 A_{\lambda, \mathbf{k}} A_{\lambda, -\mathbf{k}} + \frac{1}{8\pi c^2} \dot{A}_{\lambda, \mathbf{k}} \dot{A}_{\lambda, -\mathbf{k}} + \frac{\hat{\rho}}{2} \dot{\eta}_{\lambda, \mathbf{k}} \dot{\eta}_{\lambda, -\mathbf{k}} - \frac{C}{2} \eta_{\lambda, \mathbf{k}} \eta_{\lambda, -\mathbf{k}} - \frac{nq}{c} \dot{A}_{\lambda, \mathbf{k}} \eta_{\lambda, -\mathbf{k}} \right). \quad (9.18)$$

Hieraus erhält man die zu \mathbf{A} und $\boldsymbol{\eta}$ kanonisch konjugierten Impulse

$$M_{\lambda, \mathbf{k}} = \frac{d\mathcal{L}_t}{d\dot{A}_{\lambda, -\mathbf{k}}} = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_{\lambda, \mathbf{k}} - \frac{nq}{c} \eta_{\lambda, \mathbf{k}}, \quad (9.19)$$

$$\Pi_{\lambda, \mathbf{k}} = \frac{d\mathcal{L}_t}{d\dot{\eta}_{\lambda, -\mathbf{k}}} = \hat{\rho} \dot{\eta}_{\lambda, \mathbf{k}} \quad (9.20)$$

Mittels der Lagrange-Gleichungen

$$\frac{dM_{\lambda\mathbf{k}}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{L}_t}{\partial A_{\lambda-\mathbf{k}}}, \quad \frac{d\Pi_{\lambda\mathbf{k}}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{L}_t}{\partial \eta_{\lambda-\mathbf{k}}} \quad (9.21)$$

folgt

$$\frac{1}{4\pi c^2} \ddot{A}_{\lambda\mathbf{k}} - \frac{nq}{c} \dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}} = -\frac{1}{4\pi} k^2 A_{\lambda\mathbf{k}}, \quad (9.22)$$

$$\hat{\rho} \ddot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}} = -C \eta_{\mathbf{k}} - \frac{nq}{c} \dot{A}_{\lambda\mathbf{k}}. \quad (9.23)$$

Setzt man wieder das Zeitverhalten proportional zu $e^{-i\omega t}$ an, so muss die charakteristische Matrix

$$\begin{pmatrix} -\frac{\omega^2}{4\pi c^2} + \frac{k^2}{4\pi} & \frac{nqi\omega}{c} \\ -\frac{nqi\omega}{c} & -\omega^2 \hat{\rho} + C \end{pmatrix} \quad (9.24)$$

verschwinden, woraus sich die Eigenwertgleichung

$$\omega^4 - \omega^2 \omega_1^2 - \omega^2 c^2 k^2 + c^2 k^2 \omega_0^2 = 0 \quad (9.25)$$

für die Frequenzen ω der transversalen Polaritonen ergeben.

9.b Hamilton-Operator und Quantisierung

Wir können nun den Hamilton-Operator für den transversalen Anteil bestimmen,

$$H_t = \sum_{\lambda\mathbf{k}} (M_{\lambda-\mathbf{k}} \dot{A}_{\lambda\mathbf{k}} + \Pi_{\lambda-\mathbf{k}} \dot{\eta}_{\lambda\mathbf{k}}) - \mathcal{L}_t \quad (9.26)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\lambda\mathbf{k}} \left(2\pi c^2 M_{\lambda\mathbf{k}} M_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{k^2}{8\pi} A_{\lambda\mathbf{k}} A_{\lambda-\mathbf{k}} + 4\pi cnq \eta_{\lambda\mathbf{k}} M_{\lambda-\mathbf{k}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\hat{\rho}} \Pi_{\lambda\mathbf{k}} \Pi_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{1}{2} (C + 4\pi q^2 n^2) \eta_{\lambda\mathbf{k}} \eta_{\lambda-\mathbf{k}} \right). \end{aligned} \quad (9.27)$$

Als kanonisch konjugierten Variablen bestehen zwischen M und A die Kommutator-Relationen

$$[M_{\lambda\mathbf{k}}, A_{\lambda'-\mathbf{k}'}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (9.28)$$

Damit können wir analog zum harmonischen Oszillator Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Photonen einführen. Ohne Kopplung zur Materie haben wir für das elektromagnetischem Feld

$$H_{\text{Ft}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \left(2\pi c^2 M_{\lambda\mathbf{k}} M_{\lambda-\mathbf{k}} + \frac{k^2}{8\pi} A_{\lambda\mathbf{k}} A_{\lambda-\mathbf{k}} \right) = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar ck (b_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger b_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) \quad (9.29)$$

mit

$$A_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k}} (b_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger + b_{\lambda-\mathbf{k}}), \quad M_{\lambda\mathbf{k}} = i\sqrt{\frac{\hbar k}{8\pi c}} (b_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger - b_{\lambda-\mathbf{k}}) \quad (9.30)$$

und

$$[b_{\lambda,\mathbf{k}}, b_{\lambda',\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad [b_{\lambda,\mathbf{k}}, b_{\lambda',\mathbf{k}'}] = 0, \quad [b_{\lambda,\mathbf{k}}^\dagger, b_{\lambda',\mathbf{k}'}^\dagger] = 0. \quad (9.31)$$

Wir haben jetzt tatsächlich diskrete Anzahlen von Photonen, die mit den Photonenzahl-Operatoren $b^\dagger b$ gemessen werden und damit das elektromagnetische feld quantisiert. Die zugehörige Energie eines Photons ist $\hbar ck = \hbar\omega$. Wir haben bei dieser Rechnung die Polarisierung durch die Elektronen(bänder) nicht mit berücksichtigt.

Für die Gitterschwingungen können wir nun wieder ähnlich wie früher, aber bereits unter Einbeziehung des Polarisations-Terms proportional zu $4\pi q^2 n^2$ mit $C + 4\pi q^2 n^2 = \hat{\rho} \omega_1^2$ die Erzeuger und Vernichter für die Phononen einführen

$$\eta_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_1}} \hat{\rho} (a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger + a_{\lambda-\mathbf{k}}), \quad \Pi_{\lambda\mathbf{k}} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_1 \hat{\rho}}{2}} (a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger - a_{\lambda-\mathbf{k}}), \quad (9.32)$$

so dass der Phononen-Beitrag zum Hamilton-Operator

$$H_{\text{Pt}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar\omega_1 \left(a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \quad (9.33)$$

lautet.

Zwischen beiden Beiträgen gibt es die Kopplung

$$H_{\text{Kt}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} 4\pi cnq\eta_{\lambda\mathbf{k}} M_{\lambda-\mathbf{k}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} i\hbar\beta\sqrt{k} (a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger + a_{\lambda-\mathbf{k}}) (b_{\lambda-\mathbf{k}}^\dagger - b_{\lambda\mathbf{k}}) \quad (9.34)$$

mit

$$\beta = nq \sqrt{\frac{\pi c}{\omega_1 \hat{\rho}}}. \quad (9.35)$$

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die Polaritonen sind nun Linearkombinationen der bisherigen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

$$\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger = w a_{\mathbf{k}}^\dagger + x b_{\mathbf{k}}^\dagger + y a_{-\mathbf{k}} + z b_{-\mathbf{k}}. \quad (9.36)$$

Sie müssen

$$[H, \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger] = \hbar\omega_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \quad (9.37)$$

erfüllen, wobei $\omega_{\mathbf{k}}$ die Anregungsfrequenzen sind. Für positive $\omega_{\mathbf{k}}$ hat man tatsächlich Erzeugungs-Operatoren, für negative Vernichter. Dass dies Erzeugungs-(und Vernichtungs-)Operatoren sind, sieht man folgendermaßen: Es sei $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand, $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Dann gilt

$$H(\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger|\psi\rangle) = [H, \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger]|\psi\rangle + \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger H|\psi\rangle = (\hbar\omega_{\mathbf{k}} + E)(\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger|\psi\rangle). \quad (9.38)$$

Daher ist der Zustand $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger|\psi\rangle$ Eigenzustand von H mit der Energie $\hbar\omega_{\mathbf{k}} + E$, also mit einer um $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ erhöhten Energie.

Man berechnet daher die Kommutatoren

$$[H, a_{\mathbf{k}}^\dagger] = \hbar\omega_1 a_{\mathbf{k}}^\dagger + i\hbar\beta\sqrt{k}(b_{\mathbf{k}}^\dagger - b_{-\mathbf{k}}), \quad (9.39)$$

$$[H, a_{-\mathbf{k}}] = -\hbar\omega_1 a_{-\mathbf{k}} - i\hbar\beta\sqrt{k}(b_{\mathbf{k}}^\dagger - b_{-\mathbf{k}}), \quad (9.40)$$

$$[H, b_{\mathbf{k}}^\dagger] = \hbar ck b_{\mathbf{k}}^\dagger - i\hbar\beta\sqrt{k}(a_{\mathbf{k}}^\dagger + a_{-\mathbf{k}}), \quad (9.41)$$

$$[H, b_{-\mathbf{k}}] = -\hbar ck b_{-\mathbf{k}} - i\hbar\beta\sqrt{k}(a_{\mathbf{k}}^\dagger + a_{-\mathbf{k}}). \quad (9.42)$$

Die Eigenfrequenzen ergeben sich als Eigenwerte der Determinante

$$\begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & i\beta\sqrt{k} & -i\beta\sqrt{k} \\ 0 & -\omega_1 & -i\beta\sqrt{k} & i\beta\sqrt{k} \\ -i\beta\sqrt{k} & -i\beta\sqrt{k} & ck & 0 \\ -i\beta\sqrt{k} & -i\beta\sqrt{k} & 0 & -ck \end{pmatrix}. \quad (9.43)$$

Die Eigenwertgleichung lautet dann

$$\omega_{\mathbf{k}}^4 - \omega_{\mathbf{k}}^2(c^2 k^2 + \omega_1^2) + \omega_0^2 c^2 k^2 = 0, \quad (9.44)$$

wobei $\omega_1^2 c^2 - 4c\omega_1\beta^2 = \omega_0^2 c^2$ verwendet wurde. Damit ergeben sich wieder die gleichen Eigenfrequenzen.

Grundzustand

Wie kann man den Grundzustand für das System beschrieben durch den Hamilton-Operator

$$H_{\text{t}} = H_{\text{Ft}} + H_{\text{Pt}} + H_{\text{Kt}} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar ck (b_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger b_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar\omega_1 (a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) + \sum_{\lambda\mathbf{k}} i\hbar\beta\sqrt{k} (a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger + a_{\lambda-\mathbf{k}}) (b_{\lambda-\mathbf{k}}^\dagger - b_{\lambda\mathbf{k}}) \quad (9.45)$$

angeben? Er hat die Form

$$|\psi\rangle = e^B|0\rangle, \quad (9.46)$$

wobei B bilinear in den Erzeugungs-Operatoren a^\dagger und b^\dagger ist

$$B = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \left(u_{\lambda\mathbf{k}} a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda-\mathbf{k}}^\dagger + w_{\lambda\mathbf{k}} b_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger b_{\lambda-\mathbf{k}}^\dagger + v_{\lambda\mathbf{k}} (a_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger b_{\lambda-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger a_{\lambda-\mathbf{k}}^\dagger) \right) \quad (9.47)$$

Hierzu verwendet man

$$He^B = e^B \sum_n \frac{1}{n!} H_n, \quad H_0 = H, \quad H_n = [H_{n-1}, B]. \quad (9.48)$$

Wir wollen zunächst diese Beziehung zeigen. Dazu setzen wir die Entwicklung nach λ an

$$e^{-\lambda B} H e^{\lambda B} = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} H_n. \quad (9.49)$$

Wir differenzieren die linke Seite nach λ und erhalten $[e^{-\lambda B} H e^{\lambda B}, B]$. Setzen wir nun die Entwicklung ein und differenzieren die rechte Seite von (9.49), so folgt

$$\sum_n \frac{\lambda^n}{n!} [H_n, B] = \sum_n \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} H_n. \quad (9.50)$$

Setzt man nun links und rechts die Koeffizienten von λ^{n-1} gleich und berücksichtigt, dass für $\lambda = 0$ in (9.48) $H = H_0$ übrig bleibt, so ist (9.48) gezeigt.

Wenn nun B bilinear in den Erzeugungs-Operatoren ist, dann ergibt der Kommutator $H_1 = [H, B]$ wieder einen bilinearen Ausdruck von Erzeugungs-Operatoren, auch einen, in dem ein Faktor Erzeuger und einer Vernichter ist und eine Konstante. Bilden wir nun $H_2 = [H_1, B]$, so ist dieser Ausdruck bilinear in den Erzeugungs-Operatoren und H_3 und höhere verschwinden, da H_2 und B kommutiert, da alle Erzeugungs-Operatoren miteinander kommutieren. Damit lautet die Gleichung

$$He^B|0\rangle = e^B \left(H + [H, B] + \frac{1}{2} [[H, B], B] \right) |0\rangle \quad (9.51)$$

Damit wir einen Eigenzustand erhalten, muss der Anteil von $H + [H, B] + \frac{1}{2} [[H, B], B]$, der bilinear in den Erzeugungs-Operatoren ist, verschwinden. Das ergibt die Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten in B , die Konstante ergibt die Energie und die Terme von $H + [H, B] + \frac{1}{2} [[H, B], B]$, die einen Vernichter enthalten, ergeben angewandt auf $|0\rangle$ ohnehin Null. Man kann stattdessen auch fordern, dass die Vernichter α angewandt auf den Grundzustand null ergeben, das heißt dann, dass sich die Erzeugungs-Operatoren a^\dagger und b^\dagger in $\alpha + [\alpha, B]$ wegheben müssen.

10 Unabhängige Elektronen

Siehe Hunklinger-Enss: 7.1 Freies Elektronengas S. 201-207

Siehe Hunklinger-Enss: 7.2 Metalleigenschaften im Modell des freien Fermi-Gases: Spez. Wärme S. 207-210

10.a Freies Elektronen-Gas

Als einfachste Beschreibung von Elektronen im Festkörper nimmt man an, dass die Elektronen frei sind, das heißt die Wechselwirkung mit den Ionen und anderen Elektronen nur einen konstanten ortsunabhängigen Beitrag liefern.

Dann gilt für die Wellenfunktionen der Einteilchenzustände

$$H\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) = \epsilon\psi(\mathbf{r}). \quad (10.1)$$

Nehmen wir an, das System befinde sich in einem Quader mit den Seitenlängen L_1 , L_2 und L_3 und periodischen Randbedingungen $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i L_i) = \psi(\mathbf{r})$, so kann man die Einteilchenzustände als ebene Wellen

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_P}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (10.2)$$

mit dem Periodizitäts-Volumen $V_P = L_1 L_2 L_3$ schreiben. Dabei ist $k_i = \frac{2\pi m_i}{L_i}$ mit ganzen m_i . Die Einteilchen-Energie beträgt

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (10.3)$$

Die Dichte der \mathbf{k} -Vektoren ist wie in (4.26) gegeben durch

$$\frac{1}{\Delta k_1 \Delta k_2 \Delta k_3} = \frac{L_1 L_2 L_3}{(2\pi)^3} = \frac{V_P}{(2\pi)^3}. \quad (10.4)$$

Im Grundzustand sind alle Zustände bis zur Energie ϵ_F , der Fermi-Energie besetzt. Diese Zustände erfüllen

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 < \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2. \quad (10.5)$$

Sie liegen im \mathbf{k} -Raum in einer Kugel vom Radius k_F , der Fermikugel. Man bezeichnet $\hbar k_F$ als den Fermi-Impuls und die Geschwindigkeit der Elektronen auf der Fermi-Kugel als die Fermi-Geschwindigkeit. Man findet den Zusammenhang zwischen Elektronendichte und Fermi-Energie

$$n = \frac{N}{V_P} = \frac{1}{V_P} \sum_{k < k_F} 2 = \frac{1}{8\pi^3} \int_{k < k_F} d^3 k \cdot 2 = \frac{1}{8\pi^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \cdot 2 = \frac{k_F^3}{3\pi^2}. \quad (10.6)$$

Der Faktor 2 wurde wegen der beiden Spin-Einstellungen eingeführt. Die Fermi-Energie lässt sich damit

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (10.7)$$

schreiben.

10.b Fermi-Statistik

Im Rahmen eines kanonischen Ensembles der Temperatur T ist die Wahrscheinlichkeit, einen N -Teilchenzustand j der Energie E_j anzutreffen,

$$\rho_j = e^{-E_j/(k_B T)} / Z, \quad (10.8)$$

wobei

$$Z = \sum_i e^{-E_i/(k_B T)} = e^{-F/(k_B T)} \quad (10.9)$$

die Zustandssumme, F die freie Energie und k_B die Boltzmann-Konstante ist.

Die Bedingung einer festen Teilchenzahl N ist für praktische Rechnungen häufig unzweckmäßig. Stattdessen betrachtet man ein großkanonisches Ensemble mit variabler Teilchenzahl, wobei man ein chemisches Potential μ einführen muss, das die mittlere Anzahl der Teilchen festlegt. Dann ist die Wahrscheinlichkeit den Zustand j mit N_j Teilchen und Energie E_j anzutreffen,

$$\rho_j = e^{-(E_j - \mu N_j)/(k_B T)} / Y \quad (10.10)$$

mit der großkanonischen Zustandssumme

$$Y = \sum_i e^{-(E_i - \mu N_i)/(k_B T)} = e^{-\Omega/(k_B T)} \quad (10.11)$$

mit dem großkanonischen Potential Ω . Nun können alle Einteilchen-Zustände unabhängig voneinander besetzt werden. Die Wahrscheinlichkeit f_i , dass der Einteilchenzustand i besetzt ist im Verhältnis dazu, dass er nicht besetzt ist, ist durch den Boltzmann-Faktor gegeben,

$$\frac{f_i}{1 - f_i} = e^{-(\epsilon_i - \mu)/(k_B T)}, \quad (10.12)$$

woraus die Fermi-Funktion

$$f_i = f_T(\epsilon_i - \mu) = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/(k_B T)} + 1} \quad (10.13)$$

folgt. Damit lässt sich die mittlere Teilchenzahl N , die mittlere Energie E und die Entropie S ausdrücken

$$N = \sum_i f_i, \quad (10.14)$$

$$E = \sum_i \epsilon_i f_i, \quad (10.15)$$

$$S = -k_B \sum_i (f_i \ln f_i + (1 - f_i) \ln(1 - f_i)). \quad (10.16)$$

10.c Zustandsdichte, spez. Wärme und chemisches Potential

Im Rahmen des Einteilchen-Bildes führt man die Zustandsdichte $D(\epsilon)$ für die Elektronen ein. Sie gibt die Anzahl von Ein-Elektron-Zuständen pro Volumen und Energie-Intervall an. Mit dieser Zustandsdichte erhält man für den Grundzustand

$$n = \int^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon. \quad (10.17)$$

Für freie Elektronen hatten wir

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (10.18)$$

Daraus folgt dann

$$D(\epsilon) = \frac{dn}{d\epsilon} = \frac{(2m)^{3/2} \epsilon^{1/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \theta(\epsilon), \quad (10.19)$$

wobei wir die Stufenfunktion θ hinzugefügt haben, da es nur für positive ϵ Zustände gibt.

Wir wollen nun unter der Annahme, dass das Einteilchenbild eine gute Näherung darstellt, die Zustandsdichte aber eine allgemeine Form haben kann, das chemische Potential und die spezifische Wärme des Systems betrachten. Dabei sind Summen über Funktionen, die von ϵ abhängen, auszuwerten,

$$\frac{1}{V_P} \sum_i g(\epsilon_i) = \int D(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon \quad (10.20)$$

und zwar

$$n = \frac{N}{V_P} = \int D(\epsilon) f(\epsilon - \mu) d\epsilon, \quad (10.21)$$

$$\frac{E}{V_P} = \int D(\epsilon) \epsilon f(\epsilon - \mu) d\epsilon \quad (10.22)$$

Die Auswertung dieser Integrale erfolgt nach dem Verfahren von Sommerfeld, wobei angenommen wird, dass sich die Zustandsdichte in der Umgebung der Fermikante in einem Bereich der Größe $k_B T$ nur langsam verändert. Es sei

$$G(\mu) = \int g(\epsilon) f(\epsilon - \mu) d\epsilon = \int^{\mu} g(\epsilon) d\epsilon + \int g(\epsilon) (f_T(\epsilon - \mu) - f_0(\epsilon - \mu)) d\epsilon. \quad (10.23)$$

Das zweite Integral gibt nur für $\epsilon \approx \mu$ einen wesentlichen Beitrag, da $f_T(\epsilon - \mu) - f_0(\epsilon - \mu)$ für $|\epsilon - \mu| \gg k_B T$ sehr klein wird. Man entwickelt daher

$$g(\epsilon) = g(\mu) + (\epsilon - \mu)g'(\mu) + \dots \quad (10.24)$$

Berücksichtigt man noch, dass

$$f_T(x) + f_T(-x) = \frac{1}{e^{x/(k_B T)} + 1} + \frac{1}{e^{-x/(k_B T)} + 1} = 1, \quad (10.25)$$

woraus folgt, dass $f_T(x) - f_0(x)$ eine ungerade Funktion von x ist, dann reduziert sich $G(\mu)$ auf

$$G(\mu) = \int^{\mu} g(\epsilon) d\epsilon + 2g'(\mu) \int_0^{\infty} x f_T(x) dx. \quad (10.26)$$

Substituiert man unter dem Integral $x = k_B T y$, so folgt

$$\int_0^{\infty} x f_T(x) dx = \int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^{x/(k_B T)} + 1} = (k_B T)^2 \int_0^{\infty} \frac{y dy}{e^y + 1} = (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{12} \quad (10.27)$$

und damit

$$G(\mu) = \int^{\mu} g(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 g'''(\mu) + \dots, \quad (10.28)$$

wobei wir den nächsten nicht verschwindenden Term noch mitgenommen haben. Dies ist die Sommerfeld-Entwicklung.

Wir werten damit nun die Teilchendichte aus

$$n = \int^{\mu} D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\mu) = \int^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon + (\mu - \epsilon_F) D(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\epsilon_F). \quad (10.29)$$

Dabei wurde mehrfach μ durch ϵ_F ersetzt, wo der Fehler in höherer Ordnung als $(k_B T)^2$ ist. Da die Dichte der Elektronen erhalten bleibt (jedenfalls für konstantes Volumen) und der erste Term nach dem letzten Gleichheitszeichen bereits die Teilchendichte ist, gilt

$$(\mu - \epsilon_F) D(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\epsilon_F) = 0. \quad (10.30)$$

Dies führt auf eine Verschiebung des chemischen Potentials

$$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{D'(\epsilon_F)}{D(\epsilon_F)} + O(T^4). \quad (10.31)$$

Für die Energie erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned} \frac{E}{V_P} &= \int^{\mu} \epsilon D(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (\mu D(\mu))' \\ &= \int^{\epsilon_F} \epsilon D(\epsilon) d\epsilon + \underbrace{(\mu - \epsilon_F) \epsilon_F D(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \epsilon_F D'(\epsilon_F)} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(\epsilon_F) \end{aligned} \quad (10.32)$$

Wegen (10.30) hebt sich der unterklammerte Beitrag weg. Daraus folgt dann

$$\frac{E(T)}{V_P} = \frac{E(0)}{V_P} + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D(\epsilon_F). \quad (10.33)$$

In die Änderung der Energie geht also die Zustandsdichte der Elektronen an der Fermikante ein. Nur die Elektronen mit Energien von etwa $\epsilon - \epsilon_F = O(k_B T)$ können thermisch angeregt werden und gewinnen jeweils etwa die Energie $k_B T$. Aus diesem Ergebnis erhalten wir die spezifische Wärme der Elektronen pro Volumen

$$c_V = \frac{1}{V_P} \left(\frac{dE}{dT} \right)_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T D(\epsilon_F), \quad (10.34)$$

die linear mit der Temperatur anwächst.

11 Elektronen im periodischen Potential

Siehe Hunklinger-Enss: 7.3 Elektronen im periodischen Potential S. 219-236

Siehe Hunklinger-Enss: 7.4 Einfluss der Brillouinzone S. 237-242

11.a Bloch-Theorem, Bänder

Um die Elektronen im Festkörper zu beschreiben, geht man aus von einem effektiven Potential, das die Ionen und die anderen Elektronen auf ein Elektron ausüben. In einem periodischen Gitter wird dies ein periodisches Potential sein,

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \quad (11.1)$$

wobei \mathbf{R} ein beliebiger Gittervektor unseres Kristalls ist. Wir führen nun einen Translations-Operator $T_{\mathbf{R}}$ ein,

$$T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (11.2)$$

Es gilt dann

$$T_{\mathbf{R}}V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \quad (11.3)$$

Da dies für eine beliebige Wellenfunktion ψ gilt, folgt als Wirkung des Translations-Operators

$$T_{\mathbf{R}}V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})T_{\mathbf{R}}. \quad (11.4)$$

Die explizite Darstellung für den Translations-Operator lautet

$$T_{\mathbf{R}} = e^{\mathbf{R} \cdot \nabla} = 1 + \mathbf{R} \cdot \nabla + \frac{1}{2}(\mathbf{R} \cdot \nabla)^2 + \dots \quad (11.5)$$

$$e^{\mathbf{R} \cdot \nabla} = e^{R_x \partial_x} e^{R_y \partial_y} e^{R_z \partial_z} \quad (11.6)$$

$$e^{\mathbf{R} \cdot \nabla} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + R_\alpha \partial_\alpha \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} R_\alpha R_\beta \partial_\alpha \partial_\beta \psi(\mathbf{r}) + \dots, \quad (11.7)$$

wobei dieser Ausdruck gerade die Taylor-Entwicklung darstellt. Wir beobachten aus dieser Darstellung weiterhin, dass

$$T_{\mathbf{R}}\nabla = \nabla T_{\mathbf{R}}, \text{ also } [T_{\mathbf{R}}, \mathbf{p}] = 0. \quad (11.8)$$

Für einen gitterperiodischen Hamilton-Operator

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \quad (11.9)$$

gilt also

$$[T_{\mathbf{R}_n}, H] = 0. \quad (11.10)$$

Nun ist $T_{\mathbf{R}_n} T_{\mathbf{R}_m} = T_{\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_m} = T_{\mathbf{R}_m} T_{\mathbf{R}_n}$, das heißt $T_{\mathbf{R}_n} = (T_{\mathbf{a}_1})^{n_1} (T_{\mathbf{a}_2})^{n_2} (T_{\mathbf{a}_3})^{n_3}$ und $T_{\mathbf{R}}^\dagger = e^{\mathbf{R} \cdot \nabla^\dagger} = e^{-\mathbf{R} \cdot \nabla} = T_{-\mathbf{R}}$, also $T_{\mathbf{R}}^\dagger T_{\mathbf{R}} = T_0 = 1$. Der Translationsoperator ist also ein unitärer Operator. Zu unitären Operatoren gibt es genauso wie zu hermiteschen Operatoren einen Satz orthogonaler Eigenfunktionen. (Man sieht das folgendermaßen: Da $T^\dagger T = T T^\dagger = 1$, kommutiert T mit T^\dagger und damit auch $T + T^\dagger$ mit $i(T - T^\dagger)$. Da letztere hermitesch sind, haben sie gemeinsame orthogonale Eigenfunktionen. Allerdings sind die Eigenwerte von T in der Regel nicht reell. Sie sind aber betragsmäßig gleich 1. Ist nämlich der Eigenwert zu $T + T^\dagger$ gleich $2a$ und zu $i(T - T^\dagger)$ gleich $2b$, wobei a und b reell sind, so ist der zu T ($a - ib$) und der zu T^\dagger ($a + ib$). Da aber $T T^\dagger = 1$, folgt $(a - ib)(a + ib) = a^2 + b^2 = 1$).

Daher haben H , T_{a_1} , T_{a_2} und T_{a_3} gemeinsame orthogonale Eigenfunktionen mit Eigenwerten ψ ,

$$H\psi = \epsilon\psi, \quad T_{\mathbf{a}_i}\psi = c_i\psi, \quad T_{\mathbf{R}_n}\psi = c_1^{n_1} c_2^{n_2} c_3^{n_3} \psi \quad (11.11)$$

Wir wollen nun die Eigenwerte c_j in der Form $c_i = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i}$ ausdrücken, dann gilt nämlich

$$T_{\mathbf{R}_n}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r}), \quad (11.12)$$

das heißt die Eigenfunktionen von H lassen sich in der Form

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (11.13)$$

schreiben, wobei $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gitterperiodisch ist (Blochsches Theorem).

Wir betrachten noch die Bestimmung des Wellenvektors \mathbf{k} aus $c_i = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i}$. Es folgt

$$\frac{\ln c_i}{i} + 2\pi m_i = \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i. \quad (11.14)$$

Dieses Gleichungssystem haben wir schon in 3.18 kennengelernt. Die Lösung ist

$$\mathbf{k} = \sum_j \left(m_j + \frac{\ln c_j}{2\pi i} \right) \mathbf{b}_j. \quad (11.15)$$

Der Wellenvektor ist also bis auf reziproke Gittervektoren festgelegt. Man kann ihn daher immer innerhalb der (ersten) Brillouinzone wählen. Man charakterisiert daher die Wellenfunktionen mit dem Wellenvektor \mathbf{k} und einem zusätzlichen Index n , dem Band-Index, $\psi(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Der Eigenwert $\epsilon_n(\mathbf{k})$ wird als die Band-Energie des Elektrons bezeichnet.

11.b Fast freie Elektronen

Wir gehen aus von einem gitterperiodischen Potential

$$V(\mathbf{r}) = \sum_m V(\mathbf{G}_m) e^{i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}}, \quad (11.16)$$

das wir nach seinen Fourier-Komponenten entwickelt haben (vgl. die Entwicklung der gitterperiodischen Dichte in (3.15), wobei die \mathbf{G}_m die reziproken Gittervektoren sind,

$$V(\mathbf{G}_m) = \frac{1}{v_z} \int_{\text{Gitterzelle}} d^3r V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}}. \quad (11.17)$$

Mit

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_P}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m u(\mathbf{G}_m) e^{i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}} \quad (11.18)$$

folgt durch Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung

$$\sum_m \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_m)^2 u(\mathbf{G}_m) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) \cdot \mathbf{r}} + \sum_{ml} V(\mathbf{G}_l) u(\mathbf{G}_m) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m + \mathbf{G}_l) \cdot \mathbf{r}} = \sum_m \epsilon(\mathbf{k}) u(\mathbf{G}_m) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) \cdot \mathbf{r}}. \quad (11.19)$$

Für den Koeffizienten der Fourier-Komponente $e^{i\mathbf{k} + \mathbf{G}_m}$ folgt dann

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_m)^2 - \epsilon(\mathbf{k}) \right) u(\mathbf{G}_m) + \sum_l V(\mathbf{G}_l) u(\mathbf{G}_{m-l}) = 0. \quad (11.20)$$

Für ein schwaches Potential ergibt die Störungstheorie ($|u(0)| \gg |u(\mathbf{G}_{m \neq 0})|$)

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V(0) + \sum_{l \neq 0} \frac{V(\mathbf{G}_l) V(-\mathbf{G}_l)}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (\mathbf{k} - \mathbf{G}_l)^2)}. \quad (11.21)$$

Diese Entwicklung bricht zusammen, wenn für einen reziproken Gittervektor $k^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{G}_l)^2$ gilt, das heißt für $2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}_l = G_l^2$. Mit $\mathbf{k} = \mathbf{G}_l/2 + \delta\mathbf{k}$ führen wir dann entartete Störungstheorie für die beiden (fast) entarteten Komponenten durch

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\mathbf{G}}{2} + \delta\mathbf{k} \right)^2 - \epsilon + V(0) \right) u(0) + V(\mathbf{G}) u(-\mathbf{G}) = 0, \quad (11.22)$$

$$V(-\mathbf{G}) u(0) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\delta\mathbf{k} - \frac{\mathbf{G}}{2})^2 + V(0) - \epsilon \right) u(-\mathbf{G}) = 0, \quad (11.23)$$

woraus sich die Energien

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{G^2}{4} + \delta \mathbf{k}^2 \right) + V(0) \pm \sqrt{V(\mathbf{G})V(-\mathbf{G}) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 (\mathbf{G} \cdot \delta \mathbf{k})^2}. \quad (11.24)$$

ergeben. Entwickeln wir die Wurzel nach $(\mathbf{G} \cdot \delta \mathbf{k})$, so folgt

$$\sqrt{\dots} = |V(\mathbf{G})| + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\mathbf{G} \cdot \delta \mathbf{k})^2}{2|V(\mathbf{G})|} + \dots \quad (11.25)$$

Es entsteht also eine Energielücke von $2|V(\mathbf{G})|$. Die hier betrachtete Aufhebung der Entartung tritt gerade an den Grenzen der Brillouin-Zonen auf und führt dort zur Aufspaltung der Bänder.

11.c Tight-binding Näherung

Im Rahmen dieser Näherung gehen wir von einer starken Bindung zwischen Elektronen und Ionen aus und nehmen gleichzeitig eine schwache Wechselwirkung zwischen den Elektronen an benachbarten Atomen. Es sei $\Phi_a(\mathbf{r})$ eine Elektron-Wellenfunktion im Atom, d.h.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_a(\mathbf{r}) \right) \Phi_a(\mathbf{r}) = \epsilon_a \Phi_a(\mathbf{r}). \quad (11.26)$$

Als Näherungslösung für das periodische Potential

$$V(\mathbf{r}) = \sum_m V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \quad (11.27)$$

setzen wir die Überlagerung

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \Phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (11.28)$$

an. Diese hat die Eigenschaft, dass sie bereits dem Bloch-Theorem genügt, das heißt bei Verschiebung um den Gittervektor \mathbf{R}_m multipliziert sie sich mit $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m}$. Die Einteilchenenergie ergibt sich dann als Erwartungswert zu

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\langle \psi_{\mathbf{k}} | H | \psi_{\mathbf{k}} \rangle}{\langle \psi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle}. \quad (11.29)$$

Für die Normierung erhält man

$$\langle \psi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_{n'}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{n'} - \mathbf{R}_n)} \int d^3r \Phi_a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \Phi_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'}) = \frac{1}{N} \sum_{nn'} c_{n-n'} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{n-n'}} = \sum_n c_n e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \quad (11.30)$$

mit

$$c_n = \int d^3r \Phi_a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \Phi_a(\mathbf{r}). \quad (11.31)$$

Bei der Berechnung des Matrixelements $\langle H \rangle$ erhält man

$$\langle \psi_{\mathbf{k}} | H | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \sum \epsilon_n e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \quad (11.32)$$

mit

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= \int d^3r \Phi_a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Phi_a(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r \Phi_a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_a(\mathbf{r}) \right) \Phi_a(\mathbf{r})}_{\epsilon_a \Phi_a(\mathbf{r})} \\ &\quad + \underbrace{\int d^3r \Phi_a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) (V(\mathbf{r}) - V_a(\mathbf{r})) \Phi_a(\mathbf{r})}_{\hat{\epsilon}_n} \end{aligned} \quad (11.33)$$

Sind die Ionen weit voneinander entfernt, dann sind die Matrixelemente $\hat{\epsilon}_n$ klein, da das Potential des Ions am Ort des Elektrons nicht mit der atomaren Wellenfunktion multipliziert wird. Ebenso sind die Überlapp-Matrixelemente c_n außer für $c_0 = 1$ klein. Damit erhält man

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_a + \frac{\sum_n e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \hat{\epsilon}_n}{\sum_n e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} c_n} \quad (11.34)$$

Näherungsweise kann man den Nenner gleich 1 setzen und sich bei der Summe im Zähler auf den Term am gleichen Ort und den nächsten Nachbarn beschränken. Für ein fcc-Gitter erhält man dann zum Beispiel

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_a + \hat{\epsilon}_0 + 4\hat{\epsilon}_1 \left(\cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_2 a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_3 a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_2 a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_3 a}{2}\right) \right) \quad (11.35)$$

Dabei hängen die Matrixelemente ϵ_0 und ϵ_1 vom Gitterabstand a ab. Für große Abstände gehen sie wegen des fehlenden Überlapps rasch gegen Null.

11.c.α Das Bandspektrum von Diamant und ein nützlicher Satz über die Eigenwerte von Matrizen

Wir beginnen mit dem Satz: Hat eine hermitesche Matrix A die Eigenwerte a_1, a_2, \dots, a_n und eine andere Matrix B Eigenwerte zwischen b_{\min} und b_{\max} , so liegen die Eigenwerte von $A + B$ in der Vereinigungsmenge $\cup_i [a_i + b_{\min}, a_i + b_{\max}]$. Man kann sich von der Richtigkeit überzeugen, indem man die Eigenwerte von $A + \lambda B$ in Abhängigkeit von λ betrachtet. Ist $|n(\lambda)\rangle$ Eigenfunktion von $A + \lambda B$ mit Eigenwert ϵ , dann gilt $\frac{d\epsilon}{d\lambda} = \langle n(\lambda) | B | n(\lambda) \rangle$. Dieser Erwartungswert liegt aber zwischen b_{\min} und b_{\max} . Daher gilt $b_{\min} \leq \frac{d\epsilon}{d\lambda} \leq b_{\max}$. Geht man vom Eigenzustand mit Eigenwert a_i zu A aus, so kann er sich nur zwischen b_{\min} und b_{\max} von a_i entfernen, womit der Satz gezeigt ist.

Diesen Satz wollen wir nun auf die Bandstruktur von Diamant anwenden. Im Rahmen des Tight-binding-Modells können wir H darstellen als Summe zweier Beiträge. Der erste berücksichtigt die s- und p-Wellenfunktionen an den Gitterplätzen

$$\begin{aligned} A &= \epsilon_s \sum_{\mathbf{R}, i} |\mathbf{R} + \mathbf{r}_i, s\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{r}_i, s| \\ &+ \epsilon_p \sum_{\mathbf{R}, i} (|\mathbf{R} + \mathbf{r}_i, p_x\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{r}_i, p_x| + |\mathbf{R} + \mathbf{r}_i, p_y\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{r}_i, p_y| + |\mathbf{R} + \mathbf{r}_i, p_z\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{r}_i, p_z|) \end{aligned} \quad (11.36)$$

wobei wir die Notation mit bras $\langle |$ und kets $| \rangle$ benützt haben. Der zweite berücksichtigt die kovalente Bindung in Form eines tight-binding Matrixelements zwischen den überlappenden Orbitalen.

$$B = -t \sum_{\mathbf{R}, \delta} (|\mathbf{R}, \delta\rangle \langle \mathbf{R} + \delta, -\delta| + |\mathbf{R} + \delta, -\delta\rangle \langle \mathbf{R}, \delta|). \quad (11.37)$$

Die Summe läuft über das eine Untergitter, \mathbf{R} . Die benachbarten Atome liegen auf dem anderen Untergitter. Vom ursprünglichen Gitter erreicht man es durch Verschiebung um $\delta = \frac{a}{4}(v_x, v_y, v_z)$, wobei die v_i gleich ± 1 sind und $v_x v_y v_z = +1$. Das ket $|\mathbf{R}, \delta\rangle$ steht für das hybridisierte Orbital

$$|\mathbf{R}, \delta\rangle = \frac{1}{2} (|\mathbf{R}, s\rangle + v_x |\mathbf{R}, p_x\rangle + v_y |\mathbf{R}, p_y\rangle + v_z |\mathbf{R}, p_z\rangle). \quad (11.38)$$

Der Anteil A des Hamilton-Operators hat die Eigenwerte ϵ_s und ϵ_p , der Anteil B die Eigenwerte $-t$ und $+t$ für den bindenden und antibindenden Zustand. Alle Eigenwerte sind hoch entartet. Addiert man nun die Beiträge, so findet man, solange $2t < \epsilon_p - \epsilon_s$ zwei erlaubte Energiebereiche in den Intervallen $[\epsilon_s - t, \dots, \epsilon_s + t]$ und $[\epsilon_p - t, \dots, \epsilon_p + t]$. Sobald aber $2t > \epsilon_p - \epsilon_s$, geht erneut eine Bandlücke auf, denn jetzt kann man im Satz A mit B vertauschen und findet, dass man nur Bandenergien in den Intervallen $[\epsilon_s - t, \dots, \epsilon_p - t]$ und $[\epsilon_s + t, \dots, \epsilon_p + t]$ hat. Siehe Figur 7.26 im Skriptum Hunklinger/Enss.

11.d Wannier-Funktionen

Wir hatten bereits die Bloch-Funktionen eingeführt, die die Eigenzustände zum Einteilchen-Hamilton-Operator sind,

$$H\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (11.39)$$

mit

$$\int d^3r \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{nn'}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (11.40)$$

Wir bilden nun die Überlagerung aller Wellenfunktionen eines Bandes

$$\Phi_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (11.41)$$

Es folgt nun

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (11.42)$$

Berücksichtigt man, dass u gitterperiodisch ist, $u(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$, so ergibt die obige Summe

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) = \Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m). \quad (11.43)$$

Die Funktionen $\Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$ heißen Wannier-Funktionen. Sie sind orthogonal zu einander und liefern durch Umkehr der Fourier-Transformation wieder die Blochfunktionen

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \quad (11.44)$$

und

$$\begin{aligned} \int d^3r \Phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \Phi_{n'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{m'}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{m'}} \underbrace{\int d^3r \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r})}_{\delta_{nn'}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'})} \delta_{nn'} = \delta_{nn'}\delta_{mm'}. \end{aligned} \quad (11.45)$$

Die Wannier-Funktionen sind (in der Regel) um \mathbf{R}_m lokalisierte Wellenfunktionen, die gemäß (11.43) die Bloch-Funktionen ergeben, und zugleich die angenehme Eigenschaft haben, an verschiedenen Gitterorten orthogonal zu sein, was für die Atomwellenfunktionen nicht galt. Auf Grund dieser Eigenschaften verwendet man die Wannier-Funktionen gerne als lokale Basis von Wellenfunktionen. Die Wannierfunktionen sind nicht eindeutig festgelegt, da die Phasen der Blochfunktionen willkürlich sind. Man wird jedoch die Wahl in der Regel so treffen, dass die Wellenfunktionen möglichst gut lokalisiert sind. Man ist vielleicht erstaunt, dass man alle Wellenfunktionen eines Bandes in eine einzige Wannierfunktion packen kann. Man muss aber bedenken, dass die Blochfunktionen gitterperiodisch sind, das heißt jede Blochfunktion ist bereits bestimmt, wenn man sie für eine Gitterzelle kennt. Die Menge aller N Blochfunktionen kann man dann im Volumen $NV_z = V_P$ also dem Volumen des Probekörpers unterbringen. Genau über dieses Volumen aber ist die Wannierfunktion festzulegen.

12 Einige Eigenschaften von Bändern

12.a Impuls und effektive Massen

Siehe Hunklinger-Enss: 8.1 Bewegungsgleichung und effektive Masse S. 244-246

In diesem Abschnitt wollen wir den Zusammenhang zwischen Impuls, Gruppengeschwindigkeit und Energie herleiten und eine effektive Masse einführen. Dazu entwickeln wir die Wellenfunktion $\psi_{n,\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ nach den $\psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ mit infinitesimalem $\delta\mathbf{k}$,

$$\psi_{n,\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m \alpha_m \psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (12.1)$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung gibt

$$\begin{aligned} H\psi_{n,\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right) e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m \alpha_m \psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \epsilon_n(\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}) e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m \alpha_m \psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_m \alpha_m \left(\frac{\hbar^2(\delta\mathbf{k})^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{im}\delta\mathbf{k}\cdot\nabla - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right) \psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (12.2)$$

Hieraus folgt

$$\sum_m \alpha_m \left(\frac{\hbar^2(\delta\mathbf{k})^2}{2m} + \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p} + \epsilon_m(\mathbf{k}) - \epsilon_n(\mathbf{k} + \delta\mathbf{k})\right) \psi_{m,\mathbf{k}} = 0. \quad (12.3)$$

Für kleines $\delta\mathbf{k}$ können wir $\alpha_n = 1$ und $\alpha_m = O(\delta k)$ setzen. Bilden wir nun das Skalarprodukt von (12.3) mit $\psi_{m,\mathbf{k}}$, $m \neq n$, so folgt

$$\alpha_m (\epsilon_m(\mathbf{k}) - \epsilon_n(\mathbf{k}) + O(\delta k)) + \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{mn} = O((\delta k)^2), \quad (12.4)$$

was uns erlaubt, α_m in Ordnung $\delta\mathbf{k}$ auszudrücken. Bei Multiplikation von (12.3) mit ψ_n folgt

$$\frac{\hbar^2(\delta\mathbf{k})^2}{2m} + \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{nn} + \epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_n(\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}) + \sum_{m \neq n} \alpha_m \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{nm} = 0, \quad (12.5)$$

woraus man bis einschließlich Ordnung $(\delta k)^2$

$$\epsilon_n(\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2(\delta\mathbf{k})^2}{2m} + \frac{\hbar}{m}\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{nn} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{mn}|^2}{\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_m(\mathbf{k})} \quad (12.6)$$

bekommt. Falls $\epsilon_n(\mathbf{k})$ nicht entartet ist, ist diese Einteilchenenergie stetig und differenzierbar,

$$\mathbf{p}_{nn} = \langle \mathbf{p} \rangle = \frac{m}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} \epsilon_n(\mathbf{k}), \quad (12.7)$$

das heißt gleich der Masse m multipliziert mit der Gruppengeschwindigkeit. Die zweite Ableitung der Einteilchenenergie

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \frac{1}{m} \delta_{\alpha,\beta} + \frac{1}{m^2} \sum_{m \neq n} \frac{p_{mn}^\alpha p_{nm}^\beta + p_{mn}^\beta p_{nm}^\alpha}{\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_m(\mathbf{k})} =: \left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} \quad (12.8)$$

stellt das Inverse der effektiven Masse des Kristallelektrons dar. Sie ist ein symmetrischer Tensor mit positiven oder negativen Eigenwerten. Das heißt, die Masse kann positiv oder negativ sein. An der Bandkante gilt in der Regel

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_\alpha \frac{(k_\alpha - k_{0\alpha})^2}{m_\alpha^*}, \quad (12.9)$$

wobei die Eigenwerte m_α^* an der unteren Bandkante positiv, an der oberen negativ sind.

12.b Symmetrien

12.b.α Folgerungen aus der Punktgruppe

Aus der Translationsgruppe (Gitterperiodizität) erhielten wir das Blochsche Theorem, das

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \quad (12.10)$$

für alle reziproken Gittervektoren \mathbf{G} impliziert. Allgemein ist jedoch unser Hamilton-Operator unter der Raumgruppe

$$\mathbf{r}' = \alpha \mathbf{r} + \mathbf{a} \quad (12.11)$$

invariant. Ist daher $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ mit gitterperiodischem u_n Eigenfunktion von H mit Eigenwert $\epsilon_n(\mathbf{k})$, so ist auch

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\alpha \mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\alpha \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} u_{n\mathbf{k}}(\alpha \mathbf{r} + \mathbf{a}) \quad (12.12)$$

Eigenfunktion zum gleichen Eigenwert. $u_{n\mathbf{k}}(\alpha \mathbf{r} + \mathbf{a})$ ist gitterperiodisch, da $\alpha \mathbf{R}_m$ Gittervektor ist, denn

$$\{\alpha|\mathbf{a}\}\{1|\mathbf{R}_m\}\{\alpha|\mathbf{a}\}^{-1} = \{1|\alpha \mathbf{R}_m\} \quad (12.13)$$

ist Element der Translationsgruppe. Dann ist $\psi_{n\mathbf{k}}(\alpha \mathbf{r} + \mathbf{a})$ Eigenfunktion mit dem Wellenvektor $\alpha^t \mathbf{k} = \alpha^{-1} \mathbf{k}$ mit der gleichen Energie, da $\mathbf{k} \cdot \alpha \mathbf{r} = (\alpha^t \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}$, wobei der Index t das Transponierte anzeigt. Daraus folgt

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(\alpha^{-1} \mathbf{k}) \text{ oder } \epsilon_n(\alpha \mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k}). \quad (12.14)$$

Die Energien haben also die volle Symmetrie der Punktgruppe. Alle Vektoren $\alpha \mathbf{k}$ haben für festes \mathbf{k} dieselben Energien. Speziell für Inversions-Symmetrie folgt (Annahme Inversionszentrum im Ursprung)

$$\psi_{n-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(-\mathbf{r}), \quad \epsilon_n(-\mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k}). \quad (12.15)$$

12.b.β Spezielle Symmetrie-Richtungen

Für Wellenvektoren \mathbf{k} , die in bestimmten Symmetrierichtungen liegen, gibt es $\alpha \mathbf{k}$, für die $\alpha \mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{G}_m$ mit reziprotem Gittervektor \mathbf{G} gilt. Diese $\alpha \mathbf{k}$ bilden eine Untergruppe der Punktgruppe. Für diese \mathbf{k} -Vektoren kann man die Eigenzustände gemäß ihres Transformationsverhaltens unter den Operationen α klassifizieren.

Beispiel: In einem kubischen Gitter sei die Spiegelung $x' = x$, $y' = y$, $z' = -z$ eine Symmetrie-Operation α . Dann geht $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$ in sich über. Zustände können bei dieser Spiegelung ihr Vorzeichen ändern oder erhalten, da $\alpha^2 = 1$, $\psi(x, y, z) = \pm \psi(x, y, -z)$. Für $\mathbf{k} = k \cdot (1, 0, 0)$, $\frac{k}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$, $\frac{k}{\sqrt{3}}(1, 1, 1)$ gibt es mehr Symmetrie-Operationen. Diese Zustände werden nach den irreduziblen Darstellungen der entsprechenden Untergruppen klassifiziert.

Beispiel: Vierzählige Achse (α) und Spiegelung (S) an der x -Achse (zweidimensionale Betrachtung). Verhalten für $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Nach diesem Schema wird zum Beispiel die supraleitende Wellenfunktion in den CuO_2 -Schichten der Hochtemperatur-Supraleiter klassifiziert.

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (12.16)$$

Wegen $\alpha^4 = 1$ folgt für $\alpha \psi = \lambda \psi$ die Gleichung $\lambda^4 = 1$, also $\lambda = \pm 1, \pm i$. Es sei nun $\psi' = S \psi$. Mit $\alpha S = S \alpha^{-1}$ folgt

$$\alpha \psi' = \alpha S \psi = S \alpha^{-1} \psi = \lambda^{-1} S \psi = \lambda^{-1} \psi'. \quad (12.17)$$

Für $\lambda = \pm 1$ gilt mit $\alpha \psi = \pm \psi$ auch $\alpha \psi' = \pm \psi'$. Man kann daher Linearkombinationen $S(\psi \pm \psi') = \pm(\psi \pm \psi')$ bilden, die simultan Eigenfunktionen von α und S sind (eindimensionale Darstellungen) und zwar kann man sie kennzeichnen durch

$$\begin{array}{ccc} & \lambda & M \\ s_1 & +1 & +1 \\ s_{xy(x^2-y^2)} = g & +1 & -1 \\ d_{x^2-y^2} & -1 & +1 \\ d_{xy} & -1 & -1 \end{array}, \quad (12.18)$$

wobei M der Eigenwert unter Spiegelung ist. Man bezeichnet sie als s - oder d - (auch g -)Wellenfunktionen. Der Index von s und d enthält das einfachste Beispiel einer Funktion dieser Symmetrie. Alle diese Funktionen haben positive Parität, da die Parität durch eine Drehung um 180° erzeugt wird, und hierzu α^2 mit dem Eigenwert λ^2 gehört.

Für die Zustände mit $\lambda = \pm i$ kommutieren α und S nicht. Aus $\alpha S = S\alpha^{-1}$ folgt $\alpha S = S\alpha\lambda^{-2} = -S\alpha$. Man kann sie daher nicht simultan diagonalisieren, es bleiben zweidimensionale Darstellungen. Sie haben ungerade Parität und man bezeichnet sie als p -Zustände. Einfachste Funktionen sind x und y . Offensichtlich ist

$$\alpha x = -y, \quad \alpha y = x, \quad Sx = x, \quad Sy = -y. \quad (12.19)$$

Im Allgemeinen werden die Untersuchungen mit Methoden der Gruppentheorie durchgeführt.

12.c Spin-Bahn-Kopplung und Zeitumkehr-Invarianz

Siehe Hunklinger-Enss: 8.1 $E(\mathbf{k}) \uparrow = E(-\mathbf{k}) \downarrow$ S. 248-249

Bisher haben wir spinabhängige Beiträge zum Potential vernachlässigt. Mit der Spin-Bahn-Kopplung (bewirkt die Feinstrukturaufspaltung im Atom) lautet der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) + \lambda\nabla V(\mathbf{r}) \cdot \left(\frac{1}{i}\nabla \times \boldsymbol{\sigma}\right) \quad (12.20)$$

mit der Kopplung λ und den Pauli-Matrizen

$$\lambda = \left(\frac{\hbar}{2mc}\right)^2, \quad \boldsymbol{\sigma} = \left(\left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} 0 & i \\ -i & 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right) \right). \quad (12.21)$$

Wir zeigen nun, dass es in einem solchen System trotz der Spinabhängigkeit immer eine zweifache Entartung gibt. Es sei $H\psi = \epsilon\psi$. Wir bilden das Konjugiert-Komplexe in der Ortsdarstellung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) + \lambda\nabla V(\mathbf{r}) \cdot \left(\frac{1}{i}\nabla \times (-\boldsymbol{\sigma}^*)\right) \right) \psi^* = \epsilon\psi^*. \quad (12.22)$$

Man rechnet leicht nach, dass

$$-\boldsymbol{\sigma}^* = \sigma_y^{-1}\boldsymbol{\sigma}\sigma_y, \quad \sigma_y^{-1}H\sigma_y\psi^* = \epsilon\psi^*, \quad H(i\sigma_y\psi^*) = \epsilon(i\sigma_y\psi^*). \quad (12.23)$$

Man bezeichnet

$$\psi_T = i\sigma_y\psi^* = \begin{pmatrix} -\psi_\downarrow^* \\ \psi_\uparrow^* \end{pmatrix} \text{ als den zu } \psi = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix} \quad (12.24)$$

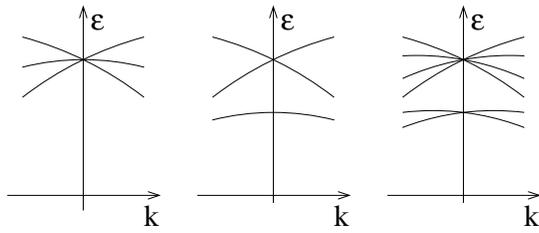
zeitumkehrten Zustand. Aus $\psi = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ folgt der zeitumkehrte Zustand $\psi_T = \psi_{-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Bei Zeitumkehrinvarianz gilt daher $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{-\mathbf{k}}$. (Die Zeitumkehr-Invarianz wird durch ein äußeres Magnetfeld oder spontane Magnetisierung gebrochen.)

12.d Inversion und Zeitumkehrinvarianz

Die zeitumkehrte und die raumgespiegelte Eigenfunktion sind orthogonal zu einander,

$$\sum_s \int d^3r \psi_{T,s}^*(\mathbf{r})\psi_s(-\mathbf{r}) = \int d^3r (-\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(-\mathbf{r}) + \psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow(-\mathbf{r})) = 0. \quad (12.25)$$

Falls beide Invarianzen bestehen, sind alle Zustände zu gegebenem \mathbf{k} -Vektor (mindestens) zweifach entartet: Kramers-Entartung.

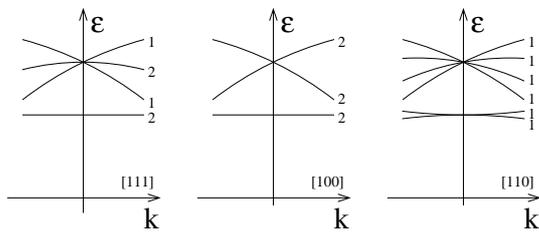


In der Figur wird die Situation für p -Bänder gezeigt. In der ersten der drei Figuren wird der Fall ohne Spin-Bahn-Kopplung gezeigt: für $k = 0$ hat man 6-fache Entartung, für endliches k dreimal zweifache Entartung (Spin-Entartung).

Zweite Figur: Mit Spin-Bahn-Kopplung und Inversions-Zentrum (z.B. Ge) hat man für $k = 0$ vierfache und zweifache Entartung ($p_{3/2}$ und $p_{1/2}$), für $k \neq 0$ besteht dreimal eine zweifache Entartung (Ge).

Dritte Figur: Mit Spin-Bahn-Kopplung, aber ohne Inversions-Zentrum hat man für $k = 0$ wieder vierfach und zweifach Entartung, für $k \neq 0$ bleibt keine Entartung außer in Symmetrie-Richtungen (InSb).

In allen Fällen besteht die Invarianz $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$. Diese Darstellung gilt für eine allgemeine k -Richtung. In der Regel werden die Bandenergien aber für bestimmte Symmetrie-Richtungen wiedergegeben.



Das sieht für InSb (Indium-Antimonid) dann etwa so aus (vgl. Quanten-Kittel Fig. 14.6). Man erkennt, dass nur in $[110]$ -Richtung die Entartung vollständig aufgehoben ist. In $[100]$ -Richtung sind alle Zustände zweifach entartet, in $[111]$ -Richtung sind sie teilweise zweifach entartet.

13 Quanten-Halleffekt

Siehe Hunklinger-Enss: 8.4 Quantisierung der Elektronenbahnen im Magnetfeld S. 274-286

13.a Freie Elektronen im Magnetfeld und im elektrischen Feld

13.a.α Wiederholung aus der Mechanik und Bewegungsgleichungen

In der Hamilton-Mechanik leitet man für ein Elektron im elektromagnetischen Feld die Lagrange-Funktion

$$L = \frac{m}{2}v^2 - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{v} + e\Phi(\mathbf{r}) \quad (13.1)$$

her. Dabei ist \mathbf{A} das Vektor-Potential und Φ das skalare Potential des elektromagnetischen Feldes. Hieraus ergeben sich die Komponenten des kanonischen Impulses

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial v_\alpha} = mv_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha \quad (13.2)$$

und damit die Hamilton-Funktion

$$H = p_\alpha v_\alpha - L = (mv_\alpha - \frac{e}{c}A_\alpha)v_\alpha - \frac{m}{2}v^2 + \frac{e}{c}\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - e\Phi = \frac{m}{2}v^2 - e\Phi \quad (13.3)$$

oder, wenn wir $\mathbf{v} = \frac{1}{m}(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})$ einsetzen

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 - e\Phi. \quad (13.4)$$

Dabei ist \mathbf{p} der kanonische Impuls, für den klassisch die kanonischen Poisson-Klammern und quantenmechanisch die kanonischen Kommutator-Relationen gelten. Hingegen ist $\mathbf{P} = m\mathbf{v} = \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$ der mechanische Impuls.

Für diesen gelten die Kommutator-Relationen

$$[P_\alpha, P_\beta] = [p_\alpha + \frac{e}{c}A_\alpha, p_\beta + \frac{e}{c}A_\beta] = \frac{e\hbar}{ic}(\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha) = \frac{e\hbar}{ic}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma. \quad (13.5)$$

Die Komponenten des mechanischen Impulses kommutieren also nicht miteinander. Man erhält die Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{r}, H] = \frac{1}{2mi\hbar}([\mathbf{r}, p_\alpha]P_\alpha + P_\alpha[\mathbf{r}, p_\alpha]) = \frac{\mathbf{P}}{m}, \quad (13.6)$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{P}} &= \frac{1}{2mi\hbar}[\mathbf{P}, P^2] + \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{P}, e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}] = \frac{1}{2mi\hbar}([\mathbf{P}, P_\alpha]P_\alpha + P_\alpha[\mathbf{P}, P_\alpha]) - e\mathbf{E} \\ &= -\frac{e}{2c}(\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \dot{\mathbf{r}}) - e\mathbf{E} \end{aligned} \quad (13.7)$$

wie in der klassischen Mechanik. (Hieraus folgt für homogene Felder die Überlagerung von Zyklotron-Schwingungen der Frequenz $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ und falls \mathbf{E} senkrecht zu \mathbf{B} steht eine Trift mit der Geschwindigkeit $\frac{cE}{B}$.)

13.a.β Quantenmechanische Behandlung

Wir bestimmen nun die Eigenfunktionen in einem Magnetfeld, dessen Richtung wir parallel zur z -Achse annehmen, und einem dazu senkrecht stehenden in x -Richtung orientierten elektrischen Feld,

$$\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A} = B\mathbf{e}_z, \quad \mathbf{A} = Bx\mathbf{e}_y, \quad (13.8)$$

$$\mathbf{E} = -\text{grad}\Phi = E\mathbf{e}_x, \quad \Phi = -eEx. \quad (13.9)$$

Der Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{eB}{c}x\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + eEx \right) \psi = \epsilon\psi \quad (13.10)$$

Da die y - und z -Komponenten des Impulses mit H vertauschen, können wir für die Wellenfunktion ψ ansetzen

$$\psi = e^{i(k_y y + k_z z)} \hat{\psi}(x). \quad (13.11)$$

Damit lautet die Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} (\hbar k_y + \frac{eB}{c} x)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 + eEx \right) \hat{\psi} = \epsilon \hat{\psi} \quad (13.12)$$

oder mit

$$\omega_c = \frac{eB}{mc}, \quad x_0 = -\frac{\hbar c k_y}{eB} + \frac{mc^2 E}{eB^2} \quad (13.13)$$

finden wir

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega_c^2 (x - x_0)^2 \right) \hat{\psi} = \left(\epsilon - \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 - eEx_0 + \frac{mc^2 E^2}{2B^2} \right) \hat{\psi}. \quad (13.14)$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators der Frequenz ω_c , der um x_0 zentriert ist. Die Energie-Eigenwerte ergeben sich dann zu

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 + eEx_0 - \frac{mc^2 E^2}{2B^2} + \hbar \omega_c \left(\nu + \frac{1}{2} \right). \quad (13.15)$$

Die Quantenzahl ν charakterisiert das jeweilige Landau-Niveau. Ohne äußeres elektrisches Feld sind die Energien von x_0 unabhängig. Wir wollen feststellen, wieviele Zustände in einem Niveau liegen, und betrachten dazu ein Quadrat in der x, y -Ebene mit Kantenlänge L . In y -Richtung verlangen wir periodische Randbedingungen. Dann erhalten wir für benachbarte Zustände

$$\Delta k_y = \frac{2\pi}{L}, \quad \Delta x_0 = \frac{2\pi \hbar c}{LeB}. \quad (13.16)$$

Damit ergibt sich eine Entartung

$$\hat{N} = \frac{L}{\Delta x_0} = \frac{L^2 eB}{2\pi \hbar c} \quad (13.17)$$

Man hat also pro Flächeneinheit $\frac{eB}{2\pi \hbar c}$ Zustände in einem Landau-Niveau. Wir betrachten nun den Halleffekt und bestimmen dazu die Geschwindigkeiten der Elektronen

$$\langle v_x \rangle = \frac{\hbar}{i} \langle \partial_x \rangle = 0, \quad \langle v_y \rangle = \frac{1}{m} \langle \frac{\hbar}{i} \partial_y \rangle + \frac{eB}{mc} \langle x \rangle = \frac{1}{m} (\hbar k_y + \frac{eB}{c} x_0) = c \frac{E}{B}. \quad (13.18)$$

Für ein gefülltes Landau-Niveau eines zweidimensionalen Elektronengases erhält man damit die Hallstromdichte

$$j_y = en \langle v_y \rangle = e \frac{\hat{N}}{L^2} \langle v_y \rangle = \frac{e^2 B}{hc} c \frac{E}{B} = \frac{e^2}{h} E \quad (13.19)$$

Dabei ist n die Dichte der Elektronen pro Fläche. Man erhält also eine Halleitfähigkeit pro gefülltem Landau-Niveau

$$\sigma_H = \frac{j_y}{E_x} = \frac{e^2}{h}. \quad (13.20)$$

13.b Ganzzahliger Halleffekt

Der ganzzahlige Quanten-Halleffekt wurde von v. Klitzing entdeckt, Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 496. Erste Erklärungen wurden gegeben von Laughlin, Phys. Rev. B 23 (1981) 5632 und Halperin, Phys. Rev. B 25 (1982) 2158. Beobachtet wurde, dass in Schichten, die Elektronen tragen, bei Anlegen eines starken Magnetfeldes senkrecht zur Schicht bei tiefen Temperaturen in Abhängigkeit vom Magnetfeld Plateaux in der Halleitfähigkeit bei ganzzahligen Vielfachen von $\frac{e^2}{h}$ mit hoher Präzision auftreten. Im ersten Moment würde man argumentieren, dass ja zwischen Landau-Niveaus große Energie-Lücken liegen, so dass die Fermikante meist zwischen den Niveaus liegt und daher fast immer nur gefüllte Landau-Niveaus beitragen, was dann zu diesem Ergebnis führt. Aber die Erklärung ist falsch, denn

die Zahl der Elektronen ist vorgegeben und damit auch die teilweise Füllung des obersten besetzten Landau-Niveaus.

Tatsächlich spielt eine Rolle, dass sich auf Grund von Unordnung die Elektronen in einem Zufallspotential bewegen. Um zu sehen, was passiert, wollen wir die folgende Geometrie betrachten. Wir nehmen an, die Elektronen können sich auf einem Zylinder bewegen. Wir bezeichnen die Koordinate in Richtung der Zylinderachse mit x und längs des Zylinderumfangs mit y . Durch den Zylinder geht ein magnetischer Fluss Φ_m , der in x -Richtung variiert und dadurch ein Magnetfeld senkrecht zum Zylinder-Mantel erlaubt. Weiterhin sei dieser Fluss zeitabhängig. Die zeitliche Veränderung induziert eine Spannung $\frac{1}{c} \frac{\partial \Phi_m}{\partial t}$ längs des Umfangs. Das Vektorpotential ist dann

$$\mathbf{A} = \mathbf{e}_y \left(Bx + \frac{\Phi_m}{L_y} \right) = \mathbf{e}_y (Bx - cE_y t), \quad (13.21)$$

wobei L_y der Zylinder-Umfang ist. damit hat man das zeitabhängige Problem für freie Elektronen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{eBx}{c} - E_y t \right)^2 \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (13.22)$$

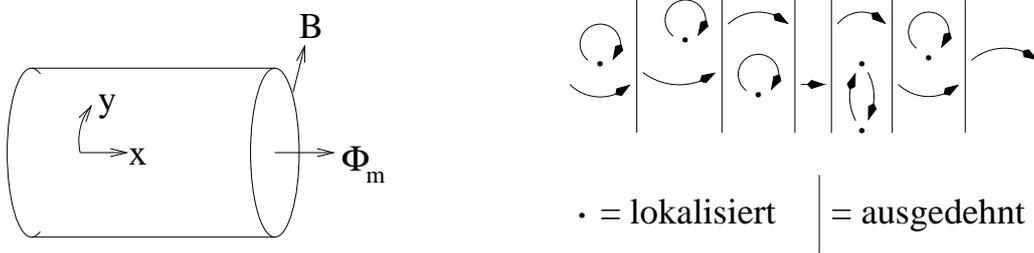
mit der (partikulären) Lösung

$$\psi = e^{i(k_x x + k_y y - \epsilon t/\hbar)} \hat{\psi}(x - x_0(t)), \quad (13.23)$$

wobei $\hat{\psi}$ wieder die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators ist und

$$x_0 = \frac{cEt}{B} - \frac{\hbar c k_y}{eB}, \quad \frac{\hbar k_x}{m} = \frac{cE}{B}, \quad \epsilon = \hbar \omega_c \left(\nu + \frac{1}{2} \right) + \frac{c^2 E^2}{2mB^2} \quad (13.24)$$

Die Wellenfunktionen verschieben sich in dieser Beschreibung mit der Geschwindigkeit cE/B in x -Richtung. Für freie Elektronen ergibt sich damit wieder die gleiche Geschwindigkeit und der gleiche Beitrag zur Halleitfähigkeit.



Tatsächlich bewegen sich die Elektronen aber in einem Zufallspotential. Generell gilt für die Komponente P_y des mechanischen Impulses bei Änderung des magnetischen Flusses Φ_m um $\Delta \Phi_m$

$$\begin{aligned} P_y(\Delta \Phi_m) e^{-\frac{ie\Delta \Phi_m}{\hbar c L_y} y} &= \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} \left(A_y + \frac{\Delta \Phi_m}{L_y} \right) \right) e^{-\frac{ie\Delta \Phi_m}{\hbar c L_y} y} \\ &= e^{-\frac{ie\Delta \Phi_m}{\hbar c L_y} y} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} A_y \right) = e^{-\frac{ie\Delta \Phi_m}{\hbar c L_y} y} P_y(0). \end{aligned} \quad (13.25)$$

Damit folgt mit einem beliebigen Potential auf dem Zylinder aus

$$H(\Phi_m) \psi = \epsilon \psi \quad (13.26)$$

auch

$$H(\Phi_m + \Delta \Phi_m) e^{-\frac{ie\Delta \Phi_m}{\hbar c L_y} y} \psi = \epsilon e^{-\frac{ie\Delta \Phi_m}{\hbar c L_y} y} \psi. \quad (13.27)$$

Die Wellenfunktion muss längs des Zylinderumfangs periodisch sein. Dies ist für $\Delta \Phi_m = \frac{\hbar c}{e}$ erfüllt. Man erhält also bei Änderung von Φ_m um ein halbes Flussquant bis auf eine Phase $e^{-2\pi i y/L_y}$ die gleichen Eigenfunktionen. Das heißt eine Veränderung von Φ_m um $\hbar c/e$ bewirkt eine Abbildung Eigenfunktion \rightarrow Eigenfunktion. Eigenfunktionen im ungeordneten Potential können bereits ohne äußere

magnetischen oder elektrischen Felder lokalisiert oder ausgedehnt sein. Bei Anlegen des Magnetfeldes werden die lokalisierten Zustände sich wenig ändern. Bei Variation von Φ_m werden sie sich in sich abbilden. Dagegen werden sich ausgedehnte im wesentlichen in x-Richtung bewegen. Bei vollständiger Besetzung der ausgedehnten Zustände innerhalb eines Landau-Niveaus wird bei Änderung von Φ_m um hc/e sich eine ganze Zahl von Elektronen, in der Regel eins (man stelle sich an einer Stelle einen idealen Draht vor, der freie Elektronenbewegung erlaubt) durch den Querschnitt bewegen. Wenn daher die Fermikante außerhalb des Bereichs der ausgedehnten Zustände liegt, so erhält man in der Tat als Hall-Leitfähigkeit die Anzahl der Landau-Niveaus, deren ausgedehnte Zustände besetzt sind, multipliziert mit e^2/h . Diese Größe wurde wegen ihrer hervorragenden Reproduzierbarkeit inzwischen als Leitwert-Normal eingeführt. Das Inverse wurde zu $h/e^2 = 25812.8\Omega_K$ definiert, wobei der Index K für v. Klitzing steht. Die ausgedehnten Zustände liegen in der Regel in der Nähe des Landau-Niveaus ohne Störung, während die weiter entfernten Zustände lokalisiert sind. Geht daher die Fermi-Energie bei Variation des Magnetfeldes durch das Zentrum des Bandes mit den ausgedehnten Zuständen, dann verändert sich die Halleitfähigkeit; in diesem Bereich erhält man auch einen Beitrag zur Parallel-Leitfähigkeit. Bewegt sich die Fermikante durch den Bereich der lokalisierten Zustände, dann nimmt die Halleitfähigkeit ihren quantisierten Wert an und die Parallelleitfähigkeit verschwindet.

Ein topologische Argument, das auch für wechselwirkende Systeme gilt, wurde von Avron und Seiler, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 259 gegeben. Die Frage, wie sich die Landau-Niveaus aufspalten und welchen Beitrag diese zum quantisierten Halleffekt liefern, wird von Thouless, Kohmoto, Nightingale und den Nijs, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 405 gegeben.

13.c Gebrochenzahliger quantisierter Halleffekt

Entdeckung durch Tsui, Störmer und Gossard, Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 496, Laughlin-Wellenfunktion Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 1395.

Wir bestimmen zunächst nochmals die Wellenfunktionen des freien Elektronengases im starken Magnetfeld ohne elektrisches Feld. Wir verwenden die symmetrische Eichung $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x)$

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \partial_x - \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \partial_y + \frac{eB}{2c} x \right)^2. \quad (13.28)$$

Wir führen nun die Koordinaten

$$(\xi, \eta) = \sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}}(x, y) \quad (13.29)$$

ein, womit sich H in der Form

$$H = \frac{\hbar}{4} \omega_c \left(\left(\frac{1}{i} \partial_\xi - \eta \right)^2 + \left(\frac{1}{i} \partial_\eta + \xi \right)^2 \right) = \frac{\hbar}{4} \omega_c \left(-\partial_\xi^2 - \partial_\eta^2 + \xi^2 + \eta^2 + 2i(\eta \partial_\xi - \xi \partial_\eta) \right) \quad (13.30)$$

schreiben lässt und setzen schließlich

$$z = \xi - i\eta, z^* = \xi + i\eta, \quad (13.31)$$

woraus

$$\partial_\xi = \partial_z + \partial_{z^*}, \quad \partial_\eta = -i\partial_z + i\partial_{z^*} \quad (13.32)$$

mit

$$\partial_z z = 1, \quad \partial_z z^* = 0, \quad \partial_{z^*} z = 0, \quad \partial_{z^*} z^* = 1. \quad (13.33)$$

folgt. Damit lässt sich der Hamilton-Operator in der Form

$$H = \hbar \omega_c \left(-\partial_z + \frac{1}{2} z^* \right) \left(\partial_{z^*} + \frac{1}{2} z \right) + \frac{1}{2} \hbar \omega_c \quad (13.34)$$

schreiben.

Für das unterste Landau-Niveau muss nun gelten

$$\left(\partial_{z^*} + \frac{1}{2} z \right) \psi(z, z^*) = 0. \quad (13.35)$$

Daraus folgt

$$\frac{\partial \ln \psi}{\partial z^*} = -\frac{1}{2}z \quad (13.36)$$

mit der Lösung

$$\psi = e^{-\frac{1}{2}zz^*} f(z), \quad (13.37)$$

wobei f eine beliebige holomorphe Funktion von z ist. Alle diese Wellenfunktionen gehören zum untersten Landau-Niveau mit $\epsilon = \frac{1}{2}\hbar\omega_c$. Die höheren Landau-Niveaus erhält man durch mehrfaches Anwenden des Aufsteige-Operators

$$\psi_\nu = (-\partial_z + \frac{1}{2}z^*)^\nu (e^{-\frac{1}{2}zz^*} f(z)) = e^{-\frac{1}{2}zz^*} (-\partial_z + z^*)^\nu f(z) \quad (13.38)$$

mit Energie $\epsilon_\nu = \hbar\omega_c(\nu + \frac{1}{2})$, da

$$[-\partial_z + \frac{1}{2}z^*, \partial_{z^*} + \frac{1}{2}z] = -1. \quad (13.39)$$

Ein Satz orthogonaler Eigenfunktionen im untersten Landau-Niveau kann damit in der Form

$$\psi_l = z^l e^{-\frac{1}{2}zz^*} \quad (13.40)$$

geschrieben werden. Laughlin hat nun für den gebrochenzahligen Quanten-Hall-Effekt die folgende Mehrteilchen-Wellenfunktion vorgeschlagen:

$$\psi(z_1, z_2, \dots, z_N) = \prod_{i < j} (z_i - z_j)^m \prod_i e^{-\frac{1}{2}z_i z_i^*}. \quad (13.41)$$

Für $m = 1$ ist dies die Slater-Determinante = Vandermonde-Determinante

$$\begin{pmatrix} z_1^{N-1} & z_1^{N-2} & \dots & z_1 & 1 \\ z_2^{N-1} & z_2^{N-2} & \dots & z_2 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ z_{N-1}^{N-1} & z_{N-1}^{N-2} & \dots & z_{N-1} & 1 \\ z_N^{N-1} & z_N^{N-2} & \dots & z_N & 1 \end{pmatrix} = \prod_{i < j} (z_i - z_j) \quad (13.42)$$

für alle Zustände bis $l = N - 1$. Man kann natürlich auf der linken Seite zur Potenz von z_i noch das jeweilige $e^{-z_i z_i^*/2}$ multiplizieren und erhält dann die N -Teilchen-Wellenfunktion. Da die Elektronen Fermionen sind, muss die Wellenfunktion bei Vertauschung zweier Elektronen ihr Vorzeichen wechseln. Dies ist der Fall für ungerades m . Diese Laughlin-Zustände stellen eine sehr gute Näherung der Mehrteilchen-Wellenfunktion dar, da bei Annäherung zweier Elektronen die Wellenfunktion wie a^m verschwindet, wobei a der Abstand der Elektronen ist. Damit wird der gegenseitigen Abstoßung gut Rechnung getragen.

Wir entnehmen der Wellenfunktion, dass eine Besetzung bis $z^{m(N-1)}$ stattfindet. Das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $(z^*z)^{mN} e^{-z^*z}$ liegt bei $z^*z = m(N-1) \approx mN$, das heißt bei $x^2 + y^2 = \frac{2\hbar c}{eB} mN$, was einer Kreisfläche $\frac{\hbar c}{eB} mN$ entspricht. Die Maximalzahl von Elektronen auf dieser Fläche ist mN , das heißt der Füllfaktor definiert als die Anzahl der Elektronen N durch die maximal mögliche Elektronenzahl mN beträgt $1/m$. Die Hall-Leitfähigkeit ergibt sich dann zu $\sigma_H = \frac{e^2}{hm}$, da nur der Bruchteil $1/m$ der Elektronen beiträgt. Es wurden $m = 3, 5, 7$ gefunden, aber auch andere Brüche mit ungeraden Nennern. Auf die Erklärung dieser Zustände können wir hier nicht eingehen.

Eine gute weiterführende Übersicht gibt 'The Quantum Hall Effect', Prange und Girvin (Herausgeber), Springer-Verlag 1987.

13.d Zyklotron-Bewegung

Wir können an dieser Stelle auf die Zyklotronbewegung eingehen und uns die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für ein Elektron, $H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ ansehen. Eine (spezielle) Lösung lässt sich als Gaußsches Wellenpaket schreiben

$$\psi = e^{-\frac{\alpha}{2}z^2 - \frac{\beta}{2}z^{*2} - czz^* + \alpha^*z - \beta z^* + i\phi} \quad (13.43)$$

Dabei wollen wir erlauben, dass α , β und ϕ von der Zeit abhängen. Die zeitliche Veränderung von α und β bewirkt eine Veränderung des Schwerpunkts des Wellenpakets und gibt damit seine Bewegung wieder. Im Prinzip könnten auch a , b und c von der Zeit abhängen. Dies würde eine Veränderung der Breite des Wellenpakets beschreiben. Solche Bewegungen interessieren hier nicht. Wir wenden nun H und $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ auf ψ an und erhalten

$$(\partial_{z^*} + \frac{1}{2}z)\psi = (-bz^* - cz + \beta + \frac{1}{2}z)\psi \quad (13.44)$$

$$(-\partial_z + \frac{1}{2}z^*)(\partial_{z^*} + \frac{1}{2}z)\psi = \left((az + cz^* - \alpha^* + \frac{1}{2}z^*)(-bz^* - cz + \beta + \frac{1}{2}z) + c - \frac{1}{2} \right) \psi \quad (13.45)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = (z\dot{\alpha}^* + z^*\dot{\beta} + i\dot{\phi})\psi. \quad (13.46)$$

Damit folgt dann aus $H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$

$$\hbar\omega_c \left((az + cz^* - \alpha^* + \frac{1}{2}z^*)(-bz^* - cz + \beta + \frac{1}{2}z) + c \right) = i\hbar(z\dot{\alpha}^* + z^*\dot{\beta} + i\dot{\phi}). \quad (13.47)$$

Die bilinearen Beiträge in z und z^* treten nur auf der linken Seite der Gleichung auf. Es muss daher gelten

$$(az + cz^* + \frac{1}{2}z^*)(-bz^* - cz + \frac{1}{2}z) = 0, \quad (13.48)$$

das heißt einer der beiden Faktoren muss verschwinden. Daher ist entweder $a = 0$, $c = -\frac{1}{2}$ oder $b = 0$, $c = \frac{1}{2}$. Ein normierbares ψ erhält man nur für $c > 0$, da die Beiträge proportional zu z^2 und z^{*2} im Exponenten nicht in allen Richtungen y/x abfallen. Daher müssen wir die zweite Lösung $b = 0$, $c = \frac{1}{2}$ verwenden. Der Koeffizient a ist unbestimmt. Damit die Funktion in allen Richtungen abfällt, muss $|a| < \frac{1}{2}$ gelten. Der Grenzfall $|a| = \frac{1}{2}$ ergibt in einer Richtung, die von der Phase von a abhängt (a muss nicht reell sein) abgesehen von einem Eichfaktor ebene Wellen, wie wir sie auch früher schon kennengelernt haben. Für das folgende wollen wir aber $a = 0$ wählen, was einen gleichmässigen Abfall des Wellenpakets in alle Richtungen ergibt

$$\psi = e^{-\frac{1}{2}zz^* + \alpha^*z - \beta z^* + i\phi}. \quad (13.49)$$

Es bleibt nun für α , β und ϕ die Gleichung

$$\omega_c \left((z^* - \alpha^*)\beta + \frac{1}{2} \right) = i\hbar(z\dot{\alpha}^* + z^*\dot{\beta} + i\dot{\phi}) \quad (13.50)$$

oder aufgeteilt in die Koeffizienten von z , z^* und dem konstanten Term

$$\dot{\alpha}^* = 0, \quad \omega_c\beta = i\dot{\beta}, \quad \omega_c\left(\frac{1}{2} - \alpha^*\beta\right) = -\dot{\phi} \quad (13.51)$$

zu lösen. Man findet

$$\alpha = \text{const} = \alpha_0, \quad \beta = \beta_0 e^{-i\omega_c t}, \quad \phi = -\frac{1}{2}i\omega_c t - \alpha_0^*\beta_0 e^{-i\omega_c t} + \phi_0. \quad (13.52)$$

und

$$\psi = e^{-\frac{1}{2}zz^* + \alpha_0^*z - \beta_0 e^{-i\omega_c t} z^* - i\alpha_0^*\beta_0 e^{-i\omega_c t} - \frac{1}{2}i\omega_c t + i\phi_0}. \quad (13.53)$$

Wir zerlegen nun den Exponenten der Wellenfunktion in seinen Real- und Imaginärteil und finden

$$\psi = e^{-\frac{1}{2}(z - \alpha - \beta)(z^* - \alpha^* - \beta^*) + \frac{1}{2}i(z\alpha^* - z^*\alpha + z^*\beta - z\beta^* - \alpha^*\beta + \alpha\beta^* - \omega_c t)}, \quad (13.54)$$

wobei wir $\frac{1}{2}(\alpha^*\alpha + \beta^*\beta)$ in den Imaginärteil von ϕ_0 absorbiert haben. Dieser Zerlegung entnehmen wir, dass der Schwerpunkt des Wellenpakets durch

$$z = \alpha + \beta = \alpha_0 + \beta_0 e^{-i\omega_c t} \quad (13.55)$$

gegeben ist. Dieser durchläuft also einen Kreis, dessen Mittelpunkt durch α_0 und dessen Radius (im ξ, η -Raum) durch $|\beta_0|$ gegeben ist, mit der Zyklotronfrequenz ω_c .

14 Magnonen

14.a Ferromagnet

Siehe Hunklinger-Enss: 10.2 Ferromagnetismus S. 355-359

Wir gehen aus von einem Modell wechselwirkender Spins \mathbf{S}_r , die an Gitterplätzen lokalisiert sind (Heisenberg-Modell). Der Hamilton-Operator sei

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{r,d} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_{r+d} - g\mu_B \mathbf{H}_0 \cdot \sum_r \mathbf{S}_r, \quad (14.1)$$

wobei \mathbf{d} über die nächsten Nachbarn läuft. Da jedes Spin-Produkt in der Summe zweimal vorkommt, haben wir den Faktor $\frac{1}{2}$ eingeführt. Der Operator des Gesamtspins ist

$$\mathbf{S}_{\text{tot}} = \sum_r \mathbf{S}_r. \quad (14.2)$$

Ist J positiv, dann ist es energetisch günstig, wenn sich die Spins alle parallel einstellen. Es ergibt sich ein Zustand mit Gesamtspin NS . Ohne Magnetfeld ist der Zustand $2NS + 1$ -fach entartet. Ist das Magnetfeld positiv, so ist der Zustand mit maximalem S^z energetisch am günstigsten und man hat für den Grundzustand $|0\rangle$

$$\mathbf{S}_{\text{tot}} \cdot \mathbf{S}_{\text{tot}}|0\rangle = NS(NS + 1)|0\rangle, \quad S_{\text{tot}}^z|0\rangle = NS|0\rangle. \quad (14.3)$$

14.a.α Spinwellen-Näherung

Wir betrachten zunächst die Spinwellen-Näherung. Dazu verwenden wir die Bewegungsgleichung

$$i\hbar \dot{A} = [A, H], \quad (14.4)$$

die aus

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | [A, H] | \psi \rangle \quad (14.5)$$

folgt. Abgesehen von der Termen in der Wechselwirkung, die nicht vom Spin \mathbf{S}_r abhängen, können wir die Wechselwirkung in der Form

$$\mathbf{S}_r \cdot \mathbf{f}, \quad \mathbf{f} = -J \sum_d \mathbf{S}_{r+d} - g\mu_B \mathbf{H}_0 \quad (14.6)$$

schreiben. Es folgt dann

$$i\hbar \dot{S}_r^\alpha = [S_r^\alpha, S_r^\beta] f^\beta = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} S_r^\gamma f^\beta = -i(\mathbf{S} \times \mathbf{f})^\alpha, \quad (14.7)$$

also

$$\hbar \dot{\mathbf{S}}_r = \mathbf{S}_r \times (J \sum_d \mathbf{S}_{r+d} + g\mu_B \mathbf{H}_0). \quad (14.8)$$

Der Spin präzessiert um ein effektives Magnetfeld, das sich aus dem angelegten Magnetfeld \mathbf{H}_0 und dem Wechselwirkungs-Magnetfeld der Nachbar-Spins zusammensetzt.

Wir wollen nun annehmen, dass das Magnetfeld in z -Richtung ausgerichtet ist, und dass die Spins im Mittel in z -Richtung ausgerichtet sind. Wir ersetzen daher die Faktoren S_r^z jeweils durch $\langle S^z \rangle$

$$\hbar \dot{S}_r^x = (Jz\langle S^z \rangle + g\mu_B H_0) S_r^y - J\langle S^z \rangle \sum_d S_{r+d}^y, \quad (14.9)$$

$$\hbar \dot{S}_r^y = -(Jz\langle S^z \rangle + g\mu_B H_0) S_r^x + J\langle S^z \rangle \sum_d S_{r+d}^x. \quad (14.10)$$

Setzen wir nun ebene Wellen in einem primitiven Gitter an,

$$S_r^x = A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t}, \quad S_r^y = B e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t}, \quad (14.11)$$

so folgt

$$-i\hbar\omega A = \hbar\omega_{\mathbf{k}}B, \quad (14.12)$$

$$-i\hbar\omega B = -\hbar\omega_{\mathbf{k}}A, \quad (14.13)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\mathbf{d}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}}, \quad (14.14)$$

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = Jz\langle S^z \rangle (1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + g\mu_B H_0, \quad (14.15)$$

wobei $\omega_{\mathbf{k}}$ die Eigenfrequenzen der Magnonen sind. Für kleines \mathbf{k} ist

$$z(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) \approx \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{d}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{d})^2, \quad (14.16)$$

so dass man Anregungsenergien

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} \approx g\mu_B H_0 + \frac{J\langle S^z \rangle}{2} \sum_{\mathbf{d}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{d})^2 \quad (14.17)$$

findet, was sich für ein einfach kubisches, kubisch raumzentriertes und kubisch flächenzentriertes Gitter der Gitterkonstante a auf

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = g\mu_B H_0 + J\langle S^z \rangle (ka)^2 \quad (14.18)$$

reduziert, was wir auch

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = g\mu_B H_0 + \hbar^2 k^2 / (2m^*) \quad (14.19)$$

mit $J\langle S^z \rangle a^2 = \hbar^2 / (2m^*)$ schreiben können.

14.a.β Behandlung mit der Holstein-Primakoff-Transformation

Holstein und Primakoff drücken die Spin-Operatoren durch Bose-Operatoren $a_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ und $a_{\mathbf{r}}$ aus

$$S_{\mathbf{r}}^+ = S_{\mathbf{r}}^x + iS_{\mathbf{r}}^y = \sqrt{2S}(1 - a_{\mathbf{r}}^{\dagger}a_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}a_{\mathbf{r}}, \quad (14.20)$$

$$S_{\mathbf{r}}^- = S_{\mathbf{r}}^x - iS_{\mathbf{r}}^y = \sqrt{2S}a_{\mathbf{r}}^{\dagger}(1 - a_{\mathbf{r}}^{\dagger}a_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}, \quad (14.21)$$

$$S_{\mathbf{r}}^z = S - a_{\mathbf{r}}^{\dagger}a_{\mathbf{r}}. \quad (14.22)$$

Man beachtet zunächst, dass $S_{\mathbf{r}}^+$ und $S_{\mathbf{r}}^-$ hermitesch adjungiert zueinander sind. Man überzeugt sich davon, dass diese Operatoren die richtigen Eigenschaften haben. Für den Kommutator

$$\begin{aligned} [S^z, S^+] &= (S - a^{\dagger}a)\sqrt{2S}(1 - a^{\dagger}a/(2S))^{1/2}a - \sqrt{2S}(1 - a^{\dagger}a/(2S))^{1/2}a(S - a^{\dagger}a) \\ &= \sqrt{2S}(1 - a^{\dagger}a/(2S))^{1/2}[S - a^{\dagger}a, a] = \sqrt{2S}(1 - a^{\dagger}a/(2S))^{1/2}a = S^+. \end{aligned} \quad (14.23)$$

Dabei haben wir verwendet, dass $(1 - a^{\dagger}a/(2S))^{1/2}$ mit $a^{\dagger}a$ kommutiert, da ersteres nur von $a^{\dagger}a$ abhängt. Ähnlich zeigt man $[S^z, S^-] = -S^-$. Weiter findet man

$$S^-S^+ = 2Sa^{\dagger}(1 - a^{\dagger}a/(2S))a = 2Sa^{\dagger}a - a^{\dagger}a^{\dagger}aa, \quad (14.24)$$

$$\begin{aligned} S^+S^- &= 2S(1 - a^{\dagger}a/(2S))^{1/2}aa^{\dagger}(1 - a^{\dagger}a/(2S))^{1/2} \\ &= 2S(1 - a^{\dagger}a/(2S))(1 + a^{\dagger}a) = 2S + (2S - 2)a^{\dagger}a - a^{\dagger}a^{\dagger}aa. \end{aligned} \quad (14.25)$$

Dabei haben wir verwendet, dass $aa^{\dagger} = a^{\dagger}a + 1$ ist und dies mit $(1 - a^{\dagger}a/(2S))^{1/2}$ kommutiert. Hieraus lesen wir ab, dass

$$[S^+, S^-] = 2S - 2a^{\dagger}a = 2S^z, \quad (14.26)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} &= \frac{1}{2}(S^+S^- + S^-S^+) + S^{z2} \\ &= S + (2S - 1)a^{\dagger}a - a^{\dagger}a^{\dagger}aa + (S - a^{\dagger}a)^2 = S(S + 1). \end{aligned} \quad (14.27)$$

Damit ist der Nachweis erbracht, dass man die Spin-Operatoren auf diese Weise darstellen kann. Wir haben hier nur die Spinkomponenten des Spins am gleichen Ort betrachtet. Es ist offensichtlich, dass diese an verschiedenen Orten kommutieren, da auch die zugehörigen Bose-Operatoren kommutieren. Wir beobachten, dass aber die Anwendung der Bose-Operatoren auf $a^\dagger a \leq 2S$ beschränkt ist, da sonst die Wurzel aus einem negativen Ausdruck zu ziehen ist. In Näherungen wird dies nicht immer berücksichtigt, so dass diese dann nur für $\langle a^\dagger a \rangle \ll 2S$ gültig sind.

Für sehr niedrige Temperaturen kann man

$$S_{\mathbf{r}}^+ = \sqrt{2S}a, \quad S_{\mathbf{r}}^- = \sqrt{2S}a^\dagger \quad (14.28)$$

approximieren. Vernachlässigt man im Produkt

$$S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{r}'}^z = (S - a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}})(S - a_{\mathbf{r}'}^\dagger a_{\mathbf{r}'}) \approx S^2 - S(a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}'}^\dagger a_{\mathbf{r}'}) \quad (14.29)$$

den Anteil $a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}'} a_{\mathbf{r}'}^\dagger a_{\mathbf{r}}$, das heißt überall im Hamilton-Operator Beiträge, die Produkte aus vier Bosonen-Operatoren enthalten, so bleibt

$$\begin{aligned} H &= -\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{d}} \left(\frac{1}{2} (S_{\mathbf{r}}^+ S_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^- + S_{\mathbf{r}}^- S_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^+) + S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^z \right) - g\mu_B H_0 \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^z \\ &= -\frac{JS}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{d}} \left(a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^\dagger a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + S - a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}} - a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^\dagger a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} \right) - g\mu_B H_0 \sum_{\mathbf{r}} (S - a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (14.30)$$

Wir können nun die Bose-Operatoren wieder der Fourier-Transformation unterwerfen

$$a_{\mathbf{r}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (14.31)$$

und erhalten

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} (JzS(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + g\mu_B H_0) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad E_0 = -\frac{J}{2} N z S^2 - g\mu_B H_0 N S. \quad (14.32)$$

Durch Berücksichtigung der Terme vierter Ordnung in den Bose-Operatoren kann man dann Korrekturen bei höheren Temperaturen bestimmen.

14.a.γ Spezifische Wärme und Magnetisierung

Wir wollen noch die Energie und die Magnetisierung bei tiefen Temperaturen und ohne äußeres Feld, $H_0 = 0$, betrachten. Für die Energie ergibt sich

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1} = E_0 + \frac{V_P}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1}. \quad (14.33)$$

Mit $d^3k = 4\pi k^2 dk$ und der Substitution $z = \beta\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \beta\hbar^2 k^2 / (2m^*)$ folgt

$$E = E_0 + \frac{V_P k_B T (2m^* k_B T)^{3/2}}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int \frac{z^{3/2} dz}{e^z - 1} = E_0 + \frac{\Gamma(5/2)\zeta(5/2)V_P k_B T (2m^* k_B T)^{3/2}}{(2\pi)^2 \hbar^3}. \quad (14.34)$$

Der Beitrag zur spezifischen Wärme ergibt sich zu

$$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{5\Gamma(5/2)\zeta(5/2)V_P k_B (2m^* k_B T)^{3/2}}{8\pi^2 \hbar^3}. \quad (14.35)$$

Die spontane Magnetisierung ergibt sich ganz analog zu

$$\begin{aligned} M(T) &= g\mu_B \langle S_{\text{tot}}^z \rangle = g\mu_B (NS - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}) \\ &= g\mu_B (NS - \frac{V_P (2m^* k_B T)^{3/2}}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int \frac{z^{1/2} dz}{e^z - 1}) \\ &= M(0) - g\mu_B \frac{\Gamma(3/2)\zeta(3/2)V_P (2m^* k_B T)^{3/2}}{(2\pi)^2 \hbar^3}. \end{aligned} \quad (14.36)$$

Es gilt also sowohl für die spezifische Wärme wie auch für die Abnahme der Magnetisierung ein $T^{3/2}$ -Gesetz.

Dabei ist $\zeta(\nu)$ die Riemannsche ζ -Funktion

$$\zeta(\nu) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\nu} \quad (14.37)$$

Der Zusammenhang ergibt sich auf folgende Weise

$$\int_0^{\infty} \frac{z^\nu dz}{e^z - 1} = \int_0^{\infty} \frac{z^\nu e^{-z} dz}{1 - e^{-z}} = \int_0^{\infty} z^\nu \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nz} dz = \Gamma(\nu + 1) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{\nu+1}} = \Gamma(\nu + 1)\zeta(\nu + 1). \quad (14.38)$$

Man findet speziell $\Gamma(3/2)\zeta(3/2) = 2.315$, $\Gamma(5/2)\zeta(5/2) = 1.783$.

14.b Antiferromagnet

Siehe Hunklinger-Enss: 10.3 Antiferromagnetismus S. 361-363

14.b.a Spinwellen-Näherung

Wir betrachten nun ein Gitter mit Spins, zwischen denen eine antiferromagnetische Kopplung besteht. Wir wollen annehmen, dass man das Gitter in zwei Untergitter A und B zerlegen kann, so dass nur jeweils eine Wechselwirkung zwischen Spins auf zwei verschiedenen Untergittern besteht. Das heißt im Hamilton-Operator

$$H = J \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{d}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - g_A H_{0A} \mu_B \sum_{\mathbf{r} \in A} S_{\mathbf{r}}^z - g_B H_{0B} \mu_B \sum_{\mathbf{r} \in B} S_{\mathbf{r}}^z \quad (14.39)$$

wollen wir annehmen, dass alle Orte \mathbf{r} auf dem Untergitter A , alle Orte $\mathbf{r} + \mathbf{d}$ aber auf dem Untergitter B liegen. Als Beispiel kann man sich vorstellen, dass auf einem einfachen Gitter mit den Gitterpunkten $\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ die Gitterpunkte mit geradem $n_1 + n_2 + n_3$ zum Untergitter A , die mit ungeradem zum Untergitter B gehören. Auf einem zentrierten Gitter gehören etwa die mit den Gitterpunkten $n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ zu A , die mit $(n_1 + 1/2)\mathbf{a}_1 + (n_2 + 1/2)\mathbf{a}_2 + (n_3 + 1/2)\mathbf{a}_3$ zu B . Ein flächenzentriertes Gitter ist nicht geeignet.

Wir nehmen nun an, dass die Spins auf dem Untergitter A vorwiegend nach oben, die auf dem Untergitter B vorwiegend nach unten ausgerichtet sind auf Grund der antiferromagnetischen Wechselwirkung und äußerer (fiktiver) Magnetfelder $H_A \geq 0$, $H_B \leq 0$.

Wir führen nun wieder die Spinwellen-Näherung durch. Mit $S^+ = S^x + iS^y$ folgt dann

$$i\hbar \frac{d}{dt} S_{A\mathbf{r}}^+ = (-Jz \langle S_b^z \rangle + g_A \mu_B H_{0A}) S_{A\mathbf{r}}^+ + J \langle S_a^z \rangle \sum_{\mathbf{d}} S_{B\mathbf{r}+\mathbf{d}}^+, \quad (14.40)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} S_{B\mathbf{r}}^+ = (-Jz \langle S_a^z \rangle + g_B \mu_B H_{0B}) S_{B\mathbf{r}}^+ + J \langle S_b^z \rangle \sum_{\mathbf{d}} S_{A\mathbf{r}+\mathbf{d}}^+. \quad (14.41)$$

Die Bestimmung der Anregungsfrequenzen für die ebenen Wellen reduziert sich dann auf die Bestimmung der Eigenwerte von

$$\begin{pmatrix} -Jz \langle S_b^z \rangle + g_A \mu_B H_{0A} & Jz \langle S_a^z \rangle \gamma_{\mathbf{k}} \\ Jz \langle S_b^z \rangle \gamma_{\mathbf{k}} & -Jz \langle S_a^z \rangle + g_B \mu_B H_{0B} \end{pmatrix}. \quad (14.42)$$

Speziell ohne äußeres Feld und für $\langle S_b^z \rangle = -\langle S_a^z \rangle$ ergibt sich

$$\hbar \omega_{\mathbf{k}} = +Jz \langle S_a^z \rangle \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}. \quad (14.43)$$

Für kleine \mathbf{k} folgt in diesem Fall aus dem ferromagnetischen Analogon $Jz(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$ für den antiferromagnetischen Fall $Jz \langle S_a^z \rangle \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} = \hbar c^* k$, also eine lineare Dispersion mit der Magnongeschwindigkeit c^* .

14.b.β Holstein-Primakoff-Transformation

Wir verwenden auf dem Untergitter A wieder die Darstellung (14.20-14.22) für die Spins, auf dem Untergitter B aber wegen der anderen Orientierung die Darstellung

$$S_{\mathbf{r}}^+ = S_{\mathbf{r}}^x + iS_{\mathbf{r}}^y = \sqrt{2S}b_{\mathbf{r}}^\dagger(1 - b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}, \quad (14.44)$$

$$S_{\mathbf{r}}^- = S_{\mathbf{r}}^x - iS_{\mathbf{r}}^y = \sqrt{2S}(1 - b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}b_{\mathbf{r}}, \quad (14.45)$$

$$S^z = b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}} - S. \quad (14.46)$$

Man überzeugt sich leicht, dass auch hier die Kommutator-Relationen und das Quadrat des Spins die richtigen Werte ergeben. Wir führen wieder die harmonische Näherung durch und erhalten

$$\begin{aligned} H &= JS \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{d}} \left(a_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + a_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^\dagger - S + a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}} + b_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} \right) \\ &\quad - g_A H_{0A} \mu_B \sum_{\mathbf{r} \in A} (S - a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}}) + g_B H_{0B} \mu_B \sum_{\mathbf{r} \in B} (S - b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}}). \end{aligned} \quad (14.47)$$

Wir führen jetzt wieder die Fourier-Transformation (14.31) und analog

$$b_{\mathbf{r}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad b_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \quad (14.48)$$

durch. Dann lässt sich der Hamilton-Operator

$$H = E_0 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\gamma_A \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \gamma_B \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right), \quad (14.49)$$

$$E_0 = JS^2 z (1 - \gamma_A - \gamma_B), \quad \gamma_A = 1 + \frac{g_A H_{0A} \mu_B}{JSz}, \quad \gamma_B = 1 - \frac{g_B H_{0B} \mu_B}{JSz}. \quad (14.50)$$

schreiben.

Um Grundzustandsenergie und Anregungsenergien zu finden, muss man den Hamilton-Operator diagonalisieren. Dies geschieht durch eine geeignete unitäre Transformation. Wir setzen

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad (14.51)$$

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}, \quad (14.52)$$

$$\hat{b}_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (14.53)$$

$$\hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger = u_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}. \quad (14.54)$$

Wir setzen der Einfachheit halber voraus, dass u und v reell sind. Die Operatoren α und β werden als Bose-Operatoren vorausgesetzt. Man überzeugt sich, dass das äquivalent ist dazu, dass auch a und b Bose-Operatoren sind. Voraussetzung ist allerdings, dass $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ gilt. Diese Operatoren setzen wir nun in den Hamilton-Operator ein. Man erhält dann

$$\begin{aligned} H &= E_0 + JSz \sum_{\mathbf{k}} (\gamma_A v_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_B v_{\mathbf{k}}^2 - 2\gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) \\ &\quad + JSz \sum_{\mathbf{k}} (\gamma_A u_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_B v_{\mathbf{k}}^2 - 2\gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \\ &\quad + JSz \sum_{\mathbf{k}} (\gamma_A v_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_B u_{\mathbf{k}}^2 - 2\gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \\ &\quad + JSz \sum_{\mathbf{k}} (-(\gamma_A + \gamma_B) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2)) (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (14.55)$$

Wir verlangen nun, dass der Koeffizient bei den anormalen Termen $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}$ verschwindet,

$$-(\gamma_A + \gamma_B) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) = 0, \quad (14.56)$$

woraus mit $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$

$$u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\gamma_A + \gamma_B}{2\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad (14.57)$$

$$\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\left(\frac{\gamma_A + \gamma_B}{2}\right)^2 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}, \quad (14.58)$$

$$(\gamma_A + \gamma_B)\frac{u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2}{2} - 2\gamma_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \quad (14.59)$$

folgt. Damit reduziert sich der Hamilton-Operator auf

$$\begin{aligned} H &= E_0 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\gamma_A + \gamma_B}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \right) \\ &+ JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\gamma_A - \gamma_B}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \right) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\gamma_B - \gamma_A}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \right) \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (14.60)$$

Falls kein äußeres Magnetfeld anliegt, reduzieren sich mit $\gamma_A = \gamma_B = 1$ die Anregungsenergien auf $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = JSz\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}$ und für kleine k hat man $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \hbar c^*k$.

14.b. γ Spezifische Wärme und Untergittermagnetisierung

Unter der Annahme, dass keine äußeren Magnetfelder anliegen, wollen wir nun Energie und Untergitter-Magnetisierung bestimmen. Wir beobachten zunächst, dass in diesem Fall $\gamma_A = \gamma_B = 1$. Damit folgt

$$\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}. \quad (14.61)$$

Wir waren bei der Betrachtung ausgegangen von einem Zustand, in dem die Spins auf A nach oben, die auf B nach unten ausgerichtet sind. Solch einen Zustand bezeichnet man als Néel-Zustand. Tatsächlich ist der Grundzustand ein komplizierterer Zustand. Der hier berechnete Zustand stellt eine bessere Näherung dar, was man schon daran erkennt, dass seine Energie E_g niedriger als die Energie E_0 des Néel-Zustandes liegt,

$$E_g = E_0 - JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} \right). \quad (14.62)$$

Die Magnetisierung des Untergitters A ergibt sich zu

$$M_A^z = g_A\mu_B \sum_{\mathbf{k}} (S - \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle) = g_A\mu_B NS - g_A\mu_B \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = g_A\mu_B N \left(S + \frac{1}{2} \right) - \frac{g_A\mu_B}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}}, \quad (14.63)$$

wobei wir $\hat{a}^\dagger \hat{a} = (u\alpha^\dagger - v\beta)(u\alpha - v\beta^\dagger)$ verwendet haben. Der Beitrag $(-v\beta)(-v\beta^\dagger)$ ergibt das v^2 . Sie ist gegenüber dem des Néel-Zustands reduziert.

Zur spezifischen Wärme brauchen wir keine neue Rechnung anstellen. Wegen der linearen Dispersion wird die Rechnung wie bei akustischen Phononen durchgeführt und ergibt einen Beitrag zur spezifischen Wärme proportional zu T^3 . Zu beachten ist, dass es zwei Magnonenäste an Stelle von drei akustischen Phononen-Ästen gibt.

Index

- Adiabatische Näherung, 5
- Antiferromagnet, 58
- Bänder
 - Symmetrien, 46
- Band-Elektronen, 40
- bcc, 7
- Besetzungszahl
 - Phononen, 24
- Bewegungsgleichung
 - elastische Schwingungen, 16
- Bloch-Theorem, 40
- Born-Oppenheimer-Huang-Näherung, 5
- Bose-Statistik, 24
- Debye-Frequenz, 25
- Debye-Temperatur, 26
- Debye-Waller-Faktor, 27
 - kubischer Kristall, 30
- Deckoperationen, 7
- Drehachsen
 - Zähligkeit, 8
- Drehung, 8
- Dulong-Petit-Gesetz, 24
- Einheitszelle, 7
- Einstein-Frequenz, 26
- Einstein-Temperatur, 26
- Elastizitäts-Moduln, 16
- Elektromagnetisches Feld
 - Quantisierung, 33
- Elektron
 - in gekreuztem elektrischen und Magnetfeld, 49
- Elektronen
 - freies Gas, 36
 - unabhängige, 36
- Elementarzelle, 7
- Ensemble
 - großkanonisches, 37
- Ensemblekanonisches, 36
- Erzeugungs-Operatoren
 - Phononen, 23
- fcc, 7
- Fermi-Energie, 36
- Fermi-Geschwindigkeit, 36
- Fermi-Impuls, 36
- Fermi-Statistik, 36
- Fermikugel, 36
- Ferromagnet, 55
 - kubische, 7
 - periodisches, 7
 - reziprokes, 9
- Gleitspiegelung, 8
- Grundzustandsenergie, antiferromagnetische, 60
- Gruppengeschwindigkeit, 45
- Halleitfähigkeit, 50
- Hallstromdichte, 50
- Hamilton-Operator
 - Phononen, 23
- Heisenberg-Modell, 55
- Holstein-Primakoff-Transformation, 56
- Impuls-Erwartungswert von Elektronen, 45
- Inversion, 8
- Inversion und Zeitumkehrinvarianz, 47
- Kontinuumstheorie
 - elastische, 15
 - Lagrange-Formulierung, 19
- Korrelationsfunktion, 10
- Kraftdichte, 17
- Lagrange-Dichte
 - Polaritonen, 31
- Landau-Niveau, 50
- Mössbauer-Effekt, 30
- Magnetisierung, 57
 - antiferromagnetische, 60
- Magnonen, 55
- Masse
 - effektive, 45
- Matrix, dynamische, 13
- Neutronen-Streuung, 27
- Normalkoordinaten, 22
- Phononen, 12, 22
 - akustische, 18
 - Bewegungsgleichungen, 13
 - kubischer Kristall, 18
- Phononenstatistik, 24
- Polariton
 - longitudinales, 32
- Polaritonen, 31
 - transversale, 33
- Potential
 - chemisches, 37
 - periodisches, 40
- Punktgruppe, 8

- Quanten-Halleffekt
 - ganzzahlig, 50
 - gebrochenzahlig, 52
- Quantenhall-Effekt, 49
- Randbedingungen, periodische, 14
- Raumgruppe, 8
- Riemannsches ζ -Funktion, 58
- Rotations-Invarianz, 12
- sc, 7
- Schallgeschwindigkeit, 18
- Schraubung, 8
- Sommerfeld-Verfahren, 38
- Spannungen
 - äußere, 20
- Spannungstensor, 17
- Spezifische Wärme
 - Antiferromagnet, 60
 - Elektronen, 39
 - Magnonen, 57
 - Phononen, 24
- Spiegelung, 8
- Spin-Bahn-Kopplung, 47
- Spinwellen, 55
 - antiferromagnetische, 58
- Starke-Bindungs-Näherung, 42
- Streuamplitude, 9
- Streuquerschnitt, 9
- Streuung
 - elastische, 9, 29
 - inkohärente, 30
- Streuvektor, 9
- Streuwelle, 27
- Teilchenzahl-Operator
 - Phononen, 23
- Tight-binding Näherung, 42
- Translationen, 7
- Translations-Invarianz, 12
- Translations-Operator, 40
- Vernichtungs-Operatoren
 - Phononen, 23
- Verzerrungstensor, 16, 17
- Wannier-Funktionen, 44
- Wigner-Seitz-Zelle, 7
- Wirkungsquerschnitt
 - differentieller, 27
 - kohärenter, 29
- Zeitumkehr-Invarianz, 47
- Zustandsdichte
 - elektronische, 37
 - Phononen, 25
- Zyklotron-Bewegung, 53

15 Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren kennen wir bereits von den Phononen. Sie waren das Vorbild für die Photonen- Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren der Quantenelektrodynamik. Fast zur gleichen Zeit stellte sich heraus, dass man sie auch für Teilchen, die durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben werden, verwenden kann. Tatsächlich nimmt durch ihre Verwendung der Hamilton-Operator eine wesentlich übersichtliche Form an. Ihre Verwendung erlaubt über die Schrödinger-Gleichung hinaus auch Prozesse zu beschreiben, bei denen die Anzahl der Teilchen nicht erhalten ist.

Es sei angemerkt, dass die Operatoren, die wir hier betrachten, eine (nicht-kommutative) Algebra bilden. Es gelten also Kommutativ- und Assoziativ-gesetz der Addition, das Assoziativ-Gesetz der Multiplikation und das Distributiv-Gesetz.

15.a Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Fermionen

Wir wollen nun die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Fermionen einführen. Hierzu gehen wir aus von einem vollständigen Satz orthonormierter Einteilchenfunktionen $\phi_i(q)$, wobei wir der Einfachheit halber Orts- und Spinfreiheitsgrad zu einer Variablen $q = (\mathbf{r}, s)$ zusammengefasst haben. Statt einer Orts- und Spinbasis kann man auch von einer anderen ausgehen. Tatsächlich wird die Basis, in der wir schließlich arbeiten, aus den Zuständen der Basis, die wir mit i gekennzeichnet haben, aufgebaut. Wir können nun die Slaterdeterminante aus N Teilchen schreiben als

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{i_1}(q_1) & \phi_{i_1}(q_2) & \dots & \phi_{i_1}(q_N) \\ \phi_{i_2}(q_1) & \phi_{i_2}(q_2) & \dots & \phi_{i_2}(q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_{i_N}(q_1) & \phi_{i_N}(q_2) & \dots & \phi_{i_N}(q_N) \end{vmatrix}, \quad (15.1)$$

genauer $\langle q_1, q_2, \dots, q_N | i_1, i_2, \dots, i_N \rangle = |\dots|$. (Der Faktor $1/\sqrt{N!}$ verschwindet, wenn wir für die Definition von $|q_1, q_2, \dots, q_N\rangle$ die gleiche Konvention verwenden). Vertauschen wir die Zeilen der Nummern m und n , so ändert sich das Vorzeichen. Die Wellenfunktion ist antisymmetrisch

$$|i_1 \dots i_m \dots i_n \dots i_N\rangle = -|i_1 \dots i_n \dots i_m \dots i_N\rangle. \quad (15.2)$$

Im Folgenden benötigen wir noch eine Formel zur Bestimmung des Überlapps

$$\langle j_1, j_2 \dots j_N | i_1, i_2 \dots i_N \rangle = \frac{1}{N!} \int dq_1 dq_2 \dots dq_N \det_{k,l}(\phi_{j_k}^*(q_l)) \det_{k,l}(\phi_{i_k}(q_l)). \quad (15.3)$$

Hierzu wollen wir beispielsweise zunächst die $\phi_{j_1}^*$ -Integrale durchführen. Diese Funktion tritt für alle q_1, \dots, q_N auf. Wollen wir gerade über $\phi_{j_1}^*(q_l)$ integrieren, so können wir die Spalte l mit der Spalte 1 in beiden Determinanten vertauschen und dann die Integrations-Variable q_1 mit q_l vertauschen. Das ergibt N gleiche Beiträge und es bleibt

$$\langle j_1, j_2 \dots j_N | i_1, i_2 \dots i_N \rangle = \frac{1}{(N-1)!} \int dq_1 dq_2 \dots dq_N \phi_{j_1}^*(q_1) \det_{k>1, l>1}(\phi_{j_k}^*(q_l)) \det_{k,l}(\phi_{i_k}(q_l)). \quad (15.4)$$

Wir führen jetzt die Integration über q_1 durch und erhalten

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_2 \dots j_N | i_1, i_2 \dots i_N \rangle &= \sum_m \delta_{j_1, i_m} \frac{(-)^{m-1}}{(N-1)!} \int dq_2 \dots dq_N \det_{k>1, l>1}(\phi_{j_k}^*(q_l)) \det_{k \neq m, l>1}(\phi_{i_k}(q_l)) \\ &= \sum_m \delta_{j_1, i_m} (-)^{m-1} \langle j_2 \dots j_N | i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N \rangle. \end{aligned} \quad (15.5)$$

Diese Gleichung kann iteriert werden und ergibt schließlich

$$\langle j_1, j_2 \dots j_N | i_1, i_2 \dots i_N \rangle = \det_{m,n}(\delta_{j_m, i_n}). \quad (15.6)$$

Wir bemerken, dass Zustände unterschiedlicher Teilchenzahl als orthogonal auf einander angesehen werden

$$\langle j_1, j_2 \dots j_M | i_1, i_2 \dots i_N \rangle = 0 \text{ für } M \neq N. \quad (15.7)$$

Die Rekursionsformel (15.5) bleibt (ohne den Zwischenschritt mit der q -Integration) gültig für Zustände unterschiedlicher Teilchenzahl. Für $N \neq M$ steht eben links und rechts 0

$$\langle j_1, j_2 \dots j_M | i_1, i_2 \dots i_N \rangle = \sum_m \delta_{j_1, i_m} (-)^{m-1} \langle j_2 \dots j_M | i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N \rangle. \quad (15.8)$$

Wir definieren nun den Erzeugungs-Operator c_i^\dagger durch seine Wirkung auf einen beliebigen Zustand

$$c_i^\dagger |i_1 \dots i_N \rangle = |i, i_1 \dots i_N \rangle. \quad (15.9)$$

Er fügt also dem N -Teilchenzustand ein weiteres Teilchen im Zustand i hinzu. Ist dieser Zustand bereits im N -Teilchenzustand besetzt, so ist das Ergebnis 0. Ein Zustand kann nicht zweimal besetzt werden. Bei Anwendung zweier Erzeugungs-Operatoren folgt

$$c_i^\dagger c_j^\dagger |i_1 \dots i_N \rangle = |i, j, i_1 \dots i_N \rangle = -|j, i, i_1 \dots i_N \rangle = -c_j^\dagger c_i^\dagger |i_1 \dots i_N \rangle. \quad (15.10)$$

Da dies bei Anwendung auf beliebige Zustände gilt, folgt generell für die Operatoren

$$c_i^\dagger c_j^\dagger = -c_j^\dagger c_i^\dagger, \quad (15.11)$$

das heißt, die Erzeugungs-Operatoren antikommutieren, was man auch

$$[c_i^\dagger, c_j^\dagger]_+ = c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger = 0 \quad (15.12)$$

schreibt. Wir kennzeichnen hier den Antikommutator mit $[\dots]_+$. Auch die Bezeichnung $\{\dots\}$ ist üblich.

Als nächstes führen wir Vernichtungs-Operatoren als hermitesch adjungierte Operatoren zu c^\dagger ein

$$\begin{aligned} \langle j_1 \dots j_M | c_i | i_1 \dots i_N \rangle &= \langle i_1 \dots i_N | c_i^\dagger | j_1 \dots j_M \rangle^* = \langle i_1 \dots i_N | i, j_1 \dots j_M \rangle^* = \langle i, j_1 \dots j_M | i_1 \dots i_N \rangle \\ &= \begin{cases} \sum_m (-)^{m-1} \delta_{i, i_m} \langle j_1 \dots j_M | i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N \rangle & N = M + 1 \\ 0 & N \neq M + 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (15.13)$$

Damit folgt dann, dass c_i ein Teilchen mit der Quantenzahl i vernichtet,

$$c_i |i_1 \dots i_N \rangle = \sum_m (-)^{m-1} \delta_{i, i_m} |i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N \rangle, \quad (15.14)$$

$$c_i |\text{vak}\rangle = 0. \quad (15.15)$$

Dabei ist $|\text{vak}\rangle$ der Vakuum-Zustand, also der Zustand ohne Teilchen. Wir finden weiter

$$\langle a | c_i c_j | b \rangle = \langle b | c_j^\dagger c_i^\dagger | a \rangle^* = -\langle b | c_i^\dagger c_j^\dagger | a \rangle^* = -\langle a | c_j c_i | b \rangle. \quad (15.16)$$

Daher antikommutieren auch c_i und c_j ,

$$c_i c_j = -c_j c_i \text{ oder } [c_i, c_j]_+ = c_i c_j + c_j c_i = 0. \quad (15.17)$$

Wir werten noch $[c_i^\dagger, c_j]_+ = c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger$ aus

$$c_i^\dagger c_j |i_1 \dots i_N \rangle = \sum_m (-)^{m-1} \delta_{j, i_m} |i i_1 \dots i_{m-1} i_{m+1} \dots i_N \rangle, \quad (15.18)$$

$$c_j c_i^\dagger |i_1 \dots i_N \rangle = c_j |i, i_1 \dots i_N \rangle = \delta_{i, j} |i_1 \dots i_N \rangle + \sum_m (-)^m \delta_{j, i_m} |i i_1 \dots i_{m-1} i_{m+1} \dots i_N \rangle, \quad (15.19)$$

$$(c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger) |i_1 \dots i_N \rangle = \delta_{i, j} |i_1 \dots i_N \rangle. \quad (15.20)$$

Damit ergibt sich für den Antikommutator

$$[c_j, c_i^\dagger]_+ = c_j c_i^\dagger + c_i^\dagger c_j = \delta_{j,i}. \quad (15.21)$$

Häufig arbeitet man mit orthonormierten Zuständen. Dies ist aber nicht zwingend. Falls die Zustände nicht orthonormiert sind, folgt

$$\langle \text{vak} | [c_j, c_i^\dagger]_+ | \text{vak} \rangle = \langle j | i \rangle, \quad (15.22)$$

zum Beispiel mit Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren im Orts-Raum

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}) | \text{vak} \rangle = | \mathbf{r} \rangle, \quad [\psi(\mathbf{r}'), \psi^\dagger(\mathbf{r})]_+ = \delta^3(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (15.23)$$

Allgemein ist dann in den obigen Formeln $\delta_{j,i}$ durch $\langle j | i \rangle$ zu ersetzen. Es gelten weiterhin die Antikommutatoren (15.12 und 15.17).

15.b Einteilchen-Operatoren

Wir betrachten nochmal Gleichung (15.18). Vertauschen wir der Reihe nach i mit i_1, \dots, i_m , so finden wir

$$c_i^\dagger c_j | i_1 \dots i_N \rangle = \sum_m \delta_{j, i_m} | i_1 \dots i_{m-1}, i, i_{m+1} \dots i_N \rangle. \quad (15.24)$$

Falls sich also j unter den Quantenzahlen i_m befindet, so wird es durch i ersetzt. Wir betrachten nun den Teilchenzahl-Operator. Er lautet

$$\mathcal{N} = \sum_i c_i^\dagger c_i, \quad (15.25)$$

denn aus

$$c_i^\dagger c_i | i_1 \dots i_N \rangle = (\delta_{i, i_1} + \dots \delta_{i, i_N}) | i_1 \dots i_N \rangle \quad (15.26)$$

folgt nach Summation über i

$$\mathcal{N} | i_1 \dots i_N \rangle = N | i_1 \dots i_N \rangle. \quad (15.27)$$

Die Anwendung des Operators \mathcal{N} multipliziert also den N -Teilchen-Zustand mit N .

Wir betrachten nun den allgemeinen Einteilchen-Operator \mathcal{T} . Er wirkt im Ortsraum im Allgemeinen als Integral-Kern auf die Wellenfunktion

$$\mathcal{T} | \Phi \rangle \hat{=} \int d^3 r' t(r_1, r') \Phi(r', r_2 \dots r_N) + \int d^3 r' t(r_2, r') \Phi(r_1, r' \dots r_N) + \dots + \int d^3 r' t(r_N, r') \Phi(r_1, r_2 \dots r'). \quad (15.28)$$

Mit der Transformation auf die Basis der i

$$t(r, r') = \sum_{i,j} t_{i,j} \phi_i(r) \phi_j^*(r') \iff t_{i,j} = \int d^3 r d^3 r' \phi_i^*(\mathbf{r}) t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}') \quad (15.29)$$

folgt zunächst für den Einteilchen-Zustand

$$\mathcal{T} | i_1 \rangle \hat{=} \sum_{i,j} t_{i,j} \phi_i(\mathbf{r}_1) \underbrace{\int d^3 r' \phi_j^*(\mathbf{r}') \phi_{i_1}(\mathbf{r}')}_{\delta_{j, i_1}} = \sum_i t_{i, i_1} \phi_i(\mathbf{r}_1) \quad (15.30)$$

und

$$\mathcal{T} | i_1 \rangle = \sum_i t_{i, i_1} | i \rangle. \quad (15.31)$$

Für den N -Teilchen-Zustand gilt dann

$$\mathcal{T} | i_1 \dots i_N \rangle = \sum_i t_{i, i_1} | i, i_2 \dots i_N \rangle + \sum_i t_{i, i_2} | i_1, i, i_3 \dots i_N \rangle + \dots, \quad (15.32)$$

da der Operator auf jeden Einteilchenzustand wirkt, die anderen aber ungeändert lässt. Daraus schließen wir

$$\mathcal{T} = \sum_{i,j} t_{i,j} c_i^\dagger c_j, \quad (15.33)$$

denn der Einteilchen-Zustand j wird stets durch $\sum_i t_{i,j} i$ ersetzt.

Beispiele: Einteilchenpotential

$$t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}) \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \iff t_{i,j} = \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}). \quad (15.34)$$

Kinetische Energie:

$$t_{i,j} = \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\right) \phi_j(\mathbf{r}). \quad (15.35)$$

Verwenden wir speziell ebene Wellen

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_P}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (15.36)$$

so folgt

$$\mathcal{T} = \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k},s}, \quad (15.37)$$

wobei jetzt die Spin-Variable s (genauer die z -Komponente) wieder hinzugefügt wurde. Dies ist die kinetische Energie in der Impuls-Darstellung.

15.c Zwei-Teilchen-Operatoren

Die Coulomb-Wechselwirkung ist wie viele anderen Wechselwirkungen ein Zwei-Teilchen-Operator. Wir betrachten daher jetzt seine Darstellung durch Erzeuger und Vernichter. Die Wirkung eines Zwei-Teilchen-Operators \mathcal{V} auf einen N -Teilchen-Zustand ist gegeben durch einen Integralkern V mit der Wirkung

$$\begin{aligned} \langle r_1, r_2 \dots r_N | \mathcal{V} | \Phi \rangle &= \int d^3r' d^3r'' V(r_1, r_2, r', r'') \Phi(r', r'', r_3 \dots r_N) + \dots \\ &= \sum_{i < j} \int d^3r' d^3r'' V(r_i, r_j, r', r'') \Phi(\dots r_{i-1}, r', r_{i+1} \dots r_{j-1}, r'', r_{j+1} \dots) \end{aligned} \quad (15.38)$$

Wir stellen nun V in der Basis der i dar

$$V(r_1, r_2, r', r'') = \sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} \phi_i(r_1) \phi_j(r_2) \phi_{i'}^*(r') \phi_{j'}^*(r''), \quad (15.39)$$

dann folgt

$$\begin{aligned} \langle r_1, r_2 | \mathcal{V} | i_1, i_2 \rangle &= \int d^3r' d^3r'' \sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} \phi_i(r_1) \phi_j(r_2) \phi_{i'}^*(r') \phi_{j'}^*(r'') \\ &\times \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{i_1}(r') \phi_{i_2}(r'') - \phi_{i_2}(r') \phi_{i_1}(r'')) \\ &= \sum_{i,j} (V_{i,j,i_1,i_2} - V_{i,j,i_2,i_1}) \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_i(r_1) \phi_j(r_2) = \sum_{ij} V_{i,j,i_1,i_2} \langle r_1, r_2 | i, j \rangle. \end{aligned} \quad (15.40)$$

Das heißt für den Zwei-Teilchen-Zustand gilt

$$\mathcal{V} | i_1, i_2 \rangle = \sum_{i,j} V_{i,j,i_1,i_2} | i, j \rangle. \quad (15.41)$$

Dementsprechend ergibt die Wirkung von \mathcal{V} auf den N -Teilchenzustand eine Überlagerung der Anwendung der Zweiteilchen-Wechselwirkung auf alle Paare, wobei die übrigen Zustände unverändert bleiben,

$$\mathcal{V}|i_1 \dots i_N\rangle = \sum_{m < n} \sum_{i, j} V_{i, j, i_m, i_n} |\dots i_m \rightarrow i \dots i_n \rightarrow j \dots\rangle. \quad (15.42)$$

Diese Operation wird durch Operatoren $c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}$ bewirkt. Zum Nachweis berechnen wir mittels (15.18)

$$\begin{aligned} c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'} |i_1 \dots i_N\rangle &= c_i^\dagger c_{i'} \sum_n \delta_{j', i_n} |\dots i_n \rightarrow j \dots\rangle \\ &= \delta_{j, i'} \sum_n \delta_{j', i_n} |\dots i_n \rightarrow i \dots\rangle \\ &+ \sum_{m \neq n} \delta_{j', i_n} \delta_{i', i_m} |\dots i_m \rightarrow i \dots i_n \rightarrow j \dots\rangle. \end{aligned} \quad (15.43)$$

Der Term in der zweiten Zeile kann geschrieben werden

$$\delta_{j, i'} \sum_n \delta_{j', i_n} |\dots i_n \rightarrow i \dots\rangle = [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_{j'}^\dagger |i_1 \dots i_N\rangle. \quad (15.44)$$

Bringen wir ihn auf die linke Seite der Gleichung, so bleibt dort vor dem Zustand $|i_1 \dots i_N\rangle$ der Operator

$$c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'} - [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_{j'}^\dagger = c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'} - c_i^\dagger [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_{j'} = -c_i^\dagger c_j^\dagger c_{i'} c_{j'} = c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'} \quad (15.45)$$

und damit

$$\begin{aligned} &\sum_{i, j, i', j'} V_{i, j, i', j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'} |i_1 \dots i_N\rangle \\ &= \sum_{m < n} \sum_{i, j} V_{i, j, i_m, i_n} |\dots i_m \rightarrow i \dots i_n \rightarrow j \dots\rangle + \sum_{n < m} \sum_{i, j} V_{i, j, i_m, i_n} |\dots i_n \rightarrow j \dots i_m \rightarrow i \dots\rangle, \end{aligned} \quad (15.46)$$

wobei wir explizit die beiden möglichen Reihenfolgen von m und n berücksichtigt haben. Wir können nun in der zweiten Summe m mit n und i mit j vertauschen. Dann ist die letzte Summe ebenfalls eine mit $m < n$, das ket ist das gleiche wie in der vorhergehenden Summe und aus V_{i, j, i_m, i_n} wird durch diese Vertauschung V_{j, i, i_m, i_n} . Generell ist aber wegen der Gleichheit (Ununterscheidbarkeit) der Teilchen $V_{i, j, i_m, i_n} = V_{j, i, i_m, i_n}$. Daher stimmen die letzte und die vorletzte Summe überein und wir haben

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{i, j, i', j'} V_{i, j, i', j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}. \quad (15.47)$$

Beachten Sie den Faktor $1/2$ und die Reihenfolge der Indices. Der Faktor $1/2$ rührt daher, dass sowohl der Term $V_{i, j, i', j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}$ als auch der Term $V_{j, i, j', i'} c_j^\dagger c_i^\dagger c_{i'} c_{j'}$ das ket $|i' j'\rangle$ in das ket $|ij\rangle$ überführt. Diese Doppelzählung wird durch den Faktor $1/2$ korrigiert.

15.d Lokales Potential

Als Beispiel betrachten wir ein lokales Potential

$$V(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \mathbf{r}'_1, s'_1, \mathbf{r}'_2, s'_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta^3(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) \delta_{s_1, s'_1} \delta_{s_2, s'_2}. \quad (15.48)$$

Stellen wir es in der Impuls-Darstellung dar, so finden wir

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}_1, s_1, \mathbf{k}_2, s_2, \mathbf{k}'_1, s'_1, \mathbf{k}'_2, s'_2} &= \delta_{s_1, s'_1} \delta_{s_2, s'_2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \phi_{\mathbf{k}_1}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{\mathbf{k}_2}^*(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \phi_{\mathbf{k}'_2}(\mathbf{r}_2) \phi_{\mathbf{k}'_1}(\mathbf{r}_1) \\ &= \delta_{s_1, s'_1} \delta_{s_2, s'_2} \frac{1}{V_P^2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 e^{i(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}_1 + i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}_2} V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (15.49)$$

Die Exponential-Funktion können wir auch

$$e^{i(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + i(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}_2} \quad (15.50)$$

schreiben. Führen wir nun statt \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 als unabhängige Variable $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ und \mathbf{r}_2 ein, so ergibt die Integration über \mathbf{r}_2 gerade $V_P \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2}$. In der δ -Funktion steckt die Impuls-Erhaltung, der Impuls $\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$ der beiden Teilchen wird neu in $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ aufgeteilt. Dabei bezeichnet man

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1 = -(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2) \quad (15.51)$$

als den Impuls-Übertrag. Das Matrix-Element ergibt sich dann zu

$$V_{\mathbf{k}_1, s_1, \mathbf{k}_2, s_2, \mathbf{k}'_1, s'_1, \mathbf{k}'_2, s'_2} = \delta_{s_1, s'_1} \delta_{s_2, s'_2} \frac{1}{V_P} V(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2}, \quad V(\mathbf{q}) = \int d^3 r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}). \quad (15.52)$$

$V(\mathbf{q})$ ist also die Fourier-Transformierte des lokalen Potentials, das sich

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2V_P} \sum_{k_1, k_2, q, s_1, s_2} V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}_1, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, s_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}. \quad (15.53)$$

schreiben lässt. Speziell für die Berechnung für das Coulomb-Potential gehen wir aus von einem abgeschirmten Coulomb-Potential (Yukawa-Potential) $V(r) = \frac{e^2}{r} e^{-\lambda r}$ und finden

$$\begin{aligned} V(q) &= e^2 \int d^3 r \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \lambda r}}{r} = e^2 \int d\Omega \int_0^\infty r dr e^{i(q \cos \theta - \lambda)r} = e^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d \cos \theta \frac{1}{(\lambda - iq \cos \theta)^2} \\ &= 2\pi e^2 \frac{1}{iq} \left(\frac{1}{\lambda - iq} - \frac{1}{\lambda + iq} \right) = \frac{4\pi e^2}{\lambda^2 + q^2}, \end{aligned} \quad (15.54)$$

was für $\lambda = 0$ den Limes des Coulomb-Potentials liefert.

15.e Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Bosonen

Wir werden uns hier vorwiegend mit Elektronen und Phononen befassen. Für letztere kennen wir bereits die Erzeuger und Vernichter. Es stellt sich heraus, dass für bosonische Teilchen die gleichen Beziehungen für Erzeuger und Vernichter gelten wie für Phononen. Wir wollen diese bosonischen Erzeuger und Vernichter hier in Analogie zu denen für Fermionen einführen. Zunächst möchte ich die fermionische Determinante (15.1) in etwas anderer Form schreiben

$$\begin{aligned} |i_1, i_2 \dots i_N\rangle &\hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-)^P \phi_{i_1}(q_{P1}) \phi_{i_2}(q_{P2}) \dots \phi_{i_N}(q_{PN}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-)^P \phi_{i_{P1}}(q_1) \phi_{i_{P2}}(q_2) \dots \phi_{i_{PN}}(q_N). \end{aligned} \quad (15.55)$$

Dabei läuft P über alle $N!$ Permutationen der Zahlen $1, 2, \dots, N$. $(-)^P$ ist $+1$ oder -1 je nachdem, ob P eine gerade oder ungerade Permutation ist. Es hängt also davon ab, ob man die Permutation durch eine gerade oder ungerade Anzahl von Transpositionen erhält. Eine Transposition ist der Austausch von zwei Zahlen der Zahlen 1 bis N . Die aus $(1, 2, 3)$ entstehenden Permutationen $(1, 2, 3)$, $(2, 3, 1)$ und $(3, 1, 2)$ sind gerade, während $(1, 3, 2)$, $(2, 1, 3)$ und $(3, 2, 1)$ ungerade sind. Unter P_i verstehen wir die Zahl, die durch die jeweilige Permutation aus i entsteht. So ergibt die Permutation $(1, 2, 3) \rightarrow (2, 1, 3)$ zum Beispiel $P_1 = 2, P_2 = 1, P_3 = 3$. Für Bosonen führen wir nun ein

$$\begin{aligned} |i_1, i_2 \dots i_N\rangle &\hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \phi_{i_1}(q_{P1}) \phi_{i_2}(q_{P2}) \dots \phi_{i_N}(q_{PN}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \phi_{i_{P1}}(q_1) \phi_{i_{P2}}(q_2) \dots \phi_{i_{PN}}(q_N). \end{aligned} \quad (15.56)$$

Die Vorzeichen-Faktoren $(-)^P$ fallen also weg, da es sich um Bosonen handelt. Die Wellenfunktionen sind symmetrisch

$$|i_1 \dots i_m \dots i_n \dots i_N\rangle = |i_1 \dots i_n \dots i_m \dots i_N\rangle \quad (15.57)$$

Für den Überlapp erhält man eine ähnliche Rekursions-Formel

$$\langle j_1, j_2 \dots j_M | i_1, i_2 \dots i_N \rangle = \sum_m \delta_{j_1, i_m} \langle j_2 \dots j_M | i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N \rangle. \quad (15.58)$$

Die bosonischen Erzeuger b_i^\dagger werden nun durch

$$b_i^\dagger |i_1 \dots i_N\rangle = |i, i_1 \dots i_N\rangle \quad (15.59)$$

definiert. Jetzt gilt allerdings

$$b_i^\dagger b_j^\dagger |i_1 \dots i_N\rangle = |i, j, i_1 \dots i_N\rangle = |j, i, i_1 \dots i_N\rangle = b_j^\dagger b_i^\dagger |i_1 \dots i_N\rangle, \quad (15.60)$$

also kommutieren die Erzeuger

$$[b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0. \quad (15.61)$$

Für den Vernichtungs-Operator definiert als hermitesch Adjungiertes des Erzeugungs-Operators findet man dann

$$\begin{aligned} \langle j_1 \dots j_M | b_i | i_1 \dots i_N \rangle &= \langle i_1 \dots i_N | b_i^\dagger | j_1 \dots j_M \rangle^* = \langle i_1 \dots i_N | i, j_1 \dots j_M \rangle^* = \langle i, j_1 \dots j_M | i_1 \dots i_N \rangle \\ &= \sum_m \delta_{i, i_m} \langle j_1 \dots j_M | i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N \rangle. \end{aligned} \quad (15.62)$$

und

$$b_i |i_1 \dots i_N\rangle = \sum_m \delta_{i, i_m} |i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N\rangle, \quad (15.63)$$

$$b_i |\text{vak}\rangle = 0. \quad (15.64)$$

Weiter folgt

$$\langle a | b_i b_j | b \rangle = \langle b | b_j^\dagger b_i^\dagger | a \rangle^* = \langle b | b_i^\dagger b_j^\dagger | a \rangle^* = \langle a | b_j b_i | b \rangle, \quad (15.65)$$

also

$$[b_i, b_j] = b_i b_j - b_j b_i = 0. \quad (15.66)$$

Schließlich betrachten wir noch den Kommutator zwischen Vernichter und Erzeuger

$$b_i^\dagger b_j |i_1 \dots i_N\rangle = \sum_m \delta_{j, i_m} |i, i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N\rangle, \quad (15.67)$$

$$b_j b_i^\dagger |i_1 \dots i_N\rangle = b_j |i, i_1 \dots i_N\rangle = \delta_{j, i} |i_1 \dots i_N\rangle + \sum_m \delta_{j, i_m} |i, i_1 \dots i_{m-1}, i_{m+1} \dots i_N\rangle, \quad (15.68)$$

$$(b_j b_i^\dagger - b_i^\dagger b_j) |i_1 \dots i_N\rangle = \delta_{j, i} |i_1 \dots i_N\rangle. \quad (15.69)$$

Das ergibt für den Kommutator

$$[b_j, b_i^\dagger] = \delta_{j, i}. \quad (15.70)$$

Iteriert man den Ausdruck für den Überlapp (15.58), so findet man

$$\langle j_1 \dots j_N | i_1 \dots i_N \rangle = \sum_P \delta_{j_1, i_{P_1}} \delta_{j_2, i_{P_2}} \dots \delta_{j_N, i_{P_N}}. \quad (15.71)$$

Teilchenzahl-Darstellung: Das Matrix-Element ist nur von 0 verschieden, wenn beide N -Teilchen-Zustände alle Einteilchen-Zustände in gleicher Anzahl besetzt haben. Auf die Reihenfolge kommt es nicht an. Man kann also angeben, wie oft jeder Zustand i besetzt ist. Bezeichnet man diese

Anzahl mit n_i , dann stellt sich heraus, dass der Überlapp das Produkt aller $n_i!$ ist, da es jeweils $n_i!$ Permutationen gibt, für die die Kronecker-Delta gleich 1 werden,

$$\langle i_1 \dots i_N | i_1 \dots i_N \rangle = \prod_i n_i!, \quad n_i = \sum_{m=1}^N \delta_{i, i_m}. \quad (15.72)$$

Das Produkt läuft dabei über alle Einteilchen-Zustände i des Hilbert-Raums. Verwendet man statt der obigen Notation, in der wir die N Einteilchen-Zustände aufführen, die Besetzungen, so führt man die normierten Zustände, die durch alle Besetzungszahlen n_i charakterisiert sind, ein

$$|\dots n_i \dots\rangle = \prod_i \frac{(b_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |\text{vak}\rangle. \quad (15.73)$$

Man erkennt, dass für diese die bereits von den Phononen bekannten Beziehungen

$$b_i^\dagger |\dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\dots n_i + 1 \dots\rangle, \quad b_i |\dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i} |\dots n_i - 1 \dots\rangle \quad (15.74)$$

gelten. Für Fermionen kann man diese Teilchenzahl-Darstellung auch verwenden, allerdings muss man die Reihenfolge der Zustände wegen der Vorzeichen genau definieren. Die Faktoren $n_i!$ spielen dann keine Rolle, da dann nur $n_i = 0$ und $n_i = 1$ auftritt und $0! = 1! = 1$, allerdings ist dann in (15.74) $\sqrt{n_i + 1}$ durch $\sqrt{1 - n_i}$ zu ersetzen.

16 Hartree-Fock-Näherung, RPA (Random-Phase-Approximation), Plasmonen

Wir suchen einen Operator A , der die Eigenschaft

$$[H, A] = \epsilon A \quad (16.1)$$

hat. Ein solcher Operator beschreibt eine Anregung der Energie ϵ , denn ist $|\Phi\rangle$ ein Zustand der Energie E , d.h. $H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$, dann folgt

$$HA|\Phi\rangle = [H, A]|\Phi\rangle + AH|\Phi\rangle = \epsilon A|\Phi\rangle + AE|\Phi\rangle = (E + \epsilon)|\Phi\rangle. \quad (16.2)$$

Die Energie des Zustandes $A|\Phi\rangle$ ist also um ϵ höher als die des Zustandes $|\Phi\rangle$. Allerdings ist es nur in idealen Fällen möglich, solche Operatoren exakt zu finden. Doch kann man näherungsweise solche Operatoren bestimmen.

16.a Einteilchen-Anregungen in Hartree-Fock-Näherung

Der Operator $c_{\mathbf{k}s}^\dagger$ beschreibt die Hinzufügung eines Teilchens mit Impuls $\hbar\mathbf{k}$ und Spin s . Wir berechnen

$$[H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] = \sum_{\mathbf{k}_1, s_1} \epsilon_{\mathbf{k}_1} [c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1, s_1}, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] + \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{k}_2 s_2 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} [c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 s_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}, c_{\mathbf{k}s}^\dagger]. \quad (16.3)$$

Der erste Kommutator ergibt

$$[c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1, s_1}, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] = c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger [c_{\mathbf{k}_1, s_1}, c_{\mathbf{k}s}^\dagger]_+ - [c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger, c_{\mathbf{k}s}^\dagger]_+ c_{\mathbf{k}_1, s_1} = c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}} \delta_{s_1, s} \quad (16.4)$$

und der zweite Kommutator

$$\begin{aligned} [c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 s_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] &= c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 s_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2} [c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}, c_{\mathbf{k}s}^\dagger]_+ \\ &\quad - c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 s_2}^\dagger [c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}, c_{\mathbf{k}s}^\dagger]_+ c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1} \\ &= c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 s_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}} \delta_{s_1, s} \\ &\quad - c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 s_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1} \delta_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \mathbf{k}} \delta_{s_2, s}. \end{aligned} \quad (16.5)$$

Damit folgt dann

$$\begin{aligned} [H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] &= \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger + \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}_2 s_2 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k} - \mathbf{q}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 s_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2} - \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1} \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger + \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}. \end{aligned} \quad (16.6)$$

Dabei wurde in der ersten Summe \mathbf{q} durch $-\mathbf{q}$ und \mathbf{k}_2 durch \mathbf{k}_1 ersetzt und in der zweiten Summe wurden die beiden Erzeugungs-Operatoren miteinander vertauscht. Man beachte, dass $V_{-\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}}$ wegen der Ununterscheidbarkeit der Elektronen gilt.

Während der erste Term wieder der Erzeugungs-Operator ist, mit dem wir H kommutiert haben, gilt das nicht für den zweiten Term. Wir müssen für diesen eine Näherung vornehmen. Dazu überlegen wir uns, dass einige Einteilchen-Zustände bereits besetzt sind. Das heißt, dass für \mathbf{k}_1 unterhalb der Fermikante die Anwendung des Operators $c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}$ den Faktor 1 ergibt, während er für \mathbf{k} oberhalb der Fermikante den Faktor 0 ergibt. Man ersetzt aus diesem Grund

$$c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1} \approx c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^\dagger \langle c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1} \rangle - c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger \langle c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1} \rangle = \delta_{\mathbf{q}, 0} n_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}s}^\dagger - \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \delta_{s, s_1} c_{\mathbf{k}s}^\dagger n_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}. \quad (16.7)$$

Damit erhalten wir

$$[H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] = \left(\underbrace{\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} V_0 n_{\mathbf{k}_1 s_1}}_{\text{Hartree-Term}} - \underbrace{\frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}}_{\text{Fock-Term}} \right) c_{\mathbf{k}s}^\dagger = \epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger. \quad (16.8)$$

Der Hartree-Term $V_0 N/V_P$ wird für das Elektronengas durch die Wechselwirkung mit der positiven Ionenladung kompensiert. Analog findet man

$$[H, c_{\mathbf{k}s}] = [c_{\mathbf{k}s}^\dagger, H]^\dagger = -[H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger]^\dagger \approx -\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} c_{\mathbf{k}s}. \quad (16.9)$$

Die Anwendung von $c_{\mathbf{k}s}$ erniedrigt die Energie des Zustandes um $\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}}$.

Noch einige Anmerkungen:

a) Diese Rechnung ist nicht auf den Grundzustand beschränkt. Für endliche Temperaturen hat man $n_{\mathbf{k}s}$ durch den thermischen Erwartungswert zu ersetzen.

b) Wir sind hier von einem translationsinvarianten Hamilton-Operator ausgegangen. Haben wir etwa ein gitterperiodisches Potential und rechnen mit ebenen Wellen, so wird das periodische Einteilchen-Potential zwischen Elektronen und Ionen auf der rechten Seite der Gleichung (16.8) auch Beiträge mit Operatoren $c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}s}^\dagger$ erzeugen, wobei \mathbf{G} reziproke Gittervektoren sind. Dann muss erst ähnlich wie im Abschnitt (11.b) diagonalisiert werden, was auf die Blochzustände führt. Dabei ist zu beachten, dass dann die Besetzungen n selbst-konsistent bestimmt werden müssen. Das führt faktisch auf ein nicht-lineares Gleichungssystem.

16.b Normal-Ordnung

Wir haben oben die Ersetzung (16.7) vorgenommen. Es gibt ein systematisches Verfahren dafür, das als Normal-Ordnung bezeichnet wird. Im Detail findet es sich unter http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~wegner/Wick_Normal.ps. Hier nur einige Bemerkungen dazu. Die Normal-Ordnung wird durch Doppelpunkte gekennzeichnet. Dabei gilt

$$: 1 : = 1, \quad (16.10)$$

$$: \alpha A(c^\dagger, c) + \beta B(c^\dagger, c) : = \alpha : A(c^\dagger, c) : + \beta : B(c^\dagger, c) :, \quad (16.11)$$

$$c_k^\dagger : A : = : c_k^\dagger A : + \sum_l \langle c_k^\dagger c_l \rangle : [c_l^\dagger, A]_\pm :, \quad (16.12)$$

$$c_k : A : = : c_k A : + \sum_l \langle c_k c_l^\dagger \rangle : [c_l, A]_\pm :. \quad (16.13)$$

Sie gilt also für bestimmte Erwartungswerte $\langle c_k^\dagger c_l \rangle$, wobei auf Grund der Antikommutator-Beziehung dann natürlich $\langle c_k c_l^\dagger \rangle = \delta_{k,l} - \langle c_l^\dagger c_k \rangle$ gelten muss. Dabei ist $[\dots, A]_\pm$ als Kommutator auszuwerten für Monome in A mit einer geraden Anzahl von Faktoren c und c^\dagger , und als Anti-Kommutator für eine ungerade Anzahl derartiger Faktoren. Grob gesagt wird aus A ein Faktor c_l herausgezogen und in den Erwartungswert $\langle c_k^\dagger c_l \rangle$ hineingezogen, was auf $\langle c_k^\dagger c_l \rangle [c_l^\dagger, A]_\pm$ führt.

Zunächst finden wir

$$c_k^\dagger = : c_k^\dagger :, \quad c_k = : c_k : \quad (16.14)$$

Man muss sich nur vorstellen, man multipliziert c_k^\dagger oder c_k mit $1 = : 1 :$. Dann ergibt sich obiges Resultat, da c_l^\dagger und c_l mit der 1 kommutieren. Als nächstes betrachten wir

$$c_k^\dagger c_{k'} = c_k^\dagger : c_{k'} : = : c_k^\dagger c_{k'} : + \sum_l \langle c_k^\dagger c_l \rangle : [c_l^\dagger, c_{k'}]_\pm : = : c_k^\dagger c_{k'} : + \langle c_k^\dagger c_{k'} \rangle \quad (16.15)$$

Ähnlich finden wir

$$c_{k'} c_k^\dagger = : c_{k'} c_k^\dagger : + \langle c_{k'} c_k^\dagger \rangle. \quad (16.16)$$

Addiert man beide Ausdrücke, so findet man

$$: c_k^\dagger c_{k'} : + : c_{k'} c_k^\dagger : = 0. \quad (16.17)$$

Dies ist ein Beispiel für den allgemeinen Satz, dass man unter der Normal-Ordnung Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren miteinander vertauschen kann und dass sich dabei nur das Vorzeichen ändert. Eine δ -Funktion tritt dabei nicht auf. Diese steckt bereits in den abgespaltenen Erwartungs-Werten.

Der normalgeordnete Anteil $:c_k^\dagger c_{k'}:$ stellt die Fluktuation des Operators $c_k^\dagger c_{k'}$ um seinen Mittelwert dar.

Für den obigen Operator $c_{k+qs}^\dagger c_{k_1s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} c_{k+qs}^\dagger c_{k_1s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} &= c_{k+qs}^\dagger (:c_{k_1s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} : + \langle c_{k_1s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} \rangle) \\ &= :c_{k+qs}^\dagger c_{k_1s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} : - :c_{k_1s_1}^\dagger : \langle c_{k+qs}^\dagger c_{k_1+qs_1} \rangle + :c_{k+qs}^\dagger : \langle c_{k_1s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} \rangle. \end{aligned} \quad (16.18)$$

Wir haben also in der Hartree-Fock-Näherung den Fluktuations-Anteil $:c_{k+qs}^\dagger c_{k_1s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}:$ vernachlässigt.

Die normal geordneten Produkte haben noch eine weitere interessante Eigenschaft. Falls $H - \mu\mathcal{N}$ eine Linearkombination von Operatoren $c_k^\dagger c_l$ ist, dann ist der Erwartungswert im großkanonischen Ensemble beschrieben durch $e^{-\beta(H-\mu\mathcal{N})}$ für einen Operator $A =: \hat{A}:$ gegeben durch den konstanten Beitrag von \hat{A} .

16.c Teilchen-Loch-Anregungen in RPA

Der Operator der Teilchendichte lässt sich

$$\rho(r) = \sum_{i,j} c_i^\dagger c_j \langle i|\rho(r)|j \rangle = \sum_{i,j} c_i^\dagger c_j \phi_i^*(r) \phi_j(r) \quad (16.19)$$

ausdrücken. Verwenden wir als Basis ebene Wellen, so folgt

$$\rho(r) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k}',s} \frac{1}{V_P} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \quad (16.20)$$

und deren Fourier-Transformierte schreibt sich

$$\rho(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, s} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k}',s} \frac{1}{V_P} \int d^3r e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}, s} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}. \quad (16.21)$$

Für Operatoren dieses Typs wollen wir nun den Kommutator mit H bilden

$$\begin{aligned} [H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}] &= [H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + c_{\mathbf{k}s}^\dagger [H, c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}] \\ &= (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{k}_1s_1} V_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \\ &\quad - \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{k}_1s_1} V_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'+\mathbf{q}s}. \end{aligned} \quad (16.22)$$

Wir haben Terme der Form $c^\dagger c$ mit H kommutiert und neben Termen dieser Form auch solche vom Typ $c^\dagger c^2$ erhalten. Wir wenden daher erneut die Normalordnung an und finden

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} &= -\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} \delta_{s_1} :c_{\mathbf{k}_1s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : + \delta_{\mathbf{q}', 0} n_{\mathbf{k}_1s_1} :c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \\ &\quad - \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \delta_{s_1} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} :c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} : + \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} :c_{\mathbf{k}_1s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} : \\ &\quad + \text{const.} + :c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \end{aligned} \quad (16.23)$$

Die ersten beiden Beiträge tragen zur Hartree-Fock-Energie bei, die nächsten beiden sind neu und zeigen, dass zwischen Teilchen und Loch eine Wechselwirkung besteht. Die Konstante tritt nur für $\mathbf{q} = 0$ auf. Der letzte Beitrag ist der Fluktuations-Beitrag, den wir vernachlässigen. Ähnlich gehen wir mit dem letzten Term in (16.22) vor und erhalten schließlich

$$\begin{aligned} [H, :c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} :] &= (\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\text{HF}}) :c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \\ &\quad + \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}_1s_1} V_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} :c_{\mathbf{k}_1s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} : - \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} :c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'+\mathbf{q}s} : \end{aligned} \quad (16.24)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} n_{\mathbf{k}} : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'+s} : - \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} V_{-\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}} : c_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1} : \\
& = (\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\text{HF}}) : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \\
& + \frac{1}{V_P} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}) V_{\mathbf{q}} \underbrace{\sum_{\mathbf{k}_1 s_1} : c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} :}_{\rho(\mathbf{q})} - \frac{1}{V_P} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'+s} :
\end{aligned} \tag{16.25}$$

Die zweite Summe ist schwierig zu behandeln. Sie wird häufig vernachlässigt. Für kleine \mathbf{q} ist das beim Elektronengas gerechtfertigt, da $V_{\mathbf{q}}$ divergiert.

Wir setzen nun unseren Operator A als Überlagerung

$$A = \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \tag{16.26}$$

mit Amplituden a an. Dann folgt durch Einsetzen unter Vernachlässigung der zweiten Summe in (16.25)

$$[H, A] = \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\text{HF}}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + \frac{2V_{\mathbf{q}}}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}, \tag{16.27}$$

was mit

$$\hbar\omega \sum_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \tag{16.28}$$

übereinstimmen soll, wobei $\hbar\omega$ die Anregungsenergie ist. Daraus ergeben sich die Koeffizienten-Gleichungen für $c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}$

$$(\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\text{HF}} - \hbar\omega) a_{\mathbf{k}} + 2V_{\mathbf{q}} \underbrace{\frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) a_{\mathbf{k}'}}_C = 0. \tag{16.29}$$

Mit der zunächst unbekanntenen Konstanten C finden wir

$$a_{\mathbf{k}} = \frac{2V_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}}} C, \tag{16.30}$$

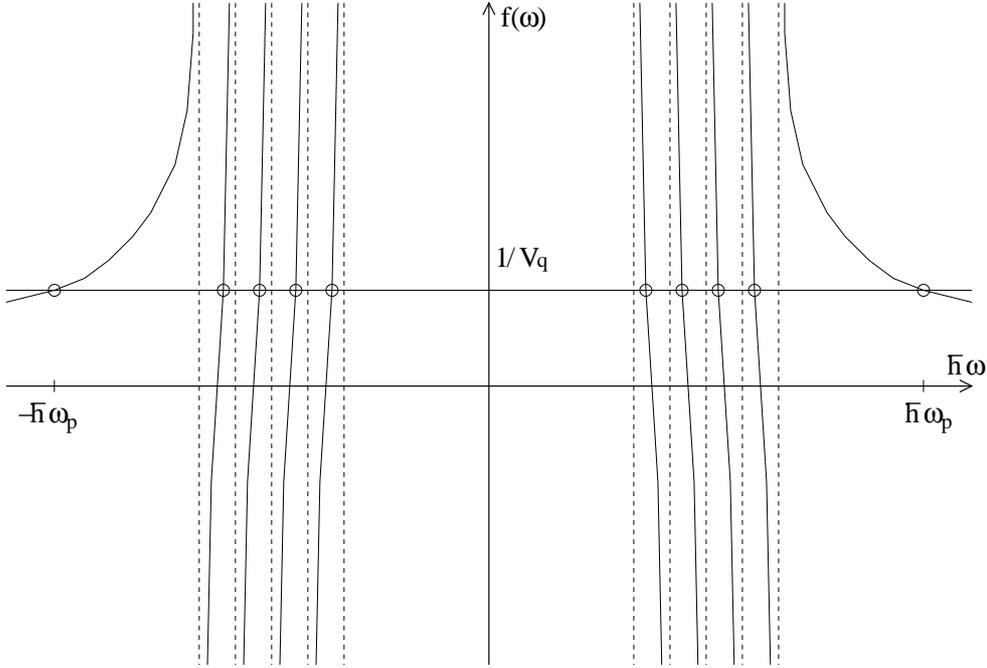
was eingesetzt in die Definition von C auf die Gleichung

$$C = \frac{2V_{\mathbf{q}}}{V_P} \sum_{\mathbf{k}'} \underbrace{\frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}}}}_C C \tag{16.31}$$

führt. Dies ist die Eigenwertgleichung für die Anregungsenergie $\hbar\omega$. Daraus folgt entweder $C = 0$, was ein von 0 verschiedenes $a_{\mathbf{k}}$ nur für $\hbar\omega = \epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\text{HF}}$ ergibt, oder $C \neq 0$, woraus dann folgt, dass die obige Klammer gleich 1 sein muss, d.h.

$$f(\omega) := \frac{2}{V_P} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}}} = \frac{1}{V_{\mathbf{q}}} \tag{16.32}$$

folgt.



Die Funktion $f(\omega)$ hat Pole bei $\hbar\omega = \epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}$ und zwar mit positivem (negativem) Residuum bei positivem (negativem) ω , da dort $\epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}$ und $n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}$ ebenfalls positiv (negativ) sein muss. Zwischen diesen Polen ist die Funktion monoton fallend (steigend). Es gibt also dort jeweils einen Eigenwert. Bei Temperatur $T = 0$ erstreckt sich der Bereich der Pole über ein endliches Intervall, da ein Impuls $\mathbf{k}' + \mathbf{q}$ außerhalb der Fermifläche, der andere \mathbf{k}' innerhalb liegen muss, oder umgekehrt. Das führt bei gegebenem \mathbf{q} auf eine maximale Energiedifferenz $\epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}$. Außerhalb kann aber $f(\omega)$ langsam auf $1/V_{\mathbf{q}}$ abfallen, so dass diese Lösung im Gegensatz zu den anderen weit von den Energiedifferenzen $\epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}$ entfernt liegt. Dies ist eine kollektive Lösung. Charakteristisch ist, dass $a_{\mathbf{k}}$ nur langsam variiert.

Diese kollektive Lösung betrachten wir etwas genauer: Für kleine q nehmen wir an, dass $\hbar\omega \gg \epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}$. Wir setzen noch $V_{\mathbf{q}}$ für das Coulomb-Potential (15.54) ein und entwickeln in Gleichung (16.32)

$$\begin{aligned} & \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{2}{V_{\mathbf{P}}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}}} \\ &= \frac{8\pi e^2}{V_{\mathbf{P}} q^2} \left(\frac{1}{\hbar\omega} \sum_{\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) + \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \sum_{\mathbf{k}'} (\epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}) (n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) + \dots \right) = 1 \quad (16.33) \end{aligned}$$

Nun ist $\sum_{\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) = 0$, da die Anzahl der Elektronen von der gleichen Anzahl abgezogen wird. Den nächsten Term formen wir für kleines q um

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}'} (\epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}) n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{k}'} (\epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}) n_{\mathbf{k}'} &= \sum_{\mathbf{k}'} (\epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}'}^{\text{HF}} + \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^{\text{HF}}) n_{\mathbf{k}'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} q_{\alpha} q_{\beta} \frac{d^2 \epsilon_{\mathbf{k}'}}{dk'_{\alpha} dk'_{\beta}} n_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar^2 q_{\alpha} q_{\beta} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} n_{\mathbf{k}'}. \quad (16.34) \end{aligned}$$

Im isotropen Fall ist das dann gleich $\hbar^2 q^2 N / (2m^*)$, wobei $1/m^*$ über die besetzten Zustände gemittelt wird. Damit ergibt sich als Frequenz die Plasmafrequenz

$$\omega_{\mathbf{P}}^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m^*}. \quad (16.35)$$

16.d Plasmonen-Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Die Plasmonen sind Ladungsschwingungen, die näherungsweise Bosonen sind. Die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren kann man folgendermaßen einführen:

$$A_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}, \quad a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \frac{2V_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega_{\mathbf{p}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}}} \quad (16.36)$$

mit einer Normierung $C_{\mathbf{q}}$. Wir betrachten den Kommutator

$$[A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}^{\dagger}] = \sum_{\mathbf{k}s} (a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} a_{\mathbf{q}',\mathbf{k}} - a_{\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}. \quad (16.37)$$

Für $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ ersetzt man $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \approx n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ und erhält

$$\begin{aligned} [A_{\mathbf{q}}, A_{\mathbf{q}}^{\dagger}] &= 8V_{\mathbf{q}}^2 C_{\mathbf{q}}^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{(\hbar\omega_{\mathbf{p}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}})^2} \\ &= -4V_{\mathbf{q}}^2 C_{\mathbf{q}}^2 V_{\text{P}} \left. \frac{df(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega=\omega_{\mathbf{p}}} \end{aligned} \quad (16.38)$$

Diesem Ausdruck entnimmt man, dass $C_{\mathbf{q}} = O(1/\sqrt{V_{\text{P}}})$, damit der Kommutator $[A_{\mathbf{q}}, A_{\mathbf{q}}^{\dagger}] = 1$ wird. Man erhält also

$$A_{\mathbf{q}}^{\dagger} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\text{P}}}} \sum_{\mathbf{k}s} \dots c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}, \quad (16.39)$$

$$[A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}^{\dagger}] \propto \frac{1}{V_{\text{P}}} \sum_{\mathbf{k}s} \dots c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\text{P}}}} A_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'}^{\dagger} \quad \text{für } \mathbf{q} \neq \mathbf{q}' \quad (16.40)$$

$$[A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}] \propto \frac{1}{V_{\text{P}}} \sum_{\mathbf{k}s} \dots c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\text{P}}}} A_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'}. \quad (16.41)$$

Speziell $[A_{\mathbf{q}}, A_{-\mathbf{q}}]$ verschwindet, falls nur $\epsilon_{-\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$. Wegen der Faktoren $1/\sqrt{V_{\text{P}}}$ können diese Kommutatoren häufig vernachlässigt werden. Man führt dann den Plasmonen-Anteil

$$\sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{q}}^{\dagger} A_{\mathbf{q}} \quad (16.42)$$

separat im Hamilton-Operator mit den Bosonen-Kommutator-Beziehungen

$$[A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}, \quad [A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}] = 0 \quad (16.43)$$

ein.

17 Dielektrizitätskonstante und Abschirmung

Wir wollen in diesem Abschnitt die Dielektrizitätskonstante und die Abschirmung betrachten. Dazu gehen wir aus von einer Störung

$$U(\mathbf{r}, t) = ue^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + i\omega t + \alpha t} + \text{c.c.} \quad (17.1)$$

Dabei beschreibt ein kleines positives α das adiabatische Einschalten der Störung. In erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie in u geht der Zustand

$$\exp\left(-\frac{i\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar}\right)|\mathbf{k}\rangle, \quad |\mathbf{k}\rangle \triangleq \frac{1}{\sqrt{V_P}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (17.2)$$

über in

$$\psi_{\mathbf{k}}(t) = \exp\left(-\frac{i\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar}\right) (|\mathbf{k}\rangle + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)|\mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)|\mathbf{k} - \mathbf{q}\rangle + \dots). \quad (17.3)$$

Eingesetzt in die Bewegungsgleichung

$$\frac{i\hbar\partial\psi_{\mathbf{k}}}{\partial t} = (H_0 + ue^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + i\omega t + \alpha t} + \text{c.c.})\psi_{\mathbf{k}} \quad (17.4)$$

ergibt das bei Weglassen des Faktors $\exp\left(-\frac{i\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar}\right)$

$$\begin{aligned} & \epsilon_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle + (i\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\epsilon_{\mathbf{k}})|\mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle + (i\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}\epsilon_{\mathbf{k}})|\mathbf{k} - \mathbf{q}\rangle \\ & = \epsilon_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + ue^{i\omega t + \alpha t})|\mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + u^*e^{-i\omega t + \alpha t})|\mathbf{k} - \mathbf{q}\rangle + O(ub). \end{aligned} \quad (17.5)$$

Daraus folgt dann, wenn wir b von Ordnung u ansetzen,

$$i\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = ue^{i\omega t + \alpha t} \quad (17.6)$$

mit der Lösung

$$b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) = \frac{ue^{i\omega t + \alpha t}}{-\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\hbar\alpha}. \quad (17.7)$$

Ähnlich findet man

$$b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) = \frac{u^*e^{-i\omega t + \alpha t}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i\hbar\alpha}. \quad (17.8)$$

Daraus ergibt sich in erster Ordnung in u folgende Änderung der Ladungsdichte

$$\begin{aligned} \delta\rho(\mathbf{r}, t) &= e \sum_{\mathbf{k}s} \left(|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2 - \frac{1}{V_P} \right) f_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{2e}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} \left(|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}}|^2 - 1 \right) f_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{2e}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + \text{c.c.}) f_{\mathbf{k}} + O(b^2) \\ &= \frac{2e}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^*(t)) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}} + \text{c.c.} \\ &= \frac{2e}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{f_{\mathbf{k}}}{-\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\hbar\alpha} + \frac{f_{\mathbf{k}}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - i\hbar\alpha} \right) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + i\omega t + \alpha t} u + \text{c.c.} \\ &= \frac{2e}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega + i\hbar\alpha} ue^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + i\omega t + \alpha t} + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (17.9)$$

Beim Übergang auf die letzte Zeile haben wir im zweiten Term der vorletzten Zeile unter der Summe \mathbf{k} durch $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ ersetzt.

Beim Hinzufügen einer Testladung (äußerer Ladung) ρ_a entsteht ein Potential U_a . Außerdem wird eine innere Ladung $\delta\rho$ induziert. $\rho_a + \delta\rho$ erzeugen das Gesamtpotential U . Wir haben bereits $\delta\rho$ als Funktion von U bestimmt. Wir bestimmen noch $U = e\phi$ als Funktion von ρ

$$\Delta U(\mathbf{r}, t) = e\Delta\phi(\mathbf{r}, t) = -4\pi e\rho(\mathbf{r}, t), \quad (17.10)$$

$$q^2 U(\mathbf{r}, t) = 4\pi e\rho(\mathbf{r}, t) \text{ für } U \propto e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (17.11)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad (17.12)$$

$$\epsilon_D \operatorname{div}\mathbf{E} = \operatorname{div}\mathbf{D} = 4\pi\rho_a. \quad (17.13)$$

Daraus folgt

$$\epsilon_D(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\rho_a}{\rho} = 1 - \frac{\delta\rho}{\rho} = 1 - \frac{4\pi e\delta\rho}{q^2 U} = 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2 V_P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega - i\hbar\alpha}. \quad (17.14)$$

Dies ist die Lindhard-Gleichung für die Dielektrizitätskonstante des Elektronengases. Berücksichtigen wir den Limes

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\omega - i\alpha} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega} + i\pi\delta(\omega), \quad (17.15)$$

so folgt

$$\Re\epsilon_D(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2 V_P} \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega}, \quad (17.16)$$

$$\Im\epsilon_D = \frac{8\pi e^2}{q^2 V_P} \sum_{\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega). \quad (17.17)$$

Man sieht, dass $\Re\epsilon_D(\mathbf{q}, \omega) = 0$ für die Plasma-Frequenz $\omega = \omega_P$. Der Imaginärteil beschreibt die Absorption durch Teilchen-Loch-Anregungen (Dämpfung der elektromagnetischen Welle).

17.a Statische Abschirmung: Metall

Wir betrachten die statische Abschirmung ($\omega = 0$) in einem Metall. Wir werten dazu die statische Dielektrizitätskonstante

$$\epsilon_D(\mathbf{q}, 0) = 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2 V_P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}} \quad (17.18)$$

und zwar für $\hbar q v_F = q|\nabla\epsilon_{\mathbf{k}}| \ll k_B T$ aus. Wir können dann

$$f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = -\frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (17.19)$$

setzen und erhalten

$$\epsilon_D(q, 0) = 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2 V_P} \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \int D(\epsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) d\epsilon = 1 + \frac{\lambda^2}{q^2} \quad (17.20)$$

mit

$$\lambda^2 = 4\pi e^2 D(\epsilon_F). \quad (17.21)$$

mit der Zustandsdichte (10.17) $D(\epsilon_F)$ an der Fermikante. Daher ergibt sich für die Fourier-Transformierte von Potential und Ladung

$$\begin{aligned} \epsilon_D(q, 0) \cdot (-q^2)\phi_{\mathbf{q}} &= -4\pi\rho_a(\mathbf{q}), \\ (-q^2 - \lambda^2)\phi_{\mathbf{q}} &= -4\pi\rho_a(\mathbf{q}), \\ (\Delta - \lambda^2)\phi(\mathbf{r}) &= -4\pi\rho_a(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (17.22)$$

woraus sich dann für die Punktladung $\rho_a = e\delta^3(\mathbf{r})$ das abgeschirmte Potential $\phi(r) = \frac{e}{r} e^{-\lambda r}$ ergibt. Die Punktladung umgibt sich mit einer Abschirmungswolke. Ihre Ausdehnung ist von der Größenordnung $1/\lambda$. Man bezeichnet diese Größe als Abschirmlänge.

17.b Statische Abschirmung: Halbleiter

In einem Halbleiter erhalten wir eine schwache statische Abschirmung zusätzlich zu der Dielektrizitätskonstante auf Grund von Übergängen zwischen den Bändern (siehe nächster Abschnitt). Liegt das chemische Potential weit von der unteren Bandkante des Leitungsbandes entfernt, so kann man in guter Näherung (Siehe Hunklinger-Enss: Gl.(9.8) S. 294) $f = e^{-\beta(\epsilon - \mu)}$ setzen

$$\delta\epsilon_D = \frac{8\pi e^2}{q^2 V_P} \sum_{\mathbf{k}, L} \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) = \frac{8\pi e^2}{q^2 V_P k_B T} \sum_{\mathbf{k}} f = \frac{4\pi e^2}{q^2 k_B T} n_e. \quad (17.23)$$

Ein entsprechender Beitrag kommt von den Löchern, so dass wir

$$\lambda^2 = \frac{4\pi e^2 (n_e + n_L)}{k_B T \epsilon_{\text{iso}}} \quad (17.24)$$

finden. In der Regel erstreckt sich dann die Abschirmung über sehr viele Atomabstände.

17.c Dielektrizitätskonstante: Isolator

Bisher haben wir die Wellenfunktionen als ebene Wellen betrachtet. Im Isolator müssen wir aber explizit Blochfunktionen $|L, \mathbf{k}\rangle$ und $|V, \mathbf{k}\rangle$ betrachten. Dabei steht L für Leitungsband, V für Valenzband. Wir erhalten

$$\epsilon_D = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2 V_P} \sum_{L, V, \mathbf{k}, s} \frac{(f(\epsilon_{\mathbf{k}}^L) - f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^V)) |\langle L, \mathbf{k} | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | V, \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle|^2}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^V - \epsilon_{\mathbf{k}}^L + \hbar\omega - i\hbar\alpha} + (L \leftrightarrow V). \quad (17.25)$$

Mit $f(\epsilon_{\mathbf{k}}^L) = 0$, $f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^V) = 1$ und dem Überlapp aus (12.4)

$$\langle L, \mathbf{k} | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | V, \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \frac{\hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{p}_{L, V}}{m \epsilon^V - \epsilon^L}, \quad (17.26)$$

findet man für $\omega = 0$ und $q \rightarrow 0$

$$\epsilon_D = 1 + \frac{16\pi e^2 \hbar^2}{m^2 V_P} \sum_{\mathbf{k}, L, V} \frac{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{p}_{L, V})^2 / q^2}{(\epsilon_{\mathbf{k}}^L - \epsilon_{\mathbf{k}}^V)^3} = \sum_{\alpha, \beta} \epsilon_{\alpha, \beta} \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2}. \quad (17.27)$$

Eingesetzt in die Maxwell-Gleichung (17.13) ergibt das

$$-\epsilon_D q^2 \phi_{\mathbf{q}} = -4\pi \rho_{\mathbf{a}, \mathbf{q}}, \quad (17.28)$$

$$-\sum_{\alpha, \beta} q_\alpha q_\beta \epsilon_{\alpha, \beta} \phi_{\mathbf{q}} = -4\pi \rho_{\mathbf{a}, \mathbf{q}}, \quad (17.29)$$

daraus dann im Ortsraum

$$\partial_\alpha (\epsilon_{\alpha, \beta} \partial_\beta \phi(\mathbf{r})) = -4\pi \rho_{\mathbf{a}}(\mathbf{r}), \quad (17.30)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi, \quad \mathbf{D} = \epsilon_D \mathbf{E}, \quad \text{div} \mathbf{D} = 4\pi \rho_{\mathbf{a}}, \quad (17.31)$$

wobei ϵ_D ein Tensor ist, der für $q \rightarrow 0$ endlich bleibt, während man bei Anwesenheit von beweglichen Ladungsträgern in diesem Limes eine Divergenz erhält, wie oben hergeleitet.

17.d Plasmaschwingung mit Dämpfung

Wir betrachten jetzt noch die Plasmaschwingung mit Dämpfung. Zunächst sehen wir uns die Symmetrien der Dielektrizitätskonstante an. Wir erhalten

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega - i\hbar\alpha} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega - i\hbar\alpha} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega + i\hbar\alpha}, \quad (17.32)$$

wobei wir beim Übergang von der ersten zur zweiten Summe k durch $-k - q$ ersetzt haben und dann verwenden, dass $\epsilon_{-\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$. Daraus finden wir

$$\epsilon_{\mathbf{D}}(\mathbf{q}, \omega - i\alpha) = \epsilon_{\mathbf{D}}(\mathbf{q}, -\omega + i\alpha) = \epsilon_{\mathbf{D}}^*(\mathbf{q}, -\omega - i\alpha) \quad (17.33)$$

und damit

$$\Re \epsilon_{\mathbf{D}}(\mathbf{q}, \omega) = \Re \epsilon_{\mathbf{D}}(\mathbf{q}, -\omega), \quad \Im \epsilon_{\mathbf{D}}(\mathbf{q}, \omega) = -\Im \epsilon_{\mathbf{D}}(\mathbf{q}, -\omega). \quad (17.34)$$

Aus

$$\rho_{\mathbf{a}}(\omega) = \epsilon_{\mathbf{D}}(\omega) \rho(\omega) \quad (17.35)$$

folgt mit

$$\rho_{\mathbf{a}}(t) = c\delta(t) = \int d\omega e^{i\omega t} \rho_{\mathbf{a}}(\omega), \quad \rho_{\mathbf{a}}(\omega) = \frac{c}{2\pi} \quad (17.36)$$

schließlich

$$\rho(t) = \frac{c}{2\pi} \int d\omega \frac{e^{i\omega t}}{\epsilon_{\mathbf{D}}(\omega)} \quad (17.37)$$

Die Hauptbeiträge rühren von $\omega \approx \pm\omega_{\mathbf{p}}$ her. Dort findet man mit

$$\epsilon_{\mathbf{D}} = \begin{cases} a(\omega - \omega_{\mathbf{p}} - i\Gamma) & \omega \approx \omega_{\mathbf{p}}, \\ a(-\omega - \omega_{\mathbf{p}} + i\Gamma) & \omega \approx -\omega_{\mathbf{p}}. \end{cases} \quad a = \left. \frac{\partial \Re \epsilon_{\mathbf{D}}(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_{\mathbf{p}}}, \quad a\Gamma = -\Im \epsilon(\omega_{\mathbf{p}}). \quad (17.38)$$

Damit findet man

$$\rho(t) = \frac{c}{2\pi a} \int \frac{d\omega e^{i\omega t}}{\omega - \omega_{\mathbf{p}} - i\Gamma} - \frac{c}{2\pi a} \int \frac{d\omega e^{i\omega t}}{\omega + \omega_{\mathbf{p}} - i\Gamma}. \quad (17.39)$$

Der Integrand hat Pole bei $\omega = \pm\omega_{\mathbf{p}} + i\Gamma$. Für $t < 0$ verschiebt man den Integrationsweg nach $\Im\omega \rightarrow -\infty$, für positives dagegen nach $\Im\omega \rightarrow +\infty$. Dann verschwinden die Integrale. Für $t < 0$ kann man das durchführen, ohne über einen Pol verschieben zu müssen. Daher ergibt sich dann $\rho(t) = 0$. Für positives t dagegen erhält man zwei Polbeiträge, so dass man

$$\rho(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \frac{ic}{a} e^{(i\omega_{\mathbf{p}} - \Gamma)t} - \frac{ic}{a} e^{(-i\omega_{\mathbf{p}} - \Gamma)t} = -\frac{2c}{a} \sin(\omega_{\mathbf{p}} t) e^{-\Gamma t} & t > 0 \end{cases} \quad (17.40)$$

erhält. Der Imaginärteil Γ beschreibt also die Dämpfung.

18 Effektive Paar-Wechselwirkung

18.a Elektron-Phonon-Wechselwirkung

In diesem Abschnitt formulieren wir die für die Supraleitung wichtige Elektron-Phonon-Wechselwirkung durch Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren. Für ein einfaches Gitter können wir die Elektron-Phonon-Wechselwirkung (1.4) durch die Auslenkung $\boldsymbol{\eta}_n$ der Ionen darstellen

$$H_{\text{el-ion}} = \sum V_{\text{el-ion}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n - \boldsymbol{\eta}_n). \quad (18.1)$$

Dabei hat man die Vorstellung eines starren Ions. Man entwickelt nun

$$V_{\text{el-ion}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n - \boldsymbol{\eta}_n) = \underbrace{V_{\text{el-ion}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n)}_{\text{zum Einteilchen-Potential der Elektronen}} - \underbrace{\boldsymbol{\eta}_n \text{grad}_r V_{\text{el-ion}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n)}_{H_{\text{el-ph}}} \quad (18.2)$$

Wir drücken nun gemäss (6.23) die Auslenkungen durch die Normal-Koordinaten aus

$$\boldsymbol{\eta}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda \mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_\lambda(\mathbf{q})}} \mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} (a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})), \quad (18.3)$$

wobei wir zur Unterscheidung von den Elektron-Operatoren die Polarisations-Vektoren der Phononen mit \mathbf{e} statt \mathbf{c} bezeichnet haben. Zum anderen drücken wir den Gradienten des Potentials hier für ebene Wellen (aber ähnlich auch für Bloch-Zustände) aus

$$\begin{aligned} (\text{grad}_r V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n))_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} &= \frac{1}{V_P} \int d^3 r e^{i(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \text{grad}_r V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \\ &= -i(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \frac{1}{V_P} \int d^3 r e^{i(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \\ &= i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) e^{i(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n} \frac{1}{V_P} \int d^3 r e^{i(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \\ &= i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) e^{i(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n} \frac{1}{V_P} V_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'}. \end{aligned} \quad (18.4)$$

Damit ergibt sich für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung

$$H_{\text{el-ph}} = -\frac{i}{V_P} \sum_{n, \lambda, \mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}', s} \frac{1}{\sqrt{MN}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda(\mathbf{q})}} \mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} (a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})) c_{\mathbf{k}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n} V_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'}. \quad (18.5)$$

Die Summe über die Gitterpunkte durch n gekennzeichnet, ergibt $N \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{q} + \mathbf{k} - \mathbf{k}', \mathbf{G}}$ mit den reziproken Gittervektoren \mathbf{G} . Damit folgt

$$H_{\text{el-ph}} = -\frac{i}{V_P} \sqrt{\frac{N}{M}} \sum_{\lambda, \mathbf{q}, \mathbf{k}, s, \mathbf{G}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda(\mathbf{q})}} \mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{G}) V_{\mathbf{G} - \mathbf{q}} (a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})) c_{\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{G}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \quad (18.6)$$

Die Vektoren \mathbf{k} , \mathbf{q} und $\mathbf{k}' = \mathbf{q} + \mathbf{k} - \mathbf{G}$ liegen innerhalb der (ersten) Brillouinzone. Falls $\mathbf{G} \neq \mathbf{0}$, spricht man von Umklapp-Prozessen. Eine Näherung, die wir hier der Einfachheit halber verwenden wollen, besteht darin, a) bei den Umklapp-Prozessen $\mathbf{q} - \mathbf{G}$ durch \mathbf{q} zu ersetzen und b) für die Polarisation der Phononen anzunehmen, dass die longitudinalen Phononen des Impulses \mathbf{q} in dieser Richtung orientiert sind, so dass nur diese zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung beitragen, d.h. $\mathbf{e}(\mathbf{q}) \parallel \mathbf{q}$. Dann gilt

$$H_{\text{el-ph}} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s} M_{\mathbf{q}} (a(\mathbf{q}) + a^\dagger(-\mathbf{q})) c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s}, \quad (18.7)$$

wobei \mathbf{q} und \mathbf{k} über die ganze Brillouinzone laufen und $c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}s}^\dagger = c_{\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{G}s}^\dagger$ angenommen wird, und

$$M_{\mathbf{q}} = -i \frac{\sqrt{N}}{V_P} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\text{long}}(\mathbf{q})}} (\mathbf{e}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q}) V_{-\mathbf{q}}. \quad (18.8)$$

Die Wechselwirkung ist hermitesch, da $\mathbf{e}^*(-\mathbf{q}) = \mathbf{e}(\mathbf{q})$, $V_{\mathbf{q}}^* = V_{-\mathbf{q}}$, $\omega(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$, woraus dann $M_{\mathbf{q}}^* = M_{-\mathbf{q}}$ folgt. Wählt man $\mathbf{e}(\mathbf{q}) = \frac{i\mathbf{q}}{q}$, dann folgt $-i(\mathbf{e}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q}) = q$ und $M_{\mathbf{q}} \propto \sqrt{q}$.

18.b Die Fröhlichsche Transformation

Fröhlich hat erstmals eine Transformation von der Elektron-Phonon-Wechselwirkung auf eine effektive elektronische Paarwechselwirkung angegeben. Er geht aus von

$$H = H_0 + H_{\text{el-ph}}, \quad (18.9)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} : a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} : + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} : + E_0, \quad (18.10)$$

$$H_{\text{el-ph}} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} M_{\mathbf{q}} : (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} + c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}}^\dagger) : \quad (18.11)$$

und führt eine unitäre Transformation

$$H^{\text{Fr}} = e^{-S} H e^S = H + [H, S] + \frac{1}{2} [[H, S], S] + \dots \quad (18.12)$$

durch, wobei er nach Potenzen von M und S entwickelt und $S = O(M)$ annimmt und fordert, dass der Beitrag in $O(M)$ zu H^{Fr} verschwindet,

$$H^{\text{Fr}} = H_0 + \underbrace{H_{\text{el-ph}} + [H_0, S]}_{=0} + \underbrace{[H_{\text{el-ph}}, S] + \frac{1}{2} [[H_0, S], S]}_{\frac{1}{2} [H_{\text{el-ph}}, S]} + O(M^3). \quad (18.13)$$

Aus der Forderung, dass der Beitrag in erster Ordnung in M verschwindet, ergibt sich der zweite Beitrag zu $\frac{1}{2} [H_{\text{el-ph}}, S]$. Wir bestimmen nun S . Der Ansatz dafür ist ähnlich dem Ausdruck für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung,

$$S = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s} S_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} : (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} - c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}}^\dagger) :, \quad (18.14)$$

lediglich die Koeffizienten S unterscheiden sich von M und ein Minus-Zeichen steht zwischen den beiden Termen, da S als Generator einer unitären Transformation antihermitesch ist, während die Elektron-Phonon-Wechselwirkung hermitesch ist. Der Kommutator ergibt

$$[H_0, S] = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s} S_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} : - \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s} S_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}) : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}}^\dagger :, \quad (18.15)$$

Die Forderung $H_{\text{el-ph}} + [H_0, S] = 0$ ergibt dann

$$S_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} = \frac{M_{\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}}. \quad (18.16)$$

Bilden wir nun den Kommutator $[H_{\text{el-ph}}, S]$, so erhalten wir vielerlei Beiträge, $\dots + : c^\dagger c^\dagger c c : + \dots : c^\dagger c : + \text{const.} + \dots : a^\dagger a c^\dagger c : + \dots : a^\dagger a : + \dots : a^\dagger a^\dagger c^\dagger c : + \dots : a^\dagger a^\dagger : + \dots : a a c^\dagger c : + \dots : a a : .$ Die Beiträge $\dots : c^\dagger c^\dagger c c :$ ergeben die effektive Wechselwirkung zwischen den Elektronen. $\dots : c^\dagger c :$ und $\dots a^\dagger a :$ ergeben Veränderungen der Elektronen- und Phononen-Energien.

Wir berechnen nun für die hier interessierende effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$[H_{\text{el-ph}}, S] = \left[\sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} M_{\mathbf{q}} : (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} + c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}}^\dagger) :, \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{k}', s'} S_{\mathbf{q}', \mathbf{k}'} : (c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{q}'} - c_{\mathbf{k}'s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'s'} a_{\mathbf{q}'}^\dagger) : \right]. \quad (18.17)$$

Die hier interessierenden $c^\dagger c^\dagger c c$ Beiträge entstehen durch Kommutieren der Phononen-Operatoren. Wir erhalten daher nur Beiträge für $\mathbf{q}' = \mathbf{q}$,

$$\begin{aligned}
[H_{\text{el-ph}}, S] &= - \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s, \mathbf{k}', s'} M_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'} : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}'s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} : ((n_{\mathbf{q}} + 1 - n_{\mathbf{q}})) \\
&+ \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s, \mathbf{k}', s'} M_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'} : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'s'} : (n_{\mathbf{q}} - (n_{\mathbf{q}} + 1)) \\
&= - \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s, \mathbf{k}', s'} (M_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}} + M_{-\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'}) : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} : \quad (18.18)
\end{aligned}$$

Wir werten die Matrixelemente aus

$$-M_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}} - M_{-\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'} = -M_{\mathbf{q}}^2 \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} + \omega_{\mathbf{q}}} + \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + \omega_{-\mathbf{q}}} \right) = \frac{2M_{\mathbf{q}}^2 \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (18.19)$$

Damit erhalten wir schließlich den Fröhlichischen Hamilton-Operator

$$H^{\text{Fr}} = H_0 + V^{\text{Fr}}, \quad (18.20)$$

$$V^{\text{Fr}} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s, \mathbf{k}', s'} V_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\text{Fr}} : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} :, \quad (18.21)$$

$$V_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\text{Fr}} = \frac{M_{\mathbf{q}}^2 \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (18.22)$$

18.c Transformation mittels Flussgleichungen

Die Idee dieses in den letzten Jahren hier entwickelten Verfahrens besteht darin, den Hamilton-Operator einer kontinuierlichen unitären Transformation zu unterziehen und ihn dadurch auf eine block-diagonale Form zu bringen,

$$H(l + dl) = e^{\eta dl} H(l) e^{-\eta dl} \quad (18.23)$$

was auf die Flussgleichung

$$\frac{dH(l)}{dl} = [\eta(l), H(l)] \quad (18.24)$$

mit dem antiunitären Generator η der unitären Transformation führt. Wir bezeichnen l als den Flussparameter. Wir starten bei $l = 0$ mit dem Ausgangs-Hamilton-Operator $H(0) = H$ und erwarten, dass $H(\infty)$ block-diagonal ist. Dazu zerlegt man den Hamilton-Operator in den blockdiagonalen Anteil H^d und den außerdiagonalen Anteil H^r . Wir geben nun ein Argument, dass dann

$$\eta(l) = [H(l), H^r(l)] \quad (18.25)$$

eine gute Wahl für den Generator ist. Dazu betrachten wir

$$\frac{d}{2dl} \text{tr}((H^r)^2) = \text{tr}(H^r \frac{dH^r}{dl}) = \text{tr}(H^r \frac{dH}{dl}), \quad (18.26)$$

da die Spur des Produktes aus H^r und H^d verschwindet. Das Produkt ist nämlich außerdiagonal. Dann folgt weiter

$$\frac{d}{2dl} \text{tr}((H^r)^2) = \text{tr}(H^r(\eta H - H \eta)) = \text{tr}(\eta(H H^r - H^r H)). \quad (18.27)$$

Wählen wir nun $\eta = [H, H^r]$, so folgt, da η antihermitesch ist,

$$\frac{d}{2dl} \text{tr}((H^r)^2) = \text{tr}(\eta^2) = -\text{tr}(\eta^\dagger \eta) \leq 0. \quad (18.28)$$

Die Außerdiagonal-Elemente nehmen also ab bis $\eta = 0$, also H^d mit H^r kommutiert. Falls wir als H^d nur den Diagonal-Anteil behalten, so verschwindet η erst, wenn es nur noch Außerdiagonal-Elemente gibt zwischen Zuständen, die bezüglich H^d entartet sind.

Wir wollen dieses Schema jetzt auf die Elimination der Elektron-Phonon-Wechselwirkung anwenden und bezeichnen als außerdiagonal die Anteile, die die Anzahl der Phononen verändern. Daher ist die Elektron-Phonon-Wechselwirkung der Außerdiagonal-Anteil,

$$H^r = H_{\text{el-ph}} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} : (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} + c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}}^\dagger) : \quad (18.29)$$

und der Diagonal-Anteil besteht aus H_0 und der effektiven Zweiteilchen-Wechselwirkung, die während des Flusses entsteht.

$$H^d = H_0 + V_{\text{eff}}, \quad (18.30)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} : a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} : + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} : + E_0, \quad (18.31)$$

$$V_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s, \mathbf{k}', s'} V_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} : \quad (18.32)$$

Dabei wird V_{eff} von Ordnung M^2 sein. Höhere Ordnungen vernachlässigen wir, genau so wie bei Fröhlich. Wir bestimmen zunächst

$$\eta = [H^d, H^r] = [H_0, H^r] + O(M^3) = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s} \eta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} : (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} - c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}}^\dagger) :, \quad (18.33)$$

$$\eta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} = (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}}. \quad (18.34)$$

Wir setzen diesen Ausdruck nun in die Flussgleichung

$$\frac{dH}{dl} = [\eta, H] = [\eta, H_0 + H^r] + O(M^3) \quad (18.35)$$

ein und finden zunächst

$$[\eta, H_0] = - \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} : (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} + c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}}^\dagger) :, \quad (18.36)$$

woraus die Flussgleichung für die Elektron-Phonon-Kopplung folgt

$$\frac{dM_{\mathbf{q}, \mathbf{k}}}{dl} = -(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} \quad (18.37)$$

mit der Lösung

$$M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}}(l) = e^{-(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 l} M_{\mathbf{q}}. \quad (18.38)$$

Nun betrachten wir noch

$$[\eta, H^r] = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s, \mathbf{k}', s'} (M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} \eta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}} + M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \eta_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'}) : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} : . \quad (18.39)$$

Dabei haben wir Terme von anderer Form, wie nach (18.16) aufgeführt, weggelassen und erhalten damit die Flussgleichung für das effektive Potential

$$\begin{aligned} \frac{dV_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'}(l)}{dl} &= M_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} \eta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}} + M_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \eta_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \\ &= M_{\mathbf{q}}^2(0) \times \left((\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) e^{-((\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})^2) l} \right. \\ &\quad \left. + (\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{q}}) e^{-((\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{q}})^2) l} \right), \end{aligned} \quad (18.40)$$

woraus dann

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\infty) &= M_{\mathbf{q}}^2 \times \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})^2} \right) \end{aligned} \quad (18.41)$$

folgt. Wir stellen einen kurzen Vergleich mit dem Ergebnis von Fröhlich an:

a) Die Wechselwirkung, die sich mit den Flussgleichungen ergibt, ist weniger singulär. Im Nenner von (18.41) steht die Summe zweier Quadrate, in dem von (18.22) die Differenz zweier Quadrate.

b) Für energie-erhaltende Prozesse (on-shell), das heißt für $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'}$ erhält man mit beiden Verfahren das gleiche Ergebnis.

c) Für die Supraleitung sind die Prozesse mit $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ wichtig (Elektronen-Paare mit Gesamt-Impuls $\mathbf{0}$ wechselwirken). Dort erhält man

$$V_{\mathbf{q},\mathbf{k},-\mathbf{k}}^{\text{Fr}} = -\frac{M_{\mathbf{q}}^2\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}^2 - (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})^2}, \quad V_{\mathbf{q},\mathbf{k},-\mathbf{k}}^{\text{eff}} = -\frac{M_{\mathbf{q}}^2\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})^2}. \quad (18.42)$$

Das Flussgleichungs-Potential ist nicht singulär und stets attraktiv.

d) In der unitären Transformation hat man folgenden Unterschied: Aus

$$H(l) = U(l)HU^\dagger(l), \quad \frac{dH(l)}{dl} = [\eta(l), H(l)] \quad (18.43)$$

schließt man auf

$$\frac{dU}{dl}HU^\dagger + UH\frac{dU^\dagger}{dl} = \eta UHU^\dagger - UHU^\dagger\eta \quad (18.44)$$

und damit folgt für $U(l)$ die Flussgleichung

$$\frac{dU(l)}{dl} = \eta(l)U(l) \quad (18.45)$$

mit der Anfangsbedingung $U(0) = 1$. Durch Iteration findet man

$$U(l) = 1 + \int_0^l dl' \eta(l') + \int_0^l dl'' \int_0^{l''} dl' \eta(l'')\eta(l') + \dots \quad (18.46)$$

Bilden wir den Logarithmus

$$-S = \ln U(\infty) = \int_0^\infty dl' \eta(l') + \frac{1}{2} \int_0^\infty dl'' \int_0^{l''} dl' [\eta(l''), \eta(l')] + \dots, \quad (18.47)$$

so kann man leicht nachrechnen, dass der Term in Ordnung η mit dem Fröhlichschen $-S^{\text{Fr}}$ übereinstimmt. Der zweite Term mit dem Kommutator ergibt den Unterschied zwischen beiden Transformationen. Generell haben wir den Eindruck gewonnen, dass das permanente Anpassen des Generators $\eta(l)$ an die jeweilige Wechselwirkung $H(l)$ zu weniger singulären Wechselwirkungen führt als die einmalige wie sie von Fröhlich verwendet wurde. Man kann sich fragen, wieso zwei Störungsrechnungen unterschiedliche Ergebnisse liefern können. Dies liegt daran, dass wir nicht diagonalisieren, sondern block-diagonalisieren. Die Blockdiagonalisierung ist aber nicht eindeutig festgelegt. Vielmehr können sich verschiedene derartige Blockdiagonalisierungen noch durch unitäre Transformationen innerhalb der Blöcke unterscheiden.

19 Cooper-Paare und BCS-Lösung

19.a BCS-Grundzustand

Die Grundidee von Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS) war, dass sich im supraleitenden Zustand kohärente Paare von Elektronen bilden, die einen Gesamtimpuls $\mathbf{0}$ und in vielen Fällen Gesamtspin 0 haben (Singlett-Supraleiter). Der wesentliche Anteil des Hamilton-Operators ist

$$H = \sum_k \epsilon_k (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k}) - \frac{V}{N} \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger c_{-k'} c_{k'}. \quad (19.1)$$

Dabei steht k für \mathbf{k}, \uparrow und $-k$ für $-\mathbf{k}, \downarrow$. Im allgemeinen hängt die Kopplung V von k und k' ab. Hier wird der Einfachheit angenommen, dass V von k und k' unabhängig sind. Weiter wird angenommen, dass sich die Wechselwirkung nur in einer Umgebung der Fermikante erstreckt, so dass $|\epsilon_k - \mu| < \hbar\omega_D$, da man davon ausgeht, dass nur Elektronen hinreichend nahe an der Fermikante dazu beitragen und man berücksichtigt, dass nur akustische Phononen, deren Energie bis zu \hbar mal Debye-Frequenz reichen, wesentlich beitragen können. In der Tat finden wir (18.42), dass im Rahmen der Fröhlich'schen Näherung die effektive Kopplung für große Energiedifferenzen abstoßend wird, und dass im Rahmen der Flussgleichungs-Näherung die Wechselwirkung zwar attraktiv bleibt, aber die Matrixelemente für $|\epsilon_k - \epsilon_{k'}| > \hbar\omega$ klein werden. Der Näherung (19.1) erlaubt uns, eine analytische Rechnung vorzunehmen.

BCS setzen nun für den Grundzustand

$$|\psi_0\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) |\text{vak}\rangle \quad (19.2)$$

an. Es werden also Paare von Elektronen erzeugt. Interessanterweise hat dieser Zustand keine feste Teilchenzahl. Vielmehr sind alle Paare k und $-k$ unabhängig von einander mit der Wahrscheinlichkeit u_k^2 unbesetzt und mit der Wahrscheinlichkeit v_k^2 besetzt, wobei man

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (19.3)$$

fordert. Dann ist der Zustand normiert

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \prod_k (u_k^2 + v_k^2) = 1. \quad (19.4)$$

Mit diesem Ansatz erhält man die Erwartungswerte

$$\langle \mathcal{N} \rangle = 2 \sum_k v_k^2, \quad (19.5)$$

$$\langle H - \mu \mathcal{N} \rangle = 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N} \sum_{k,k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'}. \quad (19.6)$$

Wir wollen nun die u_k und v_k unter der Nebenbedingung (19.3) variieren. Am einfachsten setzen wir

$$u_k = \cos \phi_k, \quad v_k = \sin \phi_k \quad (19.7)$$

an. Dann können wir die Winkel ϕ_k unabhängig variieren,

$$\frac{\partial}{\partial \phi_k} \langle H - \mu \mathcal{N} \rangle = 4(\epsilon_k - \mu) u_k v_k - \frac{2V}{N} \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} (u_k^2 - v_k^2). \quad (19.8)$$

Mit der Abkürzung

$$\Delta = \frac{V}{N} \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} \quad (19.9)$$

folgen dann die Gleichungen

$$(\epsilon_k - \mu) \cdot \underbrace{2v_k u_k}_{\sin(2\phi_k)} = \Delta \underbrace{(u_k^2 - v_k^2)}_{\cos(2\phi_k)}. \quad (19.10)$$

Diese Gleichungen haben immer die triviale Lösung

$$\begin{aligned} \Delta = 0, \quad u_k = 1, v_k = 0 & \quad \text{für } \epsilon_k > \mu, \\ u_k = 0, v_k = 1 & \quad \text{für } \epsilon_k < \mu. \end{aligned} \quad (19.11)$$

Dies entspricht dem Hartree-Fock-Zustand, in dem die Elektronen bis $\epsilon_k = \mu$ aufgefüllt sind. Daneben gibt es auch noch die nicht-triviale Lösung $\Delta \neq 0$ mit

$$2v_k u_k = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}}, \quad u_k^2 - v_k^2 = \frac{\epsilon_k - \mu}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}}, \quad (19.12)$$

wobei dann Δ der Gleichung

$$\Delta = \frac{V}{2N} \sum_{k'} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_{k'} - \mu)^2}} \quad (19.13)$$

genügen muss. Mit der Zustandsdichte $D(\epsilon)$ für die Elektronen führt dies auf die Gleichung

$$1 = \frac{\hat{V}}{4} \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} \frac{D(\epsilon) d\epsilon}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \quad \text{mit } \hat{V} = \frac{V_P}{N} V = V_z V, \quad (19.14)$$

da die Zustandsdichte auf das Volumen V_P und nicht auf die Zahl der Gitterpunkte N bezogen ist. Für $\hbar\omega_D \gg \Delta$ und der Näherung $D(\epsilon) \approx D(\epsilon_F)$ führt dies auf

$$\Delta = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{D(\epsilon_F)V}}. \quad (19.15)$$

Wir müssen jetzt betrachten, ob diese BCS-Lösung auf eine niedrigere Energie führt,

$$\langle H - \mu\mathcal{N} \rangle_{\text{BCS}} - \langle H - \mu\mathcal{N} \rangle_{\text{normal}} = \sum_k ((\epsilon_k - \mu)(2v_k^2 - 2\theta(\mu - \epsilon_k)) - \Delta u_k v_k) \quad (19.16)$$

Die Summanden sind negativ, denn aus

$$2v_k^2 = 1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{\sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \quad (19.17)$$

folgen die Summanden

$$\begin{aligned} \epsilon - \mu - \frac{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} < 0 & \quad \text{für } \epsilon > \mu \\ \mu - \epsilon - \frac{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} < 0 & \quad \text{für } \epsilon < \mu, \end{aligned} \quad (19.18)$$

da

$$|x| < \frac{x^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{x^2 + \Delta^2}} \quad \text{wegen } x^2 < \frac{(x^2 + \Delta^2/2)^2}{x^2 + \Delta^2} = x^2 + \frac{\Delta^4/4}{x^2 + \Delta^2}. \quad (19.19)$$

Für $\Delta \ll \hbar\omega_D$ folgt eine Energieabsenkung um $\Delta E = -D(\epsilon_F)\Delta^2/4$.

19.b Anregungen

Für das Vakuum gilt, dass die Anwendung des Vernichtungs-Operators 0 ergibt, $c_{\mathbf{k}s}|\text{vak}\rangle = 0$. Ähnlich kann man für den BCS-Zustand einen Vernichtungs-Operator α bilden, so dass $\alpha|\psi_0\rangle = 0$. Es ist nämlich

$$(v_l c_l^\dagger + u_l c_{-l})|\psi_0\rangle = \prod_{k \neq l} (u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) \underbrace{(v_l c_l^\dagger + u_l c_{-l})(u_l + v_l c_l^\dagger c_{-l}^\dagger)}_{(u_l v_l c_l^\dagger - u_l v_l c_l^\dagger)|\text{vak}\rangle = 0} |\text{vak}\rangle \quad (19.20)$$

ähnlich

$$(-v_l c_{-l}^\dagger + u_l c_l)|\psi_0\rangle = 0. \quad (19.21)$$

Man definiert daher die Operatoren

$$\alpha_{-k} = u_k c_{-k} + v_k c_k^\dagger \rightarrow \alpha_{-k}^\dagger = u_k c_{-k}^\dagger + v_k c_k, \quad (19.22)$$

$$\alpha_k = u_k c_k - v_k c_{-k}^\dagger \rightarrow \alpha_k^\dagger = u_k c_k^\dagger - v_k c_{-k}. \quad (19.23)$$

Man überprüft nun

$$[\alpha_k, \alpha_{k'}]_+ = [\alpha_k, \alpha_{-k'}]_+ = [\alpha_{-k}, \alpha_{-k}]_+ [\alpha_k^\dagger, \alpha_{k'}^\dagger]_+ = [\alpha_k^\dagger, \alpha_{-k'}^\dagger]_+ = [\alpha_{-k}^\dagger, \alpha_{-k}^\dagger]_+ = 0, \quad (19.24)$$

$$[\alpha_k, \alpha_{-k'}^\dagger]_+ = [\alpha_{-k}, \alpha_{k'}^\dagger]_+ = 0, \quad [\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger]_+ = [\alpha_{-k}, \alpha_{-k'}^\dagger]_+ = \delta_{k,k'} \quad (19.25)$$

Es gelten also für die Operatoren α die fermionischen Vertauschungs-Beziehungen. Wir können die Beziehungen nach den ursprünglichen Elektron-Operatoren auflösen,

$$c_k^\dagger = u_k \alpha_k^\dagger + v_k \alpha_{-k}, \rightarrow c_k = u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^\dagger, \quad (19.26)$$

$$c_{-k}^\dagger = u_k \alpha_{-k}^\dagger - v_k \alpha_k, \rightarrow c_{-k} = u_k \alpha_{-k} - v_k \alpha_k^\dagger. \quad (19.27)$$

Daraus ergibt sich dann für die Teilchenzahl-Operatoren und die Erzeuger und Vernichter von Paaren

$$c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k} = (u_k^2 - v_k^2)(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) + 2u_k v_k (\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k} \alpha_k) + 2v_k^2, \quad (19.28)$$

$$c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = u_k^2 \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger - v_k^2 \alpha_{-k} \alpha_k + u_k v_k (1 - \alpha_k^\dagger \alpha_k - \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}), \quad (19.29)$$

$$c_{-l} c_l = u_l^2 \alpha_{-l} \alpha_l - v_l^2 \alpha_l^\dagger \alpha_{-l}^\dagger + u_l v_l (1 - \alpha_l^\dagger \alpha_l - \alpha_{-l}^\dagger \alpha_{-l}). \quad (19.30)$$

und damit für den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H - \mu N &= 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N} \sum_{k,l} u_k v_k u_l v_l \\ &+ \sum_k \left((\epsilon_k - \mu)(u_k^2 - v_k^2) + u_k v_k \frac{2V}{N} \sum_l u_l v_l \right) (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \\ &+ \sum_k \left(\epsilon_k - \mu \right) 2u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \frac{V}{N} \sum_l u_l v_l \left(\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k} \alpha_k \right) \\ &+ O(\alpha^{\dagger 4} + \alpha^{\dagger 3} \alpha + \alpha^{\dagger 2} \alpha^2 + \alpha^\dagger \alpha^3 + \alpha^4). \end{aligned} \quad (19.31)$$

(Terme der Ordnung $O(1/N)\alpha^\dagger \alpha$, $O(1/N)\alpha^\dagger \alpha^\dagger$ und $O(1/N)\alpha \alpha$, die im thermodynamischen Limes vernachlässigbar sind, wurden weggelassen. Mit der Forderung $(\epsilon_k - \mu)2u_k v_k = \Delta(u_k^2 - v_k^2)$ reduziert sich der Hamilton-Operator auf

$$H - \mu N = \sum_k \sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2} (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) + 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N} \sum_{k,l} u_k v_k u_l v_l + O(\alpha^{\dagger m} \alpha^{4-m}), \quad (19.32)$$

die anomalen Terme $\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}$ fallen dann weg. Für den BCS-Zustand beträgt die Einteilchenanregungsenergie $\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2} \geq \Delta$, es gibt also eine Energielücke Δ für das Hinzufügen eines Elektrons. Ändert man die (mittlere) Elektronenzahl nicht, so benötigt man zwei Erzeuger α^\dagger , so dass für derartige Anregungen (z.B. optische) eine Energielücke von 2Δ auftritt.

19.c Sprungtemperatur

Wir verwenden, dass das großkanonische Potential $G(\rho') = E - \mu N - TS$ für einen beliebigen statistischen Operator ρ' größer ist als $G(\rho)$ für die tatsächliche Gleichgewichtsverteilung $\rho \propto e^{-\beta(H - \mu N)}$, d.h. man kann für ρ' ein Variationsverfahren durchführen, bei dem $G(\rho')$ minimiert wird, um eine Näherung für ρ zu finden. Dazu setzen wir

$$\rho' \propto e^{-\beta \sum_k \epsilon_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k})} \quad (19.33)$$

an und variieren $\hat{\epsilon}_k$ und ϕ_k , (19.7). Es folgt dann

$$\langle H - \mu \mathcal{N} \rangle = 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu)(u_k^2 - v_k^2) f(\hat{\epsilon}_k) + 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N} \left(\sum_k u_k v_k (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)) \right)^2. \quad (19.34)$$

Wir definieren

$$\Delta = \frac{V}{N} \sum_k u_k v_k (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)). \quad (19.35)$$

Dann erhalten wir, da die Entropie S nicht von den ϕ abhängt, sondern auf Grund der Darstellung (19.33) nur von den $\hat{\epsilon}$,

$$\frac{\partial G}{\partial \phi_k} = \frac{\partial \langle H - \mu \mathcal{N} \rangle}{\partial \phi_k} = 4(\epsilon_k - \mu) u_k v_k (1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)) - 2\Delta(u_k^2 - v_k^2)(1 - 2f(\hat{\epsilon}_k)) = 0. \quad (19.36)$$

Daher gilt wie bisher Gleichung (19.10)

$$2(\epsilon_k - \mu) u_k v_k = \Delta(u_k^2 - v_k^2). \quad (19.37)$$

Weiter finden wir

$$\frac{\partial G}{\partial \hat{\epsilon}_k} = 2((\epsilon_k - \mu)(u_k^2 - v_k^2) + 2\Delta u_k v_k) \frac{\partial f(\hat{\epsilon}_k)}{\partial \hat{\epsilon}_k} - T \frac{\partial S}{\partial \hat{\epsilon}_k} = 0. \quad (19.38)$$

Hätten wir es mit dem konventionellen Einteilchen-Problem zu tun, dann stünde in der großen Klammer $\epsilon_k - \mu$ und die Lösung wäre dann die exakte $\hat{\epsilon}_k = \epsilon_k - \mu$. Daher ist die große Klammer von (19.38) gleich $\hat{\epsilon}_k$,

$$\hat{\epsilon}_k = (\epsilon_k - \mu)(u_k^2 - v_k^2) + 2\Delta u_k v_k, \quad (19.39)$$

woraus mit (19.37) wieder die Anregungsenergie

$$\hat{\epsilon}_k = \sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2} \quad (19.40)$$

folgt. Lediglich der Ausdruck (19.35) für die Lücke Δ ist bei endlicher Temperatur von der bei Temperatur 0 verschieden. da $\hat{\epsilon}_k$ positiv ist, ist bei $T = 0$ $f = 0$. Bei endlicher Temperatur ergibt sich aber jetzt

$$\Delta = \frac{V\Delta}{2N} \sum_k \underbrace{\frac{1}{\hat{\epsilon}_k} \frac{1 - e^{-\beta \hat{\epsilon}_k}}{1 + e^{-\beta \hat{\epsilon}_k}}}. \quad (19.41)$$

Die unterklammerte Funktion ist für positives $\hat{\epsilon}$ eine monoton fallende Funktion von $\hat{\epsilon}$. Daher gibt es eine nicht-triviale Lösung nur, falls

$$\frac{V}{2N} \sum_k \frac{1}{|\epsilon_k - \mu|} \frac{1 - e^{-\beta|\epsilon_k - \mu|}}{1 + e^{-\beta|\epsilon_k - \mu|}} = \frac{\hat{V}D(\mu)}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{dx}{x} \frac{1 - e^{-x}}{1 + e^{-x}} > 1. \quad (19.42)$$

Daraus folgt, dass die Sprungtemperatur T_c , das heißt die Temperatur bei der die supraleitende Phase einsetzt, gegeben ist (mit $x = \beta\epsilon$) durch

$$\frac{\hat{V}D(\mu)}{2} \int_0^{T_D/T_c} \frac{dx}{x} \frac{1 - e^{-x}}{1 + e^{-x}} = 1. \quad (19.43)$$

Das x -Integral ergibt für großes T_D/T_c ungefähr $0.13 + \ln(T_D/T_c)$. Daraus folgt dann

$$T_c = 1.14 T_D e^{-2/(\hat{V}D(\mu))} = 0.57 \frac{\Delta(0)}{k_B}. \quad (19.44)$$

Wir bemerken noch, dass eine genauere Untersuchung der Gleichung (19.41) für Temperaturen etwas unterhalb T_c das Anwachsen der Lücke mit einem Wurzelgesetz ergibt

$$\Delta(T) \approx 3.06 k_B T_c \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}} \quad \text{für } T \lesssim T_c. \quad (19.45)$$

ergibt.

19.d Ergänzungen

Wir haben hier mittels der Näherung (19.1) für die Paar-Wechselwirkung demonstriert, wie es zu einem Zustand kommt, dessen Energie niedriger als die Hartree-Fock-Energie ist. Im Allgemeinen hat die Paarwechselwirkung keine solch einfache Form. Praktische Rechnungen werden mit realistischeren Paar-Wechselwirkungen durchgeführt. Dabei ist die Fröhlich'sche Näherung wenig geeignet, obwohl sie in der Entwicklung der Theorie eine wesentliche Rolle gespielt hat. Tatsächlich kann man die Elektron-Phonon-Wechselwirkung besser eliminieren. Ein allgemein anerkanntes Verfahren ist das von Eliashberg, das auf eine retardierte Paar-Wechselwirkung führt. Mit den Flussgleichungen haben wir eine instantane Wechselwirkung erhalten. Andreas Mielke (Europhys. Lett. 40 (1997) 195) hat nach beiden Verfahren die Sprungtemperatur berechnet und gefunden, dass nur Unterschiede von wenigen Prozenten auftreten.

Schließlich kommen wir noch einmal auf die Normalordnung aus Abschnitt 16.b zurück. Dort hatten wir die Normalordnung mittels Erwartungswerten $\langle c^\dagger c \rangle$ und $\langle cc^\dagger \rangle$ eingeführt. Tatsächlich haben wir (für $T = 0$) neben (vgl. (19.27-19.29))

$$\langle c_k^\dagger c_k \rangle = \langle c_{-k}^\dagger c_{-k} \rangle = v_k^2, \quad \langle c_k c_k^\dagger \rangle = \langle c_{-k} c_{-k}^\dagger \rangle = u_k^2 \quad (19.46)$$

auch anomale von 0 verschiedene Paar-Erwartungswerte

$$\langle c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \rangle = -\langle c_{-k}^\dagger c_k^\dagger \rangle = u_k v_k, \quad \langle c_{-k} c_k \rangle = -\langle c_k c_{-k} \rangle = u_k v_k. \quad (19.47)$$

Damit erhält man zum Beispiel nicht nur

$$c_k^\dagger c_k =: c_k^\dagger c_k + v_k^2, \quad c_{-k}^\dagger c_{-k} =: c_{-k}^\dagger c_{-k} + v_k^2 \quad (19.48)$$

sondern auch

$$c_k^\dagger c_{-k}^\dagger =: c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + u_k v_k, \quad c_{-k} c_k =: c_{-k} c_k + u_k v_k. \quad (19.49)$$

Für den Hamilton-Operator erhält man dann

$$\begin{aligned} H - \mu N &= : \sum_k (\epsilon_k - \mu) (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k} + v_k^2) - \frac{V}{N} \sum_{k,k'} (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + u_k v_k) (c_{-k'} c_{k'} + u_{k'} v_{k'}) : \\ &= 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N} \left(\sum_k u_k v_k \right)^2 \\ &+ \sum_k \left((\epsilon_k - \mu) : (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k}) : - \Delta : (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_{-k} c_k) : \right) + : O(c^\dagger c^\dagger c c) : \quad (19.50) \end{aligned}$$

Die Terme $: O(c^\dagger c^\dagger c c) :$ werden jetzt vernachlässigt. Der konstante Term ist die Grundzustandsenergie. Unter Berücksichtigung von $\epsilon_k - \mu = (u_k^2 - v_k^2) \hat{\epsilon}_k$, $\Delta = 2u_k v_k \hat{\epsilon}_k$ mit $\hat{\epsilon}_k = \sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}$ erhält man für die Anteile mit $c^\dagger c$, $c^\dagger c^\dagger$ und cc

$$\sum_k \hat{\epsilon}_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \quad (19.51)$$

wie in (19.32). Die Rekursions-Formeln (16.12 und 16.13) sind nun zu verallgemeinern zu

$$c_k^\dagger : A : = : c_k^\dagger A : + \sum_l \langle c_k^\dagger c_l \rangle : [c_l^\dagger, A]_\pm : + \sum_l \langle c_k^\dagger c_l^\dagger \rangle : [c_l, A]_\pm :, \quad (19.52)$$

$$c_k : A : = : c_k A : + \sum_l \langle c_k c_l^\dagger \rangle : [c_l, A]_\pm : + \sum_l \langle c_k c_l \rangle : [c_l^\dagger, A]_\pm :. \quad (19.53)$$

Dabei sind zuerst die Kommutatoren auszuwerten, so dass aus Monomen von A , die vom Grade m in c^\dagger und c sind, solche vom Grade $m - 1$ werden.

20 Elektrodynamik des Supraleiters

20.a Dauerströme

Landau hat folgendes Argument für Dauerströme gegeben: Er betrachtet einen Kristall der Masse M , der sich mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} bewege. Ein Elektronengas bewege sich im Beobachtungssystem mit Geschwindigkeit 0. Reibung wird nun die Geschwindigkeit des Kristalls verringern und gleichzeitig das Elektronengas beschleunigen. Dies geschieht durch Erzeugung von Anregungen im Elektronengas. Anregungsenergie und Impuls seien $E_{\mathbf{k}}$ und \mathbf{k} . Dann muss gelten

$$\frac{M\mathbf{v}^2}{2} = \frac{M\mathbf{v}'^2}{2} + E_{\mathbf{k}}, \quad M\mathbf{v} = M\mathbf{v}' + \hbar\mathbf{k}, \quad (20.1)$$

wobei, \mathbf{v}' die Geschwindigkeit nach der Anregung ist. Eliminiert man \mathbf{v}' , so bleibt

$$\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + E_{\mathbf{k}}. \quad (20.2)$$

Für eine makroskopische Masse kann der $1/M$ -Term vernachlässigt werden. Der niedrigste Wert von v , der diese Bedingung erfüllt, ist die kritische Geschwindigkeit

$$v_c = \text{Minimum von } \frac{E_{\mathbf{k}}}{\hbar k}. \quad (20.3)$$

Für den Supraleiter ist das etwa $\Delta/(\hbar k_F)$, da an der Fermikante die Anregungsenergie am geringsten ist.

20.b Meissner-Effekt und London-Gleichung

1935 wurde von F. und H. London phänomenologisch vorgeschlagen, dass in einem Supraleiter die Stromdichte durch

$$\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{A} \quad (20.4)$$

gegeben ist. Der Vorschlag erscheint zunächst ungewöhnlich, da man üblicherweise die Beziehung

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \quad (20.5)$$

mit der elektrischen Leitfähigkeit σ und der Feldstärke \mathbf{E} hat. Ausgangspunkt dafür ist folgende Überlegung. Falls kein Bremsmechanismus vorhanden ist, erwartet man nach Newton

$$d\mathbf{j}/dt = \rho\dot{\mathbf{v}} = n_s e^2/m\mathbf{E} = -n_s e^2/(mc)\dot{\mathbf{A}}, \quad (20.6)$$

wobei angenommen wird, dass man in einer Eichung arbeitet, in der das Potential $\Phi = 0$ ist. n_s ist dabei die Dichte der supraleitenden Ladungsträger. Integration nach der Zeit ergibt (20.4). Wir werden unten zeigen, dass diese Beziehung im supraleitenden Zustand besteht, wollen aber erst ihre Konsequenz betrachten. Hierbei ist auch zu beachten, dass London eine bestimmte Eichung vorausgesetzt haben, die insbesondere $\text{div}\mathbf{A} = 0$ und das Verschwinden der Normalkomponente von \mathbf{A} an einer Oberfläche, durch die kein Strom tritt, forderte. Aus (20.4) folgt

$$\text{rot}\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2} \mathbf{B} \quad (20.7)$$

und mit der Maxwell-Gleichung

$$\text{rot}\mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (20.8)$$

folgt

$$\text{rot rot}\mathbf{B}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad \text{oder} \quad -\Delta\mathbf{B}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{B}(\mathbf{r}). \quad (20.9)$$

Daraus folgt, dass es im Supraleiter kein homogenes Magnetfeld gibt. Vielmehr fällt ein an der Oberfläche eines Supraleiters parallel anliegendes Magnetfeld im Inneren exponentiell ab, $\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}(0)e^{-x/\lambda_L}$. Man bezeichnet λ_L als die Londonsche Eindringtiefe. Gleichzeitig bewirkt dieser exponentielle Abfall einen Strom an der Oberfläche, der das Magnetfeld abschirmt. Ein Supraleiter ist ein perfekter Diamagnet.

20.c Störungstheorie

Um die London-Gleichung mikroskopisch herzuleiten, müssen wir untersuchen, welchen Strom ein Vektor-Potential erzeugt. Dazu führen wir eine Störungstheorie in \mathbf{A} durch und betrachten zunächst das generelle Schema der Störungstheorie. Sei

$$H(t) = H_0 + H'(t) \quad (20.10)$$

der Hamilton-Operator H_0 mit einer zeitabhängigen Störung $H'(t)$. Wir bestimmen nun die Veränderung der Dichtematrix ρ auf Grund dieser Störung in erster Ordnung in H' . Wir setzen an

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho'(t). \quad (20.11)$$

Dabei beschreibe ρ_0 einen Gleichgewichtszustand zu H_0 . Wir betrachten nun die von-Neumann-Gleichung

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [H(t), \rho(t)], \quad (20.12)$$

$$i\hbar\dot{\rho}'(t) = [H_0, \rho'(t)] + [H'(t), \rho_0]. \quad (20.13)$$

Beim Übergang von der ersten zur zweiten Zeile haben wir berücksichtigt, dass ρ_0 mit H_0 kommutiert, da ρ_0 ein Gleichgewichts-Ensemble zu H_0 beschreibt. Weiter haben wir den Kommutator $[H'(t), \rho'(t)]$ vernachlässigt, da er bereits von zweiter Ordnung in der Störung ist. Wir lösen nun (20.13). Dazu führen wir die Heisenberg-Operatoren ein (sie lösen die homogene Gleichung für ρ' .)

$$\hat{\rho}'(t) = e^{iH_0 t/\hbar} \rho'(t) e^{-iH_0 t/\hbar}, \quad \hat{H}'(t) = e^{iH_0 t/\hbar} H'(t) e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (20.14)$$

Mit diesen Operatoren reduziert sich Gleichung (20.13) auf

$$i\hbar\dot{\hat{\rho}}'(t) = -[H_0, \hat{\rho}'] + i\hbar e^{iH_0 t/\hbar} \dot{\rho}'(t) e^{-iH_0 t/\hbar} = [\hat{H}'(t), \rho_0] \quad (20.15)$$

mit der Lösung

$$\hat{\rho}'(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [\hat{H}'(t'), \rho_0], \quad (20.16)$$

$$\rho'(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-iH_0 t'/\hbar} [\hat{H}'(t'), \rho_0] e^{iH_0 t'/\hbar}. \quad (20.17)$$

Für den Erwartungswert eines Operators C zur Zeit t ergibt das

$$\begin{aligned} \langle C \rangle(t) &= \langle C \rangle_0(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{tr}(C e^{-iH_0 t'/\hbar} [\hat{H}'(t'), \rho_0] e^{iH_0 t'/\hbar}) \\ &= \langle C \rangle_0(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{tr}(\hat{C}(t) [\hat{H}'(t'), \rho_0]) \\ &= \langle C \rangle_0(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{C}(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0, \end{aligned} \quad (20.18)$$

wobei der Index $_0$ angibt, dass die Auswertung mit der Gleichgewichtsgesamtheit ρ_0 erfolgt.

20.d Herleitung der London-Gleichung

Wir wollen dies nun auf den Strom in einem Supraleiter anwenden. Wir gehen aus von einem zeitabhängigen Vektorpotential \mathbf{A} und fragen nach dem daraus resultierenden Strom \mathbf{j} .

In (16.20) hatten wir für die Ladungsdichte die Darstellung

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{e}{V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}'s} \quad (20.19)$$

gefunden, wobei wir jetzt die Ladung e mit berücksichtigt haben. Für die Stromdichte erhält man zunächst

$$\mathbf{j}_0(\mathbf{r}) = \frac{e\hbar}{mV_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s} \frac{\mathbf{k} + \mathbf{k}'}{2} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}'s}. \quad (20.20)$$

Fügt man noch ein Vektorpotential hinzu, so erhält man den zusätzlichen Term

$$\mathbf{j}_A(\mathbf{r}) = -\frac{e}{mc} \rho(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (20.21)$$

Wir wollen nun betrachten, was ein zeitabhängiges Vektorpotential zum Strom beiträgt. In erster Ordnung in \mathbf{A} erhalten wir zunächst den Beitrag

$$\langle \mathbf{j}_A(\mathbf{r}) \rangle_A = -\frac{e^2 n}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (20.22)$$

Ein weiterer Beitrag ergibt sich aus der ersten Ordnung Störungsrechnung. Wir setzen dazu $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_0 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ an und finden die Störung

$$H' = -\frac{1}{c} \int d^3 r \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{e\hbar}{mc} \sum_{\mathbf{k}, s} (\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}) \cdot \mathbf{A}_0 c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}. \quad (20.23)$$

Damit erhalten wir für \mathbf{j}_0

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \rangle_A &= i \frac{e^2 \hbar}{m^2 c V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s, s'} \frac{\mathbf{k}'' + \mathbf{k}'}{2} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'') \cdot \mathbf{r}} ((\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}) \cdot \mathbf{A}_0) \\ &\times \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{c}_{\mathbf{k}''s'}^\dagger(t) \hat{c}_{\mathbf{k}'s'}(t), \hat{c}_{\mathbf{k}s}^\dagger(t') \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t')] \rangle_0, \end{aligned} \quad (20.24)$$

wobei angenommen wird, dass für $\mathbf{A} = 0$ kein Strom fließt, also $\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \rangle_0 = 0$. Wegen der Translationsinvarianz erhält man nur Beiträge für $\mathbf{k}'' + \mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{k} - \mathbf{q}$. Das erlaubt $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}' - \mathbf{q}$ zu setzen. Damit reduziert sich $\frac{\mathbf{k}'' + \mathbf{k}'}{2} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'') \cdot \mathbf{r}} = (\mathbf{k}' - \frac{\mathbf{q}}{2}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$. Bei der Berechnung des Kommutators ist nun zu faktorisieren. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten zu kontrahieren und zwar mit a) $\mathbf{k}'' = \mathbf{k} - \mathbf{q}$, $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, $s' = s$ und b) $\mathbf{k}'' = -\mathbf{k}$, $\mathbf{k}' = \mathbf{q} - \mathbf{k}$, $s' = -s$. Damit bleibt dann

$$\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \rangle_A = i \frac{e^2 \hbar}{m^2 c V_P} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}, s} (\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}) ((\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}) \cdot \mathbf{A}_0) \int_{-\infty}^t dt' (K_1 + K_2), \quad (20.25)$$

$$\begin{aligned} K_1 &= \langle \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}^\dagger(t) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t') \rangle_0 \langle \hat{c}_{\mathbf{k}s}(t) \hat{c}_{\mathbf{k}s}^\dagger(t') \rangle_0 \\ &- \langle \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t') \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}^\dagger(t) \rangle_0 \langle \hat{c}_{\mathbf{k}s}^\dagger(t') \hat{c}_{\mathbf{k}s}(t) \rangle_0, \end{aligned} \quad (20.26)$$

$$\begin{aligned} K_2 &= \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}-s}^\dagger(t) \hat{c}_{\mathbf{k}s}^\dagger(t') \rangle_0 \langle \hat{c}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-s}(t) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t') \rangle_0 \\ &- \langle \hat{c}_{\mathbf{k}s}^\dagger(t') \hat{c}_{-\mathbf{k}-s}^\dagger(t) \rangle_0 \langle \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t') \hat{c}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-s}(t) \rangle_0. \end{aligned} \quad (20.27)$$

Zur weiteren Auswertung gehen wir auf die Operatoren α , (19.26, 19.27) über und erhalten zum Beispiel

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(t) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(t') \rangle_0 = \langle (u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}(t) + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger(t)) (u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger(t') + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}(t')) \rangle_0. \quad (20.28)$$

Mit

$$\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger(t) = e^{i\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} t / \hbar} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}(t) = e^{-i\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} t / \hbar} \alpha_{\mathbf{k}}, \quad \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \quad (20.29)$$

folgt dann

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}s}(t) \hat{c}_{\mathbf{k}s}^\dagger(t') \rangle_0 = u_{\mathbf{k}}^2 (1 - f(\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})) e^{i\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}(t'-t)/\hbar} + v_{\mathbf{k}}^2 f(\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}) e^{i\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}(t-t')/\hbar}. \quad (20.30)$$

Wir führen die Abkürzungen

$$u = u_{\mathbf{k}}, \quad u' = u_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \quad v = v_{\mathbf{k}}, \quad v' = v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \quad (20.31)$$

$$f = f(\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}), \quad f' = f(\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}), \quad e_{\pm} = e^{\pm i\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}(t'-t)/\hbar}, \quad e'_{\pm} = e^{\pm i\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t'-t)/\hbar} \quad (20.32)$$

ein. Dann folgt

$$\begin{aligned} K_1 &= (u'^2 f' e'_- + v'^2 (1-f') e'_+) (u^2 (1-f) e_+ + v^2 f e_-) \\ &\quad - (u'^2 (1-f') e'_- + v'^2 f' e'_+) (u^2 f e_+ + v^2 (1-f) e_-), \end{aligned} \quad (20.33)$$

$$\begin{aligned} K_2 &= uvu'v' (f e_- - (1-f) e_+) ((1-f') e'_+ - f' e'_-) \\ &\quad - uvu'v' ((1-f) e_- - f e_+) (f' e'_+ - (1-f') e'_-), \end{aligned} \quad (20.34)$$

wobei beide Spineinstellungen das gleiche Ergebnis liefern. Geordnet nach den Faktoren e und e' erhält man

$$K_1 + K_2 = (e_+ e'_+ uv' + e_- e'_- u'v) (uv' - u'v) (1-f-f') + (e_+ e'_- uu' - e_- e'_+ vv') (uu' + vv') (f' - f). \quad (20.35)$$

Berücksichtigt man das Zeitintegral ($w, w' = \pm 1$)

$$i \int_{-\infty}^t dt' e_w e'_{w'} = i \int_{-\infty}^t dt' e^{i w \hat{\epsilon}_k (t-t')/\hbar + i w' \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (t-t')/\hbar} = \frac{\hbar}{w \hat{\epsilon}_k + w' \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}, \quad (20.36)$$

wobei wir wieder angenommen haben, dass die Störung langsam eingeschaltet wird, so folgt schließlich

$$\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' (K_1 + K_2) = \frac{(u'v - uv')^2 (1-f-f')}{\hat{\epsilon}_k + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} + \frac{(uu' + vv')^2 (f' - f)}{\hat{\epsilon}_k - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \quad (20.37)$$

Wir betrachten nun den Limes $q \rightarrow 0$. In diesem Limes wird $u' = u$, $v' = v$, so dass der erste Term verschwindet, da der Nenner mindestens gleich 2Δ ist. Beim zweiten Term ist $uu' + vv' = 1$ zu setzen und $\frac{f' - f}{\hat{\epsilon}_k - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}$ wird durch die Ableitung $-\frac{df}{d\hat{\epsilon}}$ ersetzt.

$$\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' (K_1 + K_2) = -\frac{df}{d\hat{\epsilon}}. \quad (20.38)$$

Damit finden wir schließlich

$$\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \rangle_A = \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c V_P} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}, s} \mathbf{k} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0) \left(-\frac{df}{d\hat{\epsilon}} \right). \quad (20.39)$$

Mitteln wir nun über alle Richtungen, dann wird $\mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0)$ ersetzt durch $\mathbf{A}_0 k^2/3$, und wir erhalten

$$\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \rangle_A = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty dk k^4 \left(-\frac{df}{d\hat{\epsilon}_k} \right). \quad (20.40)$$

Damit finden wir

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{r}) \rangle_A = \langle \mathbf{j}_A(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \rangle = -\frac{e^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) n_s \quad (20.41)$$

mit

$$n_s = n - \frac{\hbar^2}{m} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \int dk k^4 \left(-\frac{df}{d\hat{\epsilon}_k} \right), \quad (20.42)$$

wobei man n_s als die supraleitende Dichte bezeichnet. Im supraleitenden Zustand trägt der zweite Term bei der Temperatur 0 nicht bei, da f für alle k -Werte gleich 0 ist. Im normalleitenden Zustand setzt man $|\epsilon - \mu|$ für $\hat{\epsilon}$ ein oder, da die Ableitung von f symmetrisch im Argument $\epsilon - \mu$ ist, auch einfach $\epsilon - \mu$. Dann findet man mit $\frac{df}{d\epsilon} = \frac{df}{dk} \frac{m}{\hbar^2} k$

$$n_s = n - \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 = n - n = 0. \quad (20.43)$$

Im normalleitenden Zustand heben sich also die Beiträge weg. Tatsächlich fällt n_s von der Temperatur 0 bis zur Sprungtemperatur T_c monoton auf 0 ab. Die Londonsche Eindringtiefe ergibt sich dann zu

$$\lambda_L = \frac{c}{e} \sqrt{\frac{m}{4\pi n_s}}. \quad (20.44)$$

21 Hubbard-Modell

Bisher haben wir für die Elektronen das Bändermodell zu Grunde gelegt. Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen haben wir nur als Hartree-Fock-Potential wie auch für die dielektrischen Eigenschaften im Rahmen der RPA berücksichtigt (Abschnitt 16 und 17). Tatsächlich hat die abstoßende Wechselwirkung zwischen den Elektronen weitreichendere Konsequenzen, da sie zu starken Korrelationen (oder Anti-Korrelationen) im Festkörper führt. Dieses Gebiet der starken Korrelationen ist zur Zeit ein wichtiges Forschungsgebiet in der Festkörperphysik.

J.Hubbard (und zur gleichen Zeit unabhängig auch J. Kanamori und M.C. Gutzwiller) haben 1963 ein Modell zur Beschreibung von stark korrelierten elektronischen Systemen vorgeschlagen, das heute Hubbard-Modell genannt wird. Sie nehmen an, dass ein wesentlicher Effekt der Coulomb-Wechselwirkung in einer Abstossung von zwei Elektronen am gleichen Gitterplatz besteht. Sie fügen daher zu dem Einteilchen-tight-binding Hamilton-Operator

$$H_{\text{kin}} = - \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, s} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} c_s^\dagger(\mathbf{R}_1) c_s(\mathbf{R}_2) \quad (21.1)$$

noch eine Abstoßung hinzu,

$$H_{\text{int}} = U \sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R}) n_\downarrow(\mathbf{R}) \quad (21.2)$$

mit den Teilchenzahloperatoren

$$n_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{R}) = c_{\uparrow, \downarrow}^\dagger(\mathbf{R}) c_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{R}) \quad (21.3)$$

am Ort \mathbf{R} hinzu.

21.a Mott-Metall-Isolator-Übergang

Dieses Modell wurde zunächst eingeführt, um zu verstehen, dass ein System mit einer ungeraden Anzahl von Leitungselektronen pro Elementarzelle ein Isolator sein kann. Man würde erwarten, dass solch ein System ein Metall ist, da die Bänder auf Grund der Kramers-Entartung jeweils zweifach entartet sind (siehe Abschnitt 12.d). Daher ist das oberste Band dann nur halb gefüllt und sollte daher metallisch sein. Der Grund für das isolierende Verhalten liegt in Folgendem: Wir nehmen an, das Band sei halb gefüllt. Dann werden sich bei starker Abstoßung U die Elektronen aus dem Weg gehen. Jeder Gitterplatz ist einfach besetzt. Nimmt man nun ein Elektron weg, so wird man eine typische Bandenergie der Größenordnung $\pm tz$ gewinnen, wobei z die Koordinationszahl, also die Anzahl der nächsten Nachbarn ist. Fügt man dagegen ein Elektron hinzu, so muss man nicht nur die Energie $\pm tz$ aufwenden, sondern zusätzlich noch die Energie U , da das Elektron sich nur auf an einem schon von einem Elektron besetzten Ort bewegen kann. Damit erhält man für die Valenz-Elektronen, grob gesagt, ein Band von $-tz$ bis $+tz$, für die Leitungselektronen dagegen von $U - tz$ bis $U + tz$. Falls $U > 2tz$, tritt eine Energielücke auf. Man spricht daher von dem unteren und dem oberen Hubbard-Band und spricht von einem Mott-Isolator.

21.b Pauli-Paramagnetismus und Stoner-Kriterium

Wir wollen uns nun ansehen, wie das System auf ein äußeres Magnetfeld reagiert. Dazu schreiben wir den Hamilton-Operator mit einem äußeren Feld

$$H - \mu\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{k}s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + U \sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R}) n_\downarrow(\mathbf{R}) - \mu_B B \sum_{\mathbf{R}, s} s n_s(\mathbf{R}). \quad (21.4)$$

Dabei haben wir den g -Faktor gleich 2 gesetzt. Wir erwarten, dass bei Anlegen des äußeren Feldes die Elektronen mit Spin nach oben und die mit Spin nach unten unterschiedliche Besetzung haben und setzen daher unterschiedliche Erwartungswerte n_\uparrow und n_\downarrow an. Für den Erwartungswert des Hamilton-Operators erhalten wir

$$\langle H - \mu\mathcal{N} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \mu_B B s) n_{\mathbf{k}s} + U N_s n_\uparrow n_\downarrow \quad (21.5)$$

mit

$$n_s = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k}s}. \quad (21.6)$$

Durch Ableiten des großkanonischen Potentials erhalten wir

$$\frac{dG}{dn_{\mathbf{k}s}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \mu_B B s + U n_{-s} - T \frac{dS}{dn_{\mathbf{k}s}} \quad (21.7)$$

woraus wieder

$$n_{\mathbf{k}s} = f(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \mu_B B s + U n_{-s}) \quad (21.8)$$

folgt. Wir betrachten nun die Magnetisierung

$$M = \mu_B \frac{N_s}{V_P} (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) \quad (21.9)$$

und die Suszeptibilität

$$\chi = \frac{dM}{dB} = \frac{\mu_B}{V_P} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{ds n_{\mathbf{k},s}}{dB} = \frac{\mu_B}{V_P} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{df}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \left(-\mu_B + U s \frac{dn_{-s}}{dB} \right). \quad (21.10)$$

Ausgehend vom nicht magnetisierten Zustand lässt sich das in

$$\left(1 + \frac{U}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{df}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \chi = \frac{2\mu_B^2}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{df}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \quad (21.11)$$

umformen. Man beobachtet, dass sich für niedrige Temperaturen die Summe

$$-\frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} \frac{df}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{2} D(\epsilon_F) \quad (21.12)$$

durch die Zustandsdichte an der Fermikante ausdrücken lässt. Damit folgt für die Suszeptibilität mit $\hat{U} = V_P U / N_s = V_z U$

$$\chi = \frac{\mu_B^2 D(\epsilon_F)}{1 - \frac{1}{2} \hat{U} D(\epsilon_F)} \quad (21.13)$$

Siehe Hunklinger-Enss: Pauli-Paramagnetismus Abschnitt 7.2 S. 211-212 für $U = 0$. Solange

$$\frac{1}{2} \hat{U} D(\epsilon_F) < 1, \quad (21.14)$$

ist das System paramagnetisch. Wenn dieses nach Stoner benannte Kriterium nicht erfüllt ist, das heißt bei größerem U oder größerer Zustandsdichte, ist die Lösung $M = 0$ bei $B = 0$ nicht stabil. Das System wird ferromagnetisch. Voraussetzung ist, dass es nicht noch leichter in einen anderen Ordnungszustand übergeht.

21.c Antiferromagnetismus

Tatsächlich zeigt das Hubbard-Modell eine Reihe weiterer interessanter Eigenschaften. Eine dieser Eigenschaften ist, dass es bei halber Füllung antiferromagnetische Ordnung aufweist, falls es sich um ein paares Gitter handelt, d.h. falls es sich in zwei Untergitter A und B aufteilen lässt, so dass alle nächsten Nachbarn von Gitterpunkten aus A Gitterpunkte in B sind und umgekehrt. Ein quadratisches Gitter hat solch eine Eigenschaft. Markieren wir die Gitterpunkte abwechselnd weiß und schwarz wie bei einem Schachbrett, so haben wir die beiden Untergitter gekennzeichnet. Auch ein einfach kubisches Gitter und ein kubisch-raumzentriertes Gitter haben diese Eigenschaft. Dagegen hat ein Dreiecksgitter und ein kubisch flächenzentriertes Gitter diese Eigenschaft nicht.

Wir wollen diesen Antiferromagnetismus jetzt betrachten. In diesem Antiferromagneten sind abwechselnd an den Gitterpunkten mehr Spins nach oben oder nach unten. Wir setzen daher an

$$\langle n_s(\mathbf{R}) \rangle = \frac{1}{2}(n + m s e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}}), \quad (21.15)$$

wobei der Wellenvektor \mathbf{q}_0 so gewählt ist, dass

$$e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}} = \begin{cases} 1 & \mathbf{R} \in A, \\ -1 & \mathbf{R} \in B \end{cases} \quad (21.16)$$

gilt. Für ein quadratisches Gitter mit Gitterkonstante a gilt $\mathbf{q}_0 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, für ein einfaches kubisches Gitter (sc) $\mathbf{q}_0 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ und für ein raumzentriertes kubisches Gitter (bcc) $\mathbf{q}_0 = (\frac{2\pi}{a}, 0, 0)$. Damit formen wir um

$$\begin{aligned} n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}) &= : (n_\uparrow(\mathbf{R}) + \frac{1}{2}(n + m e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}}))(n_\downarrow(\mathbf{R}) + \frac{1}{2}(n - m e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}})) : \\ &= \frac{1}{4}(n^2 - m^2) + \frac{1}{2} \sum_s (n - m s e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}}) : n_s(\mathbf{R}) : + : n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}) : \end{aligned} \quad (21.17)$$

Beachten wir noch, dass

$$\sum_{\mathbf{R}} c^\dagger(\mathbf{R})c(\mathbf{R})e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}_0) \cdot \mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}_0, 0} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_0}, \quad (21.18)$$

dann erhalten wir für den Hamilton-Operator bei Vernachlässigung der $: nn :$ -Terme

$$H - \mu \mathcal{N} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}, s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \frac{U n}{2}) : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} : - \frac{U m}{2} \sum_{\mathbf{k}, s} s : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_0 s} :, \quad (21.19)$$

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}, s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) n_{\mathbf{k}s} + \frac{U N_s}{4} (n^2 - m^2) \quad (21.20)$$

mit

$$n = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{R}, s} \langle n_s(\mathbf{R}) \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, s} \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \rangle, \quad m = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{R}, s} s e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}} \langle n_s(\mathbf{R}) \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, s} s \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_0 s} \rangle. \quad (21.21)$$

Bevor wir diese Gleichungen lösen, beachten wir, dass wir nur Hüpf-Matrix-Elemente zwischen den Untergittern A und B haben. Daraus folgt für den Einteilchen-Hamilton-Operator

$$- \sum t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} c^\dagger(\mathbf{R}_1) c(\mathbf{R}_2) = \sum \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (21.22)$$

mit

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{R}} t_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \quad (21.23)$$

Da zwischen verschiedenen Untergittern $e^{i\mathbf{q}_0 \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)} = -1$, folgt dann

$$\epsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_0} = -\epsilon_{\mathbf{k}}. \quad (21.24)$$

Wir zerlegen nun die Brillouinzone in zwei Anteile, so dass in einem der Vektor \mathbf{k} , im anderen $\mathbf{k} + \mathbf{q}_0$ liegt und bezeichnen die Summe über einen Teil mit einem Strich. Tatsächlich haben wir beim Eintreten des Antiferromagnetismus eine Gitterzelle doppelter Größe, da jetzt in einer Gitterzelle sowohl ein Gitterpunkt des Untergitters A wie auch des Untergitters B liegt. Dieser Verdoppelung der Wigner-Seitz-Zelle entspricht eine Halbierung der Brillouinzone. Wir können dann den Hamilton-Operator in

der Form

$$\begin{aligned}
H - \mu\mathcal{N} = E_0 &+ \left(\frac{Un}{2} - \mu\right) \sum_{\mathbf{k},s}^{\prime} : c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}s} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s} : \\
&+ \sum_{\mathbf{k},s}^{\prime} \epsilon_{\mathbf{k}} : c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}s} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s} : \\
&- \frac{Um}{2} \sum_{\mathbf{k},s}^{\prime} s : c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}s} :
\end{aligned} \tag{21.25}$$

schreiben. Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung bilden wir die Kommutatoren

$$[H - \mu\mathcal{N}, c_{\mathbf{k}s}^{\dagger}] = \left(\frac{Un}{2} - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}\right) c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} - \frac{Ums}{2} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^{\dagger}, \tag{21.26}$$

$$[H - \mu\mathcal{N}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^{\dagger}] = -\frac{Ums}{2} c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} + \left(\frac{Un}{2} - \mu - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}\right) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^{\dagger}. \tag{21.27}$$

Eigenlösungen

$$[H - \mu\mathcal{N}, \alpha_{\mathbf{k}s}^{\dagger}] = \left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \alpha_{\mathbf{k}s}^{\dagger} \tag{21.28}$$

kann man mit dem Ansatz

$$\alpha_{\mathbf{k}s}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} + s v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^{\dagger} \tag{21.29}$$

finden. Mit diesem Ansatz sind die beiden Gleichungen

$$\epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} - \frac{Um}{2} v_{\mathbf{k}} = \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}, \tag{21.30}$$

$$-\frac{Um}{2} u_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \tag{21.31}$$

zu erfüllen. Multiplizieren wir die erste Gleichung mit $u_{\mathbf{k}}$, die zweite mit $v_{\mathbf{k}}$ und addieren und subtrahieren wir die Gleichungen, so erhalten wir, wenn wir auch noch die Normierung

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1 \tag{21.32}$$

fordern,

$$\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \epsilon_{\mathbf{k}} - Um u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}, \tag{21.33}$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tag{21.34}$$

Multiplizieren wir die Gleichung (21.30) mit $v_{\mathbf{k}}$ und (21.31) mit $u_{\mathbf{k}}$, dann folgt

$$-\frac{Um}{2} = 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}. \tag{21.35}$$

Aus diesen drei Gleichungen erhält man dann

$$u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = -\frac{Um}{2\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\left(\frac{Um}{2}\right)^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}. \tag{21.36}$$

Eine zweite Eigenlösung ergibt sich mit

$$\beta_{\mathbf{k}s}^{\dagger} = -s v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^{\dagger} \tag{21.37}$$

zu

$$[H - \mu\mathcal{N}, \beta_{\mathbf{k}s}^{\dagger}] = \left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \beta_{\mathbf{k}s}^{\dagger}. \tag{21.38}$$

Man hat also zwei Arten von Anregungen, die durch eine Lücke $U|m|$ von einander getrennt sind, da für die α -Anregungen die Einteilchenenergien größer gleich $\frac{Un}{2} - \mu + \frac{U|m|}{2}$ sind, während sie für die β -Anregungen kleiner gleich $\frac{Un}{2} - \mu - \frac{U|m|}{2}$ sind. Man überzeugt sich leicht davon, dass die Operatoren $\alpha^\dagger, \alpha, \beta^\dagger, \beta$ den bekannten Anti-Kommutator-Beziehungen für Fermionen genügen. Den Hamilton-Operator können wir dann

$$H - \mu\mathcal{N} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}s} \left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \right) : \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}s} + \sum_{\mathbf{k}s} \left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \right) : \beta_{\mathbf{k}s}^\dagger \beta_{\mathbf{k}s} : \dots \quad (21.39)$$

schreiben. Man erhält für die Erwartungswerte

$$\langle \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'s'} \rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{s,s'} f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right), \quad \langle \beta_{\mathbf{k}s}^\dagger \beta_{\mathbf{k}'s'} \rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{s,s'} f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right). \quad (21.40)$$

Es bleibt nun die Selbstkonsistenz-Gleichung (21.21) für m

$$m = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}s} s \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \rangle, \quad (21.41)$$

zu lösen. Zunächst drücken wir die Erzeuger c^\dagger durch α^\dagger und β^\dagger aus,

$$c_{\mathbf{k}s}^\dagger = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger - s v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^\dagger = s v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger + u_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}s}^\dagger. \quad (21.42)$$

Damit folgt dann für die Erwartungswerte

$$\langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \rangle = u_{\mathbf{k}}^2 f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) + v_{\mathbf{k}}^2 f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right), \quad (21.43)$$

$$\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s} \rangle = v_{\mathbf{k}}^2 f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) + u_{\mathbf{k}}^2 f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right), \quad (21.44)$$

$$\langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s} \rangle = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \rangle = s u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) - f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \right) \quad (21.45)$$

und

$$n = \frac{2}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \left(f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) + f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \right), \quad (21.46)$$

$$m = \frac{4}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) - f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \right) \quad (21.47)$$

$$= \frac{Um}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \left(f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) - f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \right) \quad (21.48)$$

Man sieht, dass $m = 0$ immer eine Lösung ist. Für $\mu = Un/2$ erreicht man halbe Besetzung, das heißt im Mittel ist jeder Gitterplatz einfach besetzt. Dann ergibt sich für halbe Füllung

$$m = \frac{Um}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \left(f(-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}) - f(\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}) \right) = \frac{Um}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \frac{1 - e^{-\beta \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}}{1 + e^{-\beta \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}}. \quad (21.49)$$

Dies ist die gleiche Gleichung wie für die Lücke in der Supraleitung (19.41), wobei m durch Δ und V durch U ersetzt ist. Man erhält also bei halber Füllung bei tiefen Temperaturen stets Antiferromagnetismus. An die Stelle von $\hbar\omega_D$ tritt dann etwa die halbe Breite W des Elektronenbandes in (19.42). Unter der vereinfachten Annahme, dass die Zustandsdichte D im Band konstant ist, folgt aus

$$V_P \int_{-W}^W D(\epsilon) d\epsilon = 2N_s \quad \rightarrow \quad V_z W D = 1. \quad (21.50)$$

Damit ergibt sich aus (19.44) für die Übergangstemperatur zum Antiferromagnetismus unter Berücksichtigung, dass in (21.49) nur über die eine Hälfte der \mathbf{k} summiert wird, während in (19.41) über alle summiert wird,

$$k_{\text{B}}T_{\text{c}} = 1.14W e^{-2/(\dot{U}D)} = 1.14W e^{-2W/U}. \quad (21.51)$$

Die Übergangs-Temperatur wächst also mit U an.

Allerdings ist die Situation anders, wenn man die halbe Füllung verlässt. In diesem Fall hat man für den Grundzustand, der gerade noch nicht antiferromagnetisch ist,

$$n = 1 + \delta V_{\text{z}} D(0) \text{ mit } \mu = \frac{Un}{2} + \delta \quad (21.52)$$

wobei D die Zustandsdichte ohne Wechselwirkung ist. Im Grenzfall $m \rightarrow 0$ erhält man dann

$$1 = \frac{U}{4} V_{\text{z}} \int_{|\delta|}^W d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\epsilon} = \frac{UV_{\text{z}}D}{4} \ln \frac{W}{|\delta|}, \quad (21.53)$$

wobei W von der Größenordnung der halben Bandbreite ist. Aus diesen beiden Gleichungen ergibt sich dann, dass der Antiferromagnetismus bei

$$n = 1 \pm e^{-4W/U} \quad (21.54)$$

verschwindet. Er ist also nur in der Umgebung halber Füllung zu erwarten.

22 Das t - J -Modell

Im Grenzfall großen U s wird die Anzahl der Doppelbesetzungen an einem Gitterplatz minimal sein. Daher wird für $n < 1$ keine Doppelbesetzung auftreten, bei $n > 1$ hat man Doppelbesetzung, aber kein Gitterplatz wird leer bleiben. Bei $n = 1$ wird jeder Gitterplatz genau einmal besetzt sein. Die zusätzlichen Elektronen werden sich dann auf dem Hintergrund dieser Einfachbesetzung bewegen. Tatsächlich gibt es natürlich virtuelle Anregungen, bei denen die Doppelbesetzung höher ist. Dabei springt ein Elektron auf einen bereits einfach besetzten Platz, unmittelbar danach springt dieses oder das andere Elektron zurück. Springt das andere zurück, so bedeutet das einen Austausch zwischen den Spins der benachbarten Elektronen und damit eine effektive Spin-Spin-Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins. Diese wollen wir nun berechnen. Dazu teilen wir den Hamilton-Operator in drei Anteile,

$$H = H_0 + H_+ + H_- + H_{\text{int}}. \quad (22.1)$$

Dabei ist H_0 der Anteil der kinetischen Energie, bei dem sich die Anzahl der Doppelbesetzungen nicht ändert, H_+ erhöht die Anzahl der Doppelbesetzungen um 1, H_- vermindert sie um 1. Hierzu zerlegen wir

$$c_s^\dagger(\mathbf{R}) = e_s^\dagger(\mathbf{R}) + d_s^\dagger(\mathbf{R}), \quad e_s^\dagger(\mathbf{R}) = (1 - n_{-s}(\mathbf{R}))c_s^\dagger(\mathbf{R}), \quad d_s^\dagger(\mathbf{R}) = n_{-s}(\mathbf{R})c_s^\dagger(\mathbf{R}). \quad (22.2)$$

e^\dagger erzeugt ein Elektron an einem leeren Platz, während d^\dagger ein Elektron an einem Platz erzeugt, der schon mit einem Elektron mit umgekehrter Spinrichtung besetzt ist.

$$H_0 = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} (e_s^\dagger(\mathbf{R})e_s(\mathbf{R}') + d_s^\dagger(\mathbf{R})d_s(\mathbf{R}')), \quad (22.3)$$

$$H_+ = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} d_s^\dagger(\mathbf{R})e_s(\mathbf{R}'), \quad (22.4)$$

$$H_- = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} e_s^\dagger(\mathbf{R})d_s(\mathbf{R}'), \quad (22.5)$$

$$H_{\text{int}} = U \sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}). \quad (22.6)$$

Nun wollen wir H_+ und H_- eliminieren. Wir führen wieder eine unitäre Transformation durch

$$H_{\text{eff}} = e^{-S} H e^S \quad (22.7)$$

mit

$$S = S_+ - S_-, \quad S_- = S_+^\dagger \quad (22.8)$$

Wir nehmen an, dass S von Ordnung t/U ist. Dann erhalten wir Beiträge in Ordnung U , t und t^2/U , wobei wir in letzterer Ordnung nur die Beiträge mitnehmen, die die Anzahl der Doppelbesetzungen erhalten,

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= H_{\text{int}} + H_0 + (H_+ + [H_{\text{int}}, S_+]) + (H_- - [H_{\text{int}}, S_-]) \\ &+ ([H_-, S_+] - \frac{1}{2}[[H_{\text{int}}, S_-], S_+] + (-[H_+, S_-] - \frac{1}{2}[[H_{\text{int}}, S_+], S_-])). \end{aligned} \quad (22.9)$$

Mit der Forderung

$$H_+ + [H_{\text{int}}, S_+] = 0, \quad H_- - [H_{\text{int}}, S_-] = 0 \quad (22.10)$$

reduziert sich H_{eff} auf

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{int}} + H_0 + \frac{1}{2}([H_-, S_+] - [H_+, S_-]). \quad (22.11)$$

Wir beobachten, dass

$$[H_{\text{int}}, H_+] = UH_+, \quad [H_{\text{int}}, H_-] = -UH_-, \quad (22.12)$$

da H_{int} gerade U mal der Doppelbesetzung ist. Daher wird (22.10) mit

$$S_+ = -\frac{1}{U}H_+, \quad S_- = -\frac{1}{U}H_- \quad (22.13)$$

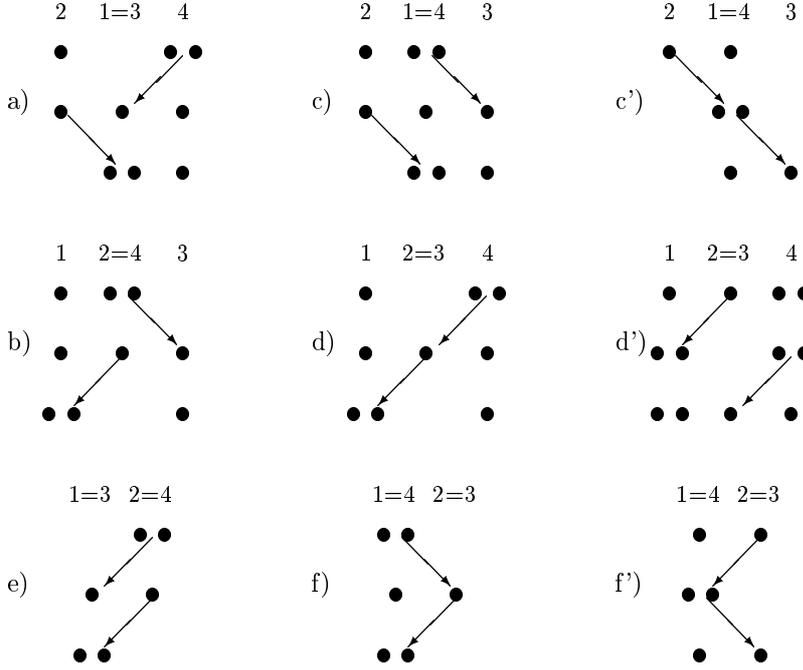
gelöst und wir erhalten

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{int}} + H_0 + \frac{1}{U}[H_+, H_-]. \quad (22.14)$$

Der Kommutator

$$[H_+, H_-] = \sum t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_4} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3) d_{s'}(\mathbf{R}_4)] \quad (22.15)$$

enthält verschiedene Beiträge. Wenn alle vier Orte von einander verschieden sind, verschwindet der Kommutator. Es bleiben Beiträge mit zwei verschiedenen Orten und drei verschiedenen Orten, wobei wir davon ausgehen, dass wir nur Beiträge mit $\mathbf{R}_2 \neq \mathbf{R}_1$ und $\mathbf{R}_4 \neq \mathbf{R}_3$ haben. Wir wollen diese kurz aufführen:



Dabei erhalten wir auf Grund des Kommutators $[d^\dagger e, e^\dagger d] = d^\dagger e e^\dagger d - e^\dagger d d^\dagger e$ jeweils zwei Beiträge, wobei in drei Fällen aber einer davon verschwindet.

a) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1$ und die beiden anderen Orte verschieden davon beschreibt einen Prozess bei dem von dem einfach besetzten Ort \mathbf{R}_2 und dem doppelt besetzten Ort \mathbf{R}_4 je ein Elektron auf den bisher unbesetzten Ort \mathbf{R}_1 springen. Da es energetisch ungünstig ist, wenn unbesetzte Plätze simultan mit doppelt besetzten bestehen, ist dieser Prozess sehr unwahrscheinlich.

b) $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_2$. Dies ist der umgekehrte Prozess. Die Elektronen des doppelt-besetzten Punktes \mathbf{R}_2 springen auf den schon einfach besetzten Ort \mathbf{R}_1 und den unbesetzten Ort \mathbf{R}_3 . Auch hier liegt ein leerer Platz neben einem mit doppelter Besetzung, was ebenfalls unwahrscheinlich ist.

c) $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_1$ und \mathbf{R}_2 und \mathbf{R}_3 verschieden davon. Dieser Beitrag liefert

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, s, s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3) d_{s'}(\mathbf{R}_1)] \\ &= - \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, s, s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3) e_s(\mathbf{R}_2) [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1), d_{s'}(\mathbf{R}_1)]_+ \\ &= \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, s} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} \left(-e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3) e_s(\mathbf{R}_2) n_{-s}(\mathbf{R}_1) + e_{-s}^\dagger(\mathbf{R}_3) e_s(\mathbf{R}_2) c_s^\dagger(\mathbf{R}_1) c_{-s}(\mathbf{R}_1) \right) \quad (22.16) \end{aligned}$$

$$= \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_1} \left(\sum_{\alpha, s, s'} e_s^\dagger(\mathbf{R}_3) \sigma_{s, s'}^\alpha e_{s'}(\mathbf{R}_2) S^\alpha(\mathbf{R}_1) - \frac{1}{2} \sum_s e_s^\dagger(\mathbf{R}_3) e_s(\mathbf{R}_2) n(\mathbf{R}_1) \right). \quad (22.17)$$

mit

$$S^\alpha(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \sum_{s, s'} c_s^\dagger(\mathbf{R}) \sigma_{s, s'}^\alpha c_{s'}(\mathbf{R}) \quad (22.18)$$

Bei der Umformung von (22.16) nach (22.17) wurde

$$2\delta_{s_1, s_4} \delta_{s_2, s_3} = \delta_{s_1, s_2} \delta_{s_3, s_4} + \sum_\alpha \sigma_{s_1, s_2}^\alpha \sigma_{s_3, s_4}^\alpha \quad (22.19)$$

verwendet. Dies ist ein Prozess, bei dem ein Elektron auf einen Platz des gleichen Untergitters springt. Dieser Prozess hängt vom Spin eines dritten Elektrons ab und kann diesen sogar verändern. Ist das System im antiferromagnetischen Zustand, so ist dieses dritte (benachbarte) Elektron meist in Gegenrichtung ausgerichtet, so dass man näherungsweise ein Hüpfmatrix-Element $t'_{\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_2} = \sum_{\mathbf{R}_1} t_{\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_1} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} / U$ erhält.

d) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_2$ ergibt einen ähnlichen Beitrag

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_4, s, s'} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_4} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) d_{s'}(\mathbf{R}_4)] \\ = & \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_4, s, s'} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_4} d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{s'}(\mathbf{R}_4) [e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2), e_s(\mathbf{R}_2)]_+ \\ = & \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_4, s} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_4} \left(d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_s(\mathbf{R}_4) (1 - n_{-s}(\mathbf{R}_2)) + d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{-s}(\mathbf{R}_4) c_{-s}^\dagger(\mathbf{R}_2) c_s(\mathbf{R}_2) \right) \quad (22.20) \\ = & \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_4} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_4} \left(\sum_{\alpha, s, s'} d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) \sigma_{s, s'}^\alpha d_{s'}(\mathbf{R}_4) S^\alpha(\mathbf{R}_2) + \frac{1}{2} \sum_s d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_s(\mathbf{R}_4) (2 - n(\mathbf{R}_2)) \right). \end{aligned} \quad (22.21)$$

Auch hier erhält man wie unter c) ein Hüpf-Matrix-Element zwischen zwei Plätzen auf dem gleichen Untergitter unter Mitwirkung eines dritten Elektrons bei \mathbf{R}_2 . Im Antiferromagneten wird der Spin des zusätzlichen Elektrons, das zur Doppelbesetzung führt, in umgekehrter Richtung ausgerichtet sein wie die Spins des gleichen Untergitters. Daher ist der Spin des Elektrons bei \mathbf{R}_2 mit großer Wahrscheinlichkeit ausgerichtet wie dieses zusätzliche Elektron, so dass wir für dieses näherungsweise das Hüpfmatrixelement $t'_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_4} = - \sum_{\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_4} / U$ erhalten.

e) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_2$: Dieser Beitrag beschreibt einen Prozess, bei dem zwei Elektronen von \mathbf{R}_2 nach \mathbf{R}_1 springen. Er setzt also voraus, dass ein doppelt besetzter Gitterplatz neben einem unbesetzten liegt. Auch dies ist für großes U ein unwahrscheinlicher Prozess.

f) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_1$: Dieser Beitrag liefert

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, s, s'} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) d_{s'}(\mathbf{R}_1)] \quad (22.22) \\ = & \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, s, s'} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1} \left(d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{s'}(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) - d_{s'}(\mathbf{R}_1) d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) e_s(\mathbf{R}_2) \right). \end{aligned} \quad (22.23)$$

Wir bringen die explizite Auswertung.

$$d_s^\dagger d_{s'} = \delta_{s, s'} n_s n_{-s}, \quad (22.24)$$

$$e_s e_{s'}^\dagger = \delta_{s, s'} (1 - n_s) (1 - n_{-s}), \quad (22.25)$$

$$d_{s'} d_s^\dagger = \delta_{s, s'} (1 - n_s) n_{-s} - \delta_{-s, s'} c_s^\dagger c_{-s}, \quad (22.26)$$

$$e_{s'}^\dagger e_s = \delta_{s, s'} n_s (1 - n_{-s}) + \delta_{-s, s'} c_{-s}^\dagger c_s. \quad (22.27)$$

Die $\delta_{-s,s'}$ -Terme liefern

$$-\delta_{-s,s'} d_{s'}(\mathbf{R}_1) d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) e_s(\mathbf{R}_2) = c_s^\dagger(\mathbf{R}_1) c_{s'}(\mathbf{R}_1) c_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) c_s(\mathbf{R}_2) - \delta_{s,s'} n_s(\mathbf{R}_1) n_s(\mathbf{R}_2). \quad (22.28)$$

Nehmen wir diesen $\delta_{s,s'}$ -Term mit den vorhergehenden zusammen, so folgt

$$n_{s1} n_{-s1} (1 - n_{s2}) (1 - n_{-s2}) - (1 - n_{1s}) n_{-s1} n_{s2} (1 - n_{-s2}) - n_{s1} n_{s2} \quad (22.29)$$

$$= n_{-s1} (1 - n_{-s2}) (n_{s1} - n_{s2}) - n_{s1} n_{s2} \quad (22.30)$$

$$= n_{-s1} n_{s1} - n_{-s1} n_{s2} - n_{-s1} n_{s1} n_{-s2} + n_{-s1} n_{s2} n_{-s2} - n_{s1} n_{s2}. \quad (22.31)$$

Beachten wir, dass bei Vertauschung der Orte 1 und 2 noch mal der gleiche Beitrag entsteht, so sehen wir, dass sich $n_{-s1} n_{s1} n_{-s2}$ und $n_{-s1} n_{s2} n_{-s2}$ wegheben. Es bleibt dann

$$n_{-s1} n_{s1} - n_{-s1} n_{s2} - n_{s1} n_{s2} = n_{-s1} n_{s1} - n_{1s} n_{s2} \quad (22.32)$$

so dass wir schließlich mit (22.19) den Beitrag

$$\sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1} \sum_{\alpha} (2S^\alpha(\mathbf{R}_1) S^\alpha(\mathbf{R}_2) - \frac{1}{2} n(\mathbf{R}_1) n(\mathbf{R}_2) + 2n_\uparrow(\mathbf{R}_1) n_\downarrow(\mathbf{R}_1)) \quad (22.33)$$

erhalten. Bei halber Besetzung (nur dann ist der Spin an den Gitterplätzen von 0 verschieden) erhält man also einen antiferromagnetische Wechselwirkungs-Beitrag

$$H_J = \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2} \frac{J_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2}}{2} \mathbf{S}(\mathbf{R}_1) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{R}_2) \quad \text{mit} \quad J_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2} = \frac{4t_{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2}^2}{U}. \quad (22.34)$$

Betrachtet man ein exakt halb gefülltes Band, so hat man einen Antiferromagneten beschrieben durch H_J (siehe Abschnitt 14.b). Man beobachtet, dass jetzt die kritische Temperatur für den Antiferromagnetismus proportional t^2/U ist, also mit wachsendem U abfällt. Das hier durchgeführte Verfahren ist für starkes U gut (strong-coupling limit), während das im vorhergehenden Abschnitt für kleine U gut ist (weak-coupling limit). Im Bereich mittlerer Kopplung ist das Hubbard-Modell nur schwer zu behandeln.

Hat man etwas weniger oder mehr als halbe Füllung, so nimmt man H_0 hinzu. Man spricht dann vom t - J -Modell. Man kann auch noch die t' -Terme, die wir unter c) und d) kennengelernt haben, mitnehmen. Nahe an der halben Füllung können wir die Operatoren e^\dagger und e durch die entsprechenden Loch-Operatoren ersetzen

$$c_s^\dagger(\mathbf{R}) = s l_{-s}(\mathbf{R}), \quad c_s(\mathbf{R}) = s l_{-s}^\dagger(\mathbf{R}) \quad (22.35)$$

und erhalten dann den Beitrag

$$H_{t'} = - \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', s} t'_{\mathbf{R} - \mathbf{R}'} (d_s^\dagger(\mathbf{R}) d_s(\mathbf{R}') + l_s^\dagger(\mathbf{R}) l_s(\mathbf{R}')) \quad (22.36)$$

mit

$$t'_{\mathbf{R} - \mathbf{R}'} = - \frac{1}{U} \sum_{\mathbf{R}''} t_{\mathbf{R} - \mathbf{R}''} t_{\mathbf{R}'' - \mathbf{R}'} \quad (22.37)$$

zum Hamilton-Operator. Man bezeichnet dies dann als das t - t' - J -Modell.

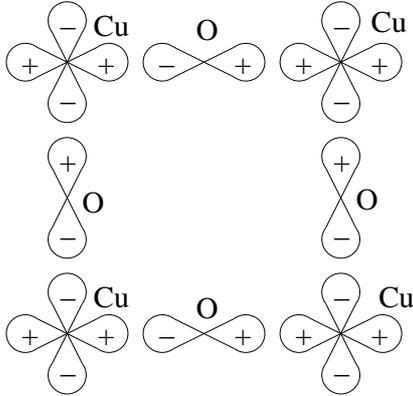
23 Hochtemperatur-Supraleiter I

23.a Cuprat-Schichten

Viele der Hochtemperatur-Supraleiter zeichnen sich dadurch aus, dass sie aus Cuprat-Schichten, CuO_2 , bestehen, zwischen denen sich andere Schichten befinden. Man nimmt daher an, dass diese Schichten wesentlich für die Hochtemperatur-Supraleitung sind. Wir betrachten ein Beispiel, das $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, ein mit Strontium dotiertes Lanthan-Cuprat. In diesem wechseln sich jeweils zwei LaO -Schichten und eine CuO_2 -Schicht ab. Wären die Schalen dieser Atome abgeschlossen, so hätte man es mit $\text{La}_{2-x}\text{Sr}^{2+}\text{Cu}^{1+}\text{O}_4^{2-}$ zu tun, was pro Elementarzelle zu einer Ladung $-1-x$ führen würde. Tatsächlich sind die Schalen der Cu-Atome und der zwei O-Atome in den Cuprat-Schichten nicht voll aufgefüllt. Vielmehr bleiben Löcher mit einer Konzentration c_{Cu} in der 3d-Schale des Kupfers und Löcher der Konzentration c_{O} in der 2p-Schale dieser zwei Sauerstoff-Atome. Damit ergibt sich folgende Ladungsbilanz:

Ion	Anzahl	Ladung pro Atom	Gesamt-Ladung
La	$2-x$	3	$6-3x$
Sr	x	2	$2x$
Cu	1	$1+c_{\text{Cu}}$	$1+c_{\text{Cu}}$
O	2	$-2+c_{\text{O}}$	$-4+2c_{\text{O}}$
O	2	-2	-4
Summe			$-1-x+c_{\text{Cu}}+2c_{\text{O}}$

Es muss daher wegen der erforderlichen Neutralität $c_{\text{Cu}}+2c_{\text{O}}=1+x$ gelten. Eine Abschätzung (P. Fulde, Electron Correlations in Molecules and Solids, sect. 14.2) beläuft sich auf $c_{\text{Cu}}=0.6+0.15x$, $c_{\text{O}}=0.2+0.425x$. Wir haben es also mit Löcher-Leitung zu tun. Wegen der tetragonalen (bei nicht zu tiefen Temperaturen) Symmetrie sind die d-Zustände des Kupfers aufgespalten. Das höchste Niveau wird vom $d_{x^2-y^2}$ -Zustand eingenommen. Hinzu kommen die p_x und p_y -Zustände der Sauerstoff-Atome. Dies führt dann zu einem 3-Band-Modell. Im einfachsten Fall ordnet man den Elektronen Energien ϵ_d und ϵ_p zu und führt Hüpf-Matrixelemente t_{pd} zwischen den einander überlappenden d -Orbitalen des Kupfers und den p -Orbitalen des Sauerstoffs ein.



Wir führen nun die Erzeugungs-Operatoren $d_s^\dagger(\mathbf{R}_n)$ für die d -Orbitale an den Gitterplätzen \mathbf{R}_n , und die Erzeugungs-Operatoren $p_{xs}^\dagger(\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_x/2)$ und $p_{ys}^\dagger(\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_y/2)$ mit $\mathbf{a}_x=a\mathbf{e}_x$ und $\mathbf{a}_y=a\mathbf{e}_y$ für die p -Orbitale ein. Dann können wir den Band-Hamilton-Operator schreiben als

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \epsilon_d \sum_n d_s^\dagger(\mathbf{R}_n) d_s(\mathbf{R}_n) \\
 &+ \epsilon_p \sum_n (p_{xs}^\dagger(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_x}{2}) p_{xs}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_x}{2}) + p_{ys}^\dagger(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_y}{2}) p_{ys}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_y}{2})) \\
 &+ t_{pd} \sum_n d_s^\dagger(\mathbf{R}_n) \left(-p_{xs}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_x}{2}) + p_{xs}(\mathbf{R}_n-\frac{\mathbf{a}_x}{2}) + p_{ys}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_y}{2}) - p_{ys}(\mathbf{R}_n-\frac{\mathbf{a}_y}{2}) \right) \\
 &+ t_{pd} \sum_n \left(-p_{xs}^\dagger(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_x}{2}) + p_{xs}^\dagger(\mathbf{R}_n-\frac{\mathbf{a}_x}{2}) + p_{ys}^\dagger(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_y}{2}) - p_{ys}^\dagger(\mathbf{R}_n-\frac{\mathbf{a}_y}{2}) \right) d_s(\mathbf{R}_n)
 \end{aligned} \tag{23.1}$$

Mit den Fourier-Transformierten

$$d_s^\dagger(\mathbf{R}_n) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} d_{\mathbf{k}s}^\dagger, \quad (23.2)$$

$$p_{x,y}^\dagger(\mathbf{R}_n + \frac{\mathbf{a}_{x,y}}{2}) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n + i\frac{\mathbf{a}_{x,y}}{2} \cdot \mathbf{k}} p_{x,y\mathbf{k}s}^\dagger \quad (23.3)$$

folgt dann

$$\begin{aligned} H_0 &= \epsilon_d \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}s}^\dagger d_{\mathbf{k}s} + \epsilon_p \sum_{\mathbf{k}} (p_{x\mathbf{k}s}^\dagger p_{x\mathbf{k}s} + p_{y\mathbf{k}s}^\dagger p_{y\mathbf{k}s}) \\ &+ 2it_{pd} \sum_{\mathbf{k}} \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) d_{\mathbf{k}s}^\dagger p_{x\mathbf{k}s} - 2it_{pd} \sum_{\mathbf{k}} \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) d_{\mathbf{k}s}^\dagger p_{y\mathbf{k}s} \\ &- 2it_{pd} \sum_{\mathbf{k}} \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) p_{x\mathbf{k}s}^\dagger d_{\mathbf{k}s} + 2it_{pd} \sum_{\mathbf{k}} \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) p_{y\mathbf{k}s}^\dagger d_{\mathbf{k}s}, \end{aligned} \quad (23.4)$$

so dass die Bandenergien durch die Eigenwerte der Matrix

$$\begin{pmatrix} \epsilon_d & 2it_{pd} \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) & -2it_{pd} \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) \\ -2it_{pd} \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) & \epsilon_p & 0 \\ 2it_{pd} \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) & 0 & \epsilon_p \end{pmatrix} \quad (23.5)$$

gegeben sind. Diese sind

$$\epsilon_{1,2,\mathbf{k}} = \frac{\epsilon_d + \epsilon_p}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_d - \epsilon_p}{2}\right)^2 + 4t_{pd}^2 \left(\sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y a}{2}\right)}, \quad (23.6)$$

$$\epsilon_{3,\mathbf{k}} = \epsilon_p \quad (23.7)$$

mit Eigen-Operatoren

$$c_{i\mathbf{k}s}^\dagger = \gamma_{d,i} d_{\mathbf{k}s}^\dagger + \sum_{\alpha=x,y} \gamma_{\alpha,i} p_{\alpha\mathbf{k}s}^\dagger, \quad (23.8)$$

die

$$[H, c_{i\mathbf{k}s}^\dagger] = \epsilon_i(\mathbf{k}) c_{i\mathbf{k}s}^\dagger \quad (23.9)$$

erfüllen, was auf

$$H_0 = \sum_{i,\mathbf{k},s} \epsilon_i(\mathbf{k}) c_{i\mathbf{k}s}^\dagger c_{i\mathbf{k}s} \quad (23.10)$$

führt.

Nun ist $\epsilon_d > \epsilon_p$. Die Bänder 1 und 2 haben die Breite $W = \sqrt{\left(\frac{\epsilon_d - \epsilon_p}{2}\right)^2 + 8t_{pd}^2} - \frac{\epsilon_d - \epsilon_p}{2}$. Das unterste Band liegt zwischen $\epsilon_p - W$ und ϵ_p . Das mittlere Band ist dispersionslos bei ϵ_p . Das oberste Band liegt zwischen ϵ_d und $\epsilon_d + W$. Die beiden unteren Bänder sind besetzt. Die interessante Physik spielt sich im obersten Band ab, das teilweise besetzt ist.

Wir können davon ausgehen, dass die beiden unteren Bänder besetzt sind und interessieren uns daher nur für das oberste Band. Wir entwickeln

$$\begin{aligned} \epsilon_1(\mathbf{k}) &= \frac{\epsilon_d + \epsilon_p}{2} + \frac{\epsilon_d - \epsilon_p}{2} + \frac{4t_{pd}^2}{\epsilon_d - \epsilon_p} \left(\sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y a}{2}\right) \\ &= \epsilon_d + 4t - 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \end{aligned} \quad (23.11)$$

mit

$$t = \frac{t_{pd}^2}{\epsilon_d - \epsilon_p}. \quad (23.12)$$

Lassen wir die Konstanten $\epsilon_d + 4t$ weg und berücksichtigen wir nur noch das oberste Band, so bleibt schließlich der Einteilchen-Hamilton-Operator

$$H_0 = -t \sum_{\mathbf{R},s} (c_s^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{a}_x) + c_s^\dagger(\mathbf{R} - \mathbf{a}_x) + c_s^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{a}_y) + c_s^\dagger(\mathbf{R} - \mathbf{a}_y)) c_s(\mathbf{R}). \quad (23.13)$$

23.b Vom Dreiband- zum Einband-Hubbard-Modell

Bisher haben wir nur die Bänder ohne die abstoßende Wechselwirkung zwischen den Elektronen betrachtet. Wir müssen davon ausgehen, dass es einen Beitrag

$$H_{\text{int}} = U_d \sum_n d_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_n) d_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_n) d_{\downarrow}(\mathbf{R}_n) d_{\uparrow}(\mathbf{R}_n) = \frac{U_d}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'\downarrow} d_{\mathbf{k}\uparrow} \quad (23.14)$$

gibt. Kehren wir nun die unitäre Transformation (23.8) um

$$d_{\mathbf{k}s}^{\dagger} = \sum_i \gamma_{d,i}^* c_{i\mathbf{k}s}^{\dagger}, \quad p_{\alpha\mathbf{k}s}^{\dagger} = \sum_i \gamma_{\alpha,i}^* c_{i\mathbf{k}s}^{\dagger} \quad (23.15)$$

und ersetzen γ durch seinen Mittelwert, so erhalten wir näherungsweise, wobei wir nur die Beiträge des obersten Bandes berücksichtigt haben,

$$H_{\text{int}} = U \sum_n c_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_n) c_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_n) c_{\downarrow}(\mathbf{R}_n) c_{\uparrow}(\mathbf{R}_n) \quad (23.16)$$

mit $U = U_d \overline{\gamma_{d,1}^4}$. Dabei lassen sich aus (23.9) in erster Ordnung in

$$\tau = t_{pd}/(\epsilon_d - \epsilon_p) \quad (23.17)$$

die γ berechnen,

$$\gamma_{x,1} = -2i\tau \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \gamma_{d,1}, \quad \gamma_{y,1} = -2i\tau \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right) \gamma_{d,1} \quad (23.18)$$

und aus

$$|\gamma_{d,1}|^2 + |\gamma_{x,1}|^2 + |\gamma_{y,1}|^2 = 1 \quad (23.19)$$

schließlich auch

$$\gamma_{d,1} = 1 - 2\tau^2 \left(\sin^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) \right), \quad (23.20)$$

was gemittelt

$$\overline{\gamma_{d,1}} = 1 - 2\tau^2 \quad (23.21)$$

ergibt. Die abstoßende Wechselwirkung wird durch diesen Faktor reduziert, ist aber immer noch recht groß.

Das Band, das hier die wesentliche Rolle spielt, ist das antibindende Band. Das bindende Band ist voll besetzt. In der Regel geht man von dieser Darstellung durch Elektronen über zur Darstellung durch Löcher ausgehend von einem Zustand, in dem alle Elektronen-Orbitale gefüllt sind. Um zu dieser Darstellung zu gelangen, muss man Erzeuger und Vernichter vertauschen. Dies ändert an der Abstossung (23.14) nichts, wenn man davon absieht, dass dann noch ein Anteil proportional zur Teilchenzahl entsteht. Bei den Hüpfmatrix-Elementen ändert sich dann das Vorzeichen. Dies lässt sich jedoch kompensieren, wenn man an jedem zweiten Gitterplatz c^{\dagger} und c in $-c^{\dagger}$ und $-c$ abändert (Eichtransformation).

Wir haben also jetzt ein Ein-Band-Hubbard-Modell erhalten und es stellt sich die Frage: Führt dieses Modell und gegebenenfalls wie zu einem Supraleiter. Der genaue Mechanismus ist umstritten und die Situation ist noch immer ähnlich der in Physics Today June 1991 beschrieben, wo R. Schrieffer und P.W. Anderson ihre unterschiedlichen Vorstellungen diskutieren. Beide greifen auf das Hubbard-Modell zurück. Beide weisen der Dotierung durch Löcher, manchmal auch durch Extra-Elektronen wesentliche Bedeutung zu. In der Tat sind viele der Supraleiter bei halber Füllung Antiferromagneten. Schrieffer argumentiert mit "Spin bags". Darunter versteht er ein Loch, das sich in einer antiferromagnetischen Umgebung bewegt. Dieses Loch reduziert in seiner Umgebung den Antiferromagnetismus. Kommen sich zwei solche Löcher nahe, so ergeben ihre Umgebungen eine effektive Wechselwirkung, die für die Supraleitung verantwortlich sind. Schrieffer und auch andere Autoren sehen den wesentlichen Mechanismus innerhalb der Schichten. Eine Kopplung zwischen verschiedenen Schichten halten sie nur insoweit für wesentlich, als in einem zweidimensionalen System mit kurzreichweitiger Wechselwirkung

eine kontinuierliche Symmetrie nicht gebrochen werden kann. Diese kann erst in einem dreidimensionalen System gebrochen werden.

Anderson hingegen hält eine inkohärente Kopplung zwischen den Schichten für den wesentlichen Mechanismus. Andersons Sichtweise hat sich, nach seinen eigenen Worten fokussiert "on a non-Fermi-liquid normal state with separate spin and charge excitations, and deconfinement by interlayer Josephson tunneling as the driving force for the superconductivity," während Schrieffer seinerseits "the interplay between antiferromagnetism and superconductivity, extending the pairing theory beyond the Fermi-liquid regime in terms of spin polarons and 'bags'" verfolgt hat.

Viele Autoren stehen dem Bild Schrieffers näher und betrachten antiferromagnetische Fluktuationen als wesentliche Grundlage der Hochtemperatur-Supraleitung. Dazu gehört zum Beispiel auch Scalapino (Physics Reports 250 (1995) 329). Es gibt jedoch auch gewichtige Stimmen, die der Elektron-Phonon-Wechselwirkung eine wesentliche Rolle zuweisen. Generell gehen diese Theorien davon aus, dass ein "intermediäres Boson" die effektive Wechselwirkung vermittelt.

Die meisten Rechnungen und inzwischen auch Experimente ergeben, dass es sich nicht um eine s-Wellensupraleitung handelt, sondern um eine d-Wellensupraleitung.

23.c Eine effektive Wechselwirkung

Wir (I. Grote, E. Körding und F.W.) haben zum Hubbard-Modell eine Rechnung mittels Flussgleichungen angestellt (cond-mat/0106604), die wir im Folgenden noch besprechen werden.

Prinzipiell will man mittels Flussgleichungen den Hamilton-Operator diagonalisieren. Haben aber der Grundzustand oder typische Eigen-Zustände des Hamilton-Operators eine erheblich andere Struktur als die anfänglichen Ausgangszustände, dann kann das nur mit einer sehr komplizierten unitären Transformation erreicht werden. Eine solche kann man aber nur schwer näherungsweise realisieren. Wir wollen uns daher mit einer einfacheren unitären Transformation begnügen, die aber die Eigenschaft hat, dass der so gewonnene Hamilton-Operator zur weiteren Behandlung sehr geeignet ist. Dies können wir erreichen, wenn wir den Hamilton-Operator auf eine Form bringen, die noch all die Formen möglicher Ordnungen enthält, mit denen wir rechnen müssen. Tatsächlich wollen wir aus der Zweiteilchen-Wechselwirkung

$$\frac{1}{2V_P} \sum_{k_1, q_1, s_1, k_2, q_2, s_2} V(k_1, k_2, q_1, q_2) : c_{k_1 s_1}^\dagger c_{q_1 s_1} c_{k_2 s_2}^\dagger c_{q_2 s_2} : \delta_{k_1 + k_2, q_1 + q_2} \quad (23.22)$$

die folgende Wechselwirkungen erhalten, andere aber eliminieren:

$$V_B(k, q) = V(k, -k, q, -q), \quad (23.23)$$

$$V_H(k, q) = V(k, q, k, q), \quad (23.24)$$

$$V_F(k, q) = V(k, q, q, k), \quad (23.25)$$

$$V_A(k, q) = V(k, q + q_0, q, k + q_0), \quad (23.26)$$

$$V_C(k, q) = V(k, q + q_0, k + q_0, q), \quad (23.27)$$

$$V_Y(k, q) = V(k, q_0 - k, q, q_0 - q). \quad (23.28)$$

Warum sind diese Wechselwirkungen interessant? Die erste, V_B haben wir bereits bei der Behandlung der Supraleitung kennengelernt. Wir benötigen sie natürlich auch hier, um den Phasenübergang zur Supraleitung beschreiben zu können. Auch V_A ist wichtig, denn es sind genau die Matrixelemente, die bei der Behandlung des Antiferromagnetismus wichtig sind. Dabei ist q_0 wieder der Wellenvektor, der die beiden Untergitter voneinander unterscheidet. V_C erlaubt nicht nur, dass die Magnetisierung von Gitterplatz zu Gitterplatz alterniert, sondern auch ein solches Alternieren für die Dichte der Elektronen.

Die Beiträge V_H und V_F sind die Beiträge, die in der Hartree-Fock-Näherung verwendet werden. V_X ist schließlich ein Beitrag, der eine alternierende Struktur für das Supraleitungskondensat zulässt.

24 Landau-Theorie

Beiträge vom Typ V_H und auch V_F wurden von Landau in der Fermiflüssigkeits-Theorie eingeführt. Man spricht auch von der Landautheorie.

Landau nahm an, dass man bei tiefen Temperaturen langlebige elektronische Anregungen nahe der Fermikante hat und führte den Ausdruck

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k},s} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 \delta n_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') \delta n_{\mathbf{k}s} \delta n_{\mathbf{k}'s'} \quad (24.1)$$

für die Energie des Systems ein. Dabei sind die $\delta n_{\mathbf{k}s}$ die Anzahl von Elektronen, die man dem Grundzustand oberhalb der Fermikante hinzufügt oder unterhalb der Fermikante wegnimmt (dies sind Quasiteilchen, das heisst sie können zum Beispiel Elektronen sein, die ihre Umgebung polarisiert haben. Sie enthalten also Abschirmungs- und ähnliche Effekte). Man erkennt, dass $\epsilon_{\mathbf{k}}^0$ die Einteilchenenergie ist, die man aufbringen muss, um dem Grundzustand ein Elektron hinzuzufügen oder die man erhält, wenn man ihm ein Teilchen entnimmt. Ist der Zustand bereits angeregt, dann ändert sich die Energie um

$$\epsilon_{\mathbf{k}s} = \frac{dE}{d\delta n_{\mathbf{k}s}} = \epsilon_{\mathbf{k}}^0 + \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') \delta n_{\mathbf{k}'s'}. \quad (24.2)$$

Die Koeffizienten f geben die Wechselwirkung zwischen den Elektronen wieder.

Die Beiträge von V_H und V_F in (23.24,23.25) lauten

$$\frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V_H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}'s'}^\dagger c_{\mathbf{k}'s'} := \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V_H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n_{\mathbf{k}s} \delta n_{\mathbf{k}'s'} \quad (24.3)$$

und

$$\frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V_F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}'s} c_{\mathbf{k}'s'}^\dagger c_{\mathbf{k}s'} : \quad (24.4)$$

Hieraus nehmen wir die Beiträge mit $s = s'$. Die anderen kann man prinzipiell auch mitnehmen. Sie beschreiben die transversalen Fluktuationen im Spin. Wir wollen diese in diesem Abschnitt nicht berücksichtigen. Dann erhalten wir

$$-\frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',s} V_F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n_{\mathbf{k}s} \delta n_{\mathbf{k}'s}. \quad (24.5)$$

Aus beiden Beiträgen erhalten wir

$$f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') = V_H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \frac{1+ss'}{2} V_F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (24.6)$$

Vielfach wird die Theorie für isotrope Systeme angewendet. Dann hängt natürlich ϵ nur vom Betrag von \mathbf{k} ab. In der Umgebung der Fermikante gilt dann

$$\epsilon_k^0 = \mu + \hbar v_F (k - k_F) \quad (24.7)$$

mit der Fermigeschwindigkeit v_F . Weiterhin erweist sich normalerweise nur die Besetzung nahe der Fermikante als wesentlich. Dann kann man in f die Abhängigkeit vom Betrag von \mathbf{k} und \mathbf{k}' vernachlässigen und muss lediglich die Richtung dieser Vektoren berücksichtigen. Auf Grund der Isotropie geht dann nur der Winkel zwischen \mathbf{k} und \mathbf{k}' in f ein, so dass man nur die Abhängigkeit von $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ und $\mathbf{n}' = \mathbf{k}'/k'$ berücksichtigen muss, so dass f nur eine Funktion von $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'$ ist. Weiterhin setzen wir voraus, dass keine Spinrichtung ausgezeichnet ist, also Invarianz gegen die Transformation $s \rightarrow -s$, $s' \rightarrow -s'$ besteht. Dann lässt sich f in der Form

$$f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') = f(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') + ss' g(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') \quad (24.8)$$

schreiben.

Wir wollen jetzt betrachten, wie das System auf eine äussere Störung beschrieben durch $-\sum_{\mathbf{k},s} h_s(\mathbf{k})\delta n_{\mathbf{k}s}$ reagiert. Wir erwarten, dass sich dann die Besetzung verändert. Im allgemeinen werden dann die Zustände bis $k_F(\mathbf{n}) = k_{F0} + \delta k_s(\mathbf{n})$ besetzt sein. Wir finden dann insgesamt

$$\epsilon_{\mathbf{k}s} = \epsilon^0(\mathbf{k}) - h_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}'s'} f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') \delta n_{\mathbf{k}'s'} \quad (24.9)$$

Die letzte Summe formen wir um zum Integral

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\Omega_{n'} \int_{k_{F0}}^{k_{F0} + \delta k_s(n')} dk' k'^2 f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') = \frac{k_F^2}{(2\pi)^3} \int d\Omega_{n'} f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') \delta k_{s'}(n') \quad (24.10)$$

An der Fermikante gilt dann

$$\mu = \epsilon_{k_F(\mathbf{n}),s}, \quad (24.11)$$

also

$$0 = \hbar v_F \delta k_s(\mathbf{n}) - h_s(\mathbf{k}) + \frac{k_F^2}{(2\pi)^3} \sum_{s'} \int d\Omega_{n'} f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') \delta k_{s'}(n'). \quad (24.12)$$

Nachdem f nur von dem Winkel zwischen \mathbf{n} und \mathbf{n}' abhängt, entwickeln wir in Legendre-Polynome

$$f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') = \sum_l (f_l + g_l s s') P_l(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \sum_l (f_l + g_l s s') \frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_{lm}(\mathbf{n}) Y_{lm}^*(\mathbf{n}'). \quad (24.13)$$

Ebenso entwickeln wir die Störung h und die Veränderung der Fermifläche nach Kugelflächenfunktionen

$$h_s(\mathbf{n}) = \sum_{lm} h_{slm} Y_{lm}(\mathbf{n}), \quad \delta k_{Fs}(\mathbf{n}) = \sum_{lm} \delta k_{slm} Y_{lm}(\mathbf{n}) \quad (24.14)$$

und erhalten

$$0 = \hbar v_F \delta k_{slm} - h_{slm} + \frac{k_F^2}{2\pi^2} \sum_{s'} \frac{f_l + s s' g_l}{2l+1} \delta k_{s'lm} \quad (24.15)$$

mit den Lösungen

$$\begin{aligned} \delta k_{\uparrow lm} + \delta k_{\downarrow lm} &= \frac{h_{\uparrow lm} + h_{\downarrow lm}}{\hbar v_F + \frac{k_F^2}{(2l+1)\pi^2} f_l} = \frac{h_{\uparrow lm} + h_{\downarrow lm}}{\hbar v_F (1 + \frac{D_F}{2l+1} f_l)}, \\ \delta k_{\uparrow lm} - \delta k_{\downarrow lm} &= \frac{h_{\uparrow lm} - h_{\downarrow lm}}{\hbar v_F + \frac{k_F^2}{(2l+1)\pi^2} g_l} = \frac{h_{\uparrow lm} - h_{\downarrow lm}}{\hbar v_F (1 + \frac{D_F}{2l+1} g_l)}. \end{aligned} \quad (24.16)$$

Hierbei haben wir verwendet, dass aus $N = V_P k_F^3 / (3\pi^2)$ unter Verwendung von $dN = V_P D d\epsilon$ und $d\epsilon = \hbar v_F dk_F$ die Beziehung $D_F \hbar v_F = k_F^2 / \pi^2$ mit der Zustandsdichte D_F an der Fermikante folgt.

24.a Kompressibilität

Die Kompressibilität lässt sich ausdrücken

$$\kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} = \frac{1}{V_P} \frac{\partial N}{\partial \mu} \quad (24.17)$$

Wir wollen daher $dN/d\mu$ bestimmen und führen die Störung $h_s = \delta\mu$ ein. Dann folgt

$$h_{s00} = \sqrt{4\pi} \delta\mu, \quad \delta k_{s00} = \frac{\sqrt{4\pi} \delta\mu}{\hbar v_F (1 + D_F f_0)}, \quad \delta k(\mathbf{n}) = \frac{\delta\mu}{\hbar v_F (1 + D_F f_0)}. \quad (24.18)$$

Damit ergibt sich

$$\frac{\partial N}{\partial \mu} = \frac{3N}{\hbar k_F v_F (1 + D_F f_0)} = \frac{V_P D_F}{1 + D_F f_0}. \quad (24.19)$$

24.b Suszeptibilität

Ähnlich wie die Kompressibilität können wir auch die magnetische Suszeptibilität aus der Magnetisierung $M = \mu_B(N_\uparrow - N_\downarrow)/V_P$ und der Störung $h_s = \mu_B s B$ berechnen. Man findet

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\mu_B^2 D_F}{1 + D_F g_0}. \quad (24.20)$$

24.c Galilei-Invarianz

Ersetzen wir im Hamilton-Operator die Impuls-Operatoren \mathbf{p}_i durch $\mathbf{p}_i - m\mathbf{v}$, so bewegt sich der Grundzustand mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} . Man erhält ihn, wenn man die Wellenvektoren \mathbf{k} durch $\mathbf{k} - m\mathbf{v}/\hbar$ ersetzt. Die Fermifläche wird dann durch

$$\delta k(\mathbf{n}) = m\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}/\hbar = m \sum_m v_m Y_{1m}/\hbar \quad (24.21)$$

beschrieben, während der Hamilton-Operator in erster Ordnung in \mathbf{v} den zusätzlichen Beitrag

$$h_s(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} = \sum_m v_m \hbar k_F Y_{1m} \quad (24.22)$$

erhält. Daraus folgt dann

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} - \frac{k_F^2}{3\pi^2 \hbar} f_1. \quad (24.23)$$

Die Fermigeschwindigkeit ist also direkt mit dem Landau-Parameter f_1 verknüpft. Diese Überlegungen gelten nur für Flüssigkeiten ohne Substrat. Das Elektronengas hat zum Beispiel das Gitter als Substrat, daher gilt für dieses allein die Galilei-Invarianz nicht.

24.d Instabilitäten

Wir betrachten jetzt generell Instabilitäten des Systems gegen Deformationen der Fermikante. Wir setzen daher

$$\delta k_{Fs}(\mathbf{n}) = \sum_{lm} (\delta k_{lm}^0 + s \delta k_{lm}^1) Y_{lm}(\mathbf{n}) \quad (24.24)$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_P}(E - \mu N) &= \frac{1}{V_P}(E_0 - \mu N_0) + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_s \int d\Omega_n \int_{k_{F_0}}^{k_{F_0} + \delta k_s(\mathbf{n})} dk k^2 (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^6} \sum_{s,s'} \int d\Omega_n d\Omega_{n'} \int dk dk' f(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}'_{s'}) \\ &= \frac{1}{V_P}(E_0 - \mu N_0) + \frac{\hbar k_F^2 v_F}{(2\pi)^3} \sum_{lm} \left(|\delta k_{lm}^0|^2 \left(1 + \frac{D_F f_l}{2l+1}\right) + |\delta k_{lm}^1|^2 \left(1 + \frac{D_F g_l}{2l+1}\right) \right). \end{aligned} \quad (24.25)$$

Eine Stabilität ist also nur vorhanden, wenn alle Koeffizienten $1 + Df_l/(2l+1)$ und $1 + Dg_l/(2l+1)$ positiv sind. Man erkennt, dass dann auch die Kompressibilität und die Suszeptibilität positiv sind. Für $1 + Df_1/3$ erhält man aus der Galilei-Invarianz $\hbar k_F/(mv_F)$. Man zeige, dass dies die kinetische Energie pro Volumen, $Nmv^2/2V_P$ ist. Sind die $1 + Df_l/(2l+1)$ und $1 + Dg_l/(2l+1)$ nicht positiv, dann geht der rotations-invariante Zustand verloren. Die Symmetrie des Systems wird dann spontan gebrochen. Man spricht von einer Pomeranchuk-Instabilität.

25 Hochtemperatur-Supraleiter II

25.a Die Fluss-Gleichungen

Wir kommen nun auf die Behandlung der Hubbard-Wechselwirkung mittels Flussgleichungen zurück. Wir müssen natürlich wieder einen geeigneten Generator η , Gl. (18.25) für die Fluss-Gleichungen aufsuchen. Hierbei werden wir folgendermaßen vorgehen: Wir gehen aus von einer quadratischen Form des Hamilton-Operators

$$G(H) = \frac{1}{2} \sum g_{ij,kl} H_{ji} H_{lk}. \quad (25.1)$$

Diese soll so gewählt werden, dass sie durch die Fluss-Gleichungen ein Minimum wird. Man wählt also eine positiv semi-definite Form g und möchte, dass nach Anwendung der Fluss-Gleichungen nur die Beiträge mit Eigenwerten 0 übrig bleiben. Zunächst wird man g symmetrisch wählen

$$g_{ij,kl} = g_{kl,ij} \quad (25.2)$$

und verlangen, dass G reell ist. Da H hermitesch ist, folgt

$$G^*(H) = \frac{1}{2} \sum g_{ij,kl}^* H_{ij} H_{kl} \quad (25.3)$$

und damit

$$g_{ij,kl} = g_{ji,lk}^*. \quad (25.4)$$

Unter dem Fluss verändert sich G gemäß

$$\frac{dG}{dl} = \sum g_{ij,kl} (\eta_{jm} H_{mi} - H_{jm} \eta_{mi}) H_{lk} = \sum \eta_{ji} (g_{mj,kl} H_{im} H_{lk} - g_{im,kl} H_{mj} H_{lk}). \quad (25.5)$$

Damit der Ausdruck semi-negativ ist, wählen wir

$$\eta_{ji} = - \sum (g_{mj,kl} H_{im} H_{lk} - g_{im,kl} H_{mj} H_{lk})^* = \sum (-g_{jm,lk} H_{mi} H_{kl} + g_{mi,lk} H_{jm} H_{kl}), \quad (25.6)$$

das man auch

$$\eta = [H, H^r], \quad H_{ij}^r = \sum g_{ij,kl} H_{kl} \quad (25.7)$$

schreiben kann. Da G unter dem Fluss abnehmen soll, wählt man eine quadratische Form, die für die gewünschte "diagonale" Form verschwindet, deren andere Eigenwerte aber positiv sind. Beispielsweise ist dies mit einem Doppelkommutator mit einem hermiteschen Operator v möglich,

$$H^r = [v, [v, H]]. \quad (25.8)$$

Mit dieser Wahl betrachtet man die Anteile von H als diagonal, die mit v kommutieren. Nimmt man als v zum Beispiel den Operator der Anzahl der Quasiteilchen (Zahl der Löcher unterhalb der Fermikante plus Zahl der Elektronen oberhalb der Fermikante), so ergibt dies ein η , das eine Wechselwirkung liefert, die die Anzahl der Anregungen über die Fermikante erhält. In der Diagonal-Darstellung von v ergibt sich $H_{ij}^r = (v_i - v_j)^2 H_{ij}$. Am einfachsten können wir v als Einteilchen-Operator einführen

$$v = \sum_k v_k c_k^\dagger c_k \quad (25.9)$$

Ein Beitrag der Form $H_{k_1, k_2, \dots, k'_1, k'_2, \dots} c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger \dots c_{k'_1} c_{k'_2} \dots$ erscheint dann in H^r mit der Eliminationsfunktion

$$r_{k_1, k_2, \dots, k'_1, k'_2, \dots} = (v_{k_1} + v_{k_2} + \dots - v_{k'_1} - v_{k'_2} - \dots)^2 \quad (25.10)$$

multipliziert. Sie gibt an, wie dringend dieser Term eliminiert werden soll. Im allgemeinen wird es zweckmäßig sein, die Beiträge mehrerer v zu addieren, damit nur speziell die gewünschten Beiträge in H übrig bleiben

$$r_{k_1, k_2, \dots, k'_1, k'_2, \dots} = \sum_\alpha (v_{k_1}^\alpha + v_{k_2}^\alpha + \dots - v_{k'_1}^\alpha - v_{k'_2}^\alpha - \dots)^2. \quad (25.11)$$

Wir bemerken bei dieser Wahl: Falls der Impuls eines Erzeugungs- und eines Vernichtungs-Operators übereinstimmen, dann ist die Funktion r die gleiche wie wenn die beiden Operatoren entfernt wären. falls insbesondere die Impulse der Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren paarweise übereinstimmen, dann verschwindet r . Nun möchten wir haben, dass r auch für Paare $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ und $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}$ verschwindet. Dann fordern wir $v_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}$. Ähnlich wollen wir, dass r auch für Paare $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ und $c_{-\mathbf{k}}^\dagger$ verschwindet. Dazu wählen wir $v_{\mathbf{k}} + v_{-\mathbf{k}} = 0$.

25.b Störungs-Theorie

Wir wollen nun die Fluss-Gleichung

$$\frac{dH}{dt} = [\eta, H] = [[H, V^r], H] = [[T + V, V^r], T + V] \quad (25.12)$$

störungstheoretisch lösen. In erster Ordnung in der Wechselwirkung erhalten wir

$$\frac{dV_1(l)}{dt} = [[T, V_1^r], T] \quad (25.13)$$

und damit

$$\frac{dV_1(k_1, k_2; q_1, q_2; l)}{dt} = -\Delta\epsilon(k_1, k_2, q_1, q_2)^2 r(k_1, k_2, q_1, q_2) V_1(k_1, k_2, q_1, q_2; l) \quad (25.14)$$

mit

$$\Delta\epsilon(k_1, k_2, q_1, q_2) = \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - \epsilon_{q_1} - \epsilon_{q_2}. \quad (25.15)$$

und

$$V_1(k_1, k_2, q_1, q_2; l) = e^{-\Delta\epsilon(k_1, k_2, q_1, q_2)^2 r(k_1, k_2, q_1, q_2) l} V(k_1, k_2, q_1, q_2). \quad (25.16)$$

Daher wird der Zerfall von V_1 nicht nur durch die Differenz der Energien $\Delta\epsilon$, sondern auch durch den Eliminations-Faktor r bestimmt. Für die Beiträge in zweiter Ordnung der Wechselwirkung erhält man die Gleichung

$$\frac{dV_2}{dt} - [[T, V_2^r], T] = [[T, V_1^r], V_1] + [[V_1, V_1^r], T]. \quad (25.17)$$

Auf der rechten Seite ist die Normal-Ordnung durchzuführen. Es bleiben dann Terme vom Typ $c^{\dagger m} c^m$ mit $m = 1, 2, 3$. Wir werden im wesentlichen Terme mit $m = 2$ betrachten. Für diese kann man die Differentialgleichung lösen. Zu berechnen sind die Beiträge V_2 , für die $r = 0$ ist. Für diese verschwindet V_2^r auf der linken Seite der Gleichung. Auf der rechten Seite der Gleichung haben wir Beiträge der Form $V(\{a\})V(\{b\})$ mit geeigneten Faktoren r und $\Delta\epsilon$. Dabei stehen $\{a\}$ und $\{b\}$ jeweils für vier Impulse. Wir wollen sie nicht im einzelnen hinschreiben, bemerken aber, dass sie nach Integration auf Grund der l -Abhängigkeit (25.16) die Form

$$V(\{a\})V(\{b\}) \frac{r(\{a\})(2\Delta\epsilon(\{a\}) + \Delta\epsilon(\{b\})) - r(\{b\})(\Delta\epsilon(\{a\}) + 2\Delta\epsilon(\{b\}))}{r(\{a\})\Delta\epsilon(\{a\})^2 + r(\{b\})2\Delta\epsilon(\{b\})^2} \quad (25.18)$$

annehmen. Es stellt sich nun heraus, dass für die zu berechnenden Beiträge stets $r(\{a\}) = r(\{b\})$ gilt, so dass sich die Faktoren r herauskürzen und wir keine spezifische Wahl treffen müssen.

Auf diese Weise können wir in zweiter Ordnung in der Kopplung U die effektive Wechselwirkung der Form (23.22-23.28) berechnen.

25.c Freie Energie

Diese Wechselwirkung ist nun auf ihre Stabilität gegen Symmetriebrechung zu untersuchen. Das heißt, wir müssen das großkanonische Potential

$$G = \langle H - \mu\mathcal{N} \rangle - TS, \quad (25.19)$$

auf sein Verhalten bei Variation der Erwartungswerte

$$\langle c_k^\dagger c_l \rangle = n_k^0 \delta_{k,l} + \nu_{k,l}, \quad \nu_{k,l} = \nu_{l,k}^*, \quad (25.20)$$

$$\langle c_k^\dagger c_l^\dagger \rangle = \Delta_{k,l}^* = -\Delta_{l,k}^*, \quad \langle c_l c_k \rangle = \Delta_{k,l} \quad (25.21)$$

untersuchen. Die Wechselwirkung ist eine quadratische Form in den ν und Δ .

$$\begin{aligned} E - \mu N &= E_0 - \mu N_0 + \sum_{\mathbf{k}s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \nu_{\mathbf{k}s, \mathbf{k}s} \\ &+ \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s, s'} V_B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{k}s, -\mathbf{k}s'}^* \Delta_{\mathbf{q}s, -\mathbf{q}s'} \\ &+ \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s, s'} (V_H(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \nu_{\mathbf{k}s, \mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}s', \mathbf{q}s'} - V_F(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \nu_{\mathbf{k}s', \mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}s', \mathbf{q}s}) \\ &+ \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s, s'} V_Y(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{k}s, \mathbf{q}_0 - \mathbf{k}s'}^* \Delta_{\mathbf{q}s, \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}s'} \\ &+ \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s, s'} (V_C(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \nu_{\mathbf{q}_0 + \mathbf{k}s, \mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}s', \mathbf{q}s'} - V_A(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \nu_{\mathbf{q}_0 + \mathbf{k}s', \mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}s', \mathbf{q}s}) \end{aligned} \quad (25.22)$$

Es bleibt noch die zugehörige Entropie für kleine ν und Δ zu bestimmen. Wir gehen aus von der Matrix

$$R = \begin{pmatrix} \langle c_k^\dagger c_l \rangle & \langle c_k^\dagger c_l^\dagger \rangle \\ \langle c_k c_l \rangle & \langle c_k c_l^\dagger \rangle \end{pmatrix} = D + A \quad (25.23)$$

mit der Diagonal-Matrix D und der Matrix A

$$D = \begin{pmatrix} n_k^0 \delta_{k,l} & 0 \\ 0 & (1 - n_k^0) \delta_{k,l} \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \nu_{k,l} & \Delta_{k,l}^* \\ -\Delta_{k,l} & -\nu_{l,k} \end{pmatrix}. \quad (25.24)$$

Nun kann man diese Matrix durch eine unitäre Transformation diagonalisieren, die der Einführung neuer Fermionen entspricht,

$$\begin{pmatrix} c^\dagger \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^\dagger \\ \alpha \end{pmatrix}. \quad (25.25)$$

Die Diagonalisierung bis zur zweiten Ordnung in den Außerdiagonal-Matrixelementen ergibt bekanntlich die Eigenwerte

$$\lambda_i = D_{ii} + A_{ii} + \sum_{j \neq i} \frac{A_{ij} A_{ji}}{D_{ii} - D_{jj}} \quad (25.26)$$

Hieraus lässt sich dann die Spur einer analytischen Funktion berechnen,

$$\begin{aligned} \text{tr} \hat{f}(D + A) &= \sum_i \hat{f}(\lambda_i) = \sum_i \hat{f}(D_{ii}) + \sum_i (\lambda_i - D_{ii}) \hat{f}'(D_{ii}) + \dots \\ &= \sum_i \hat{f}(D_{ii}) + \sum_i \hat{f}'(D_{ii}) A_{ii} + \frac{1}{2} \sum_i \hat{f}''(D_{ii}) A_{ii}^2 \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i, j \neq i} A_{ij} A_{ji} \frac{\hat{f}'(D_{ii}) - \hat{f}'(D_{jj})}{D_{ii} - D_{jj}} + O(A^3). \end{aligned} \quad (25.27)$$

Im vorliegenden Fall erhalten wir die Entropie als

$$S = -k_B \text{tr}(R \ln R). \quad (25.28)$$

Wir haben also $\hat{f}(n) = -k_B n \ln n$ zu entwickeln und erhalten

$$\hat{f}(n^0) = -k_B n^0 \ln n^0, \quad \hat{f}'(n^0) = -k_B (1 + \ln n^0), \quad \hat{f}''(n^0) = -\frac{k_B}{n^0}. \quad (25.29)$$

und damit

$$\begin{aligned}
S &= S^0 + k_B \beta \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) \nu_{kk} \\
&- \frac{k_B}{2} \sum_{kk'} |\nu_{kk'}|^2 f(\beta(\epsilon_k^0 - \mu), \beta(\epsilon_{k'}^0 - \mu)) \\
&- \frac{k_B}{2} \sum_{kk'} |\Delta_{kk'}|^2 f(\beta(\epsilon_k^0 - \mu), \beta(\mu - \epsilon_{k'}^0))
\end{aligned} \tag{25.30}$$

bis zur zweiten Ordnung in ν und Δ mit

$$S^0 = -k_B \sum_k (n_k^0 \ln n_k^0 + (1 - n_k^0) \ln(1 - n_k^0)), \tag{25.31}$$

$$f(x, y) = \frac{x - y}{\frac{1}{e^y + 1} - \frac{1}{e^x + 1}} = \frac{x - y}{e^x - e^y} (e^x + 1)(e^y + 1) \tag{25.32}$$

mit dem Limes

$$f(x, x) = \frac{(e^x + 1)^2}{e^x} \tag{25.33}$$

und den Symmetrien

$$f(x, y) = f(y, x) = f(-x, -y). \tag{25.34}$$

Zur Berechnung des großkanonischen Potentials müssen wir damit von (25.22)

$$TS = -\frac{k_B T}{2} \sum_{\mathbf{k}, s, s'} (f_B(\mathbf{k}) |\Delta_{\mathbf{k}s, -\mathbf{k}s'}|^2 + f_H(\mathbf{k}) |\nu_{\mathbf{k}s, \mathbf{k}s'}|^2 + f_Y(\mathbf{k}) |\Delta_{\mathbf{k}s, \mathbf{q}_0 - \mathbf{k}s'}|^2 + f_C(\mathbf{k}) |\nu_{\mathbf{q}_0 + \mathbf{k}s, \mathbf{k}s'}|^2) \tag{25.35}$$

mit

$$\begin{aligned}
f_B(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu), \beta(\mu - \epsilon_{\mathbf{k}})), & f_H(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu), \beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)), \\
f_Y(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu), \beta(\mu - \epsilon_{\mathbf{q}_0 - \mathbf{k}})), & f_C(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu), \beta(\epsilon_{\mathbf{q}_0 + \mathbf{k}} - \mu))
\end{aligned} \tag{25.36}$$

abziehen.

Diese quadratische Form ist dann daraufhin zu untersuchen, ob sie positiv definit ist. Für die vier Kanäle, die durch die Indices B , H , Y und C gekennzeichnet sind, hat man jeweils eine quadratische Form

$$\begin{aligned}
\beta F &= \frac{1}{2V_P} \sum_{k,q} (\beta U) (1 + \frac{U}{t} V_{k,q}) \Delta_k^* \Delta_q + \frac{1}{2} \sum_k f_k \Delta_k^* \Delta_k \\
&= \frac{1}{2} \sum_{k,q} \left(\frac{U}{t} A_{k,q} + \left(\frac{U}{t} \right)^2 B_{k,q} + \delta_{k,q} \right) \sqrt{f_k} \Delta_k^* \sqrt{f_q} \Delta_q
\end{aligned} \tag{25.37}$$

mit

$$A_{k,q} = \frac{\beta t}{V_P \sqrt{f_k f_q}}, \quad B_{k,q} = \frac{\beta t V_{k,q}}{V_P \sqrt{f_k f_q}} \tag{25.38}$$

auf ihre Positivität zu untersuchen, wobei natürlich bei zwei Kanälen ν statt Δ steht.

Im weiteren entwickeln wir das großkanonische Potential bis in zweiter Ordnung in ν und Δ . Der Beitrag in erster Ordnung in ν aus $E - \mu \langle \mathcal{N} \rangle$ und der Entropie heben sich weg. Die Beiträge in zweiter Ordnung werden dann einer Stabilitätsanalyse unterworfen. Solange die quadratische Form in ν und Δ positiv definit ist, ist das System stabil mit $\nu = 0$ und $\Delta = 0$. Sobald dieser Ausdruck nicht mehr positiv definit ist, ist dieser symmetrische Zustand instabil. Das System geht in einen Zustand über, in dem ν oder Δ von Null verschieden ist. Man lernt daraus, wann, das heißt bei vorgegebenem U und t bei welcher Temperatur T der Phasenübergang stattfindet.

25.d Symmetrien

25.d.α Gittersymmetrie

Wir betrachten Zustände auf einem quadratischen Gitter. Für dieses Gitter haben wir eine Gruppe von acht Symmetrie-Operationen, die das Gitter in sich überführen. Dies nützt man bei der Stabilitätsanalyse aus. Vier der Operationen sind Rotationen R^n , wobei R eine Rotation um 90° ist. Vier weitere sind Spiegelungen an den beiden Achsen und an den beiden Diagonalen. Zweckmäßig ist es, zunächst zwischen Zuständen gerader und ungerader Parität zu unterscheiden. Die Anwendung des Paritäts-Operators ist in der Ebene eine Rotation um 180° , wird also durch R^2 beschrieben. Da eine Rotation um 360° den Zustand in sich überführt, ist $R^4 = 1$. Die Eigenwerte von R^2 sind also ± 1 (Parität). Die Zustände positiver Parität haben die Form $(\nu(\mathbf{k}) + \nu(-\mathbf{k}))/\sqrt{2}$, die negativer Parität $(\nu(\mathbf{k}) - \nu(-\mathbf{k}))/\sqrt{2}$. Lediglich in den Fällen, in denen $\nu(\mathbf{k})$ mit $\nu(-\mathbf{k})$ übereinstimmt, gibt es nur den Zustand positiver Parität $\nu(\mathbf{k})$. Dies passiert für $\mathbf{k} = (0, 0)$, aber auch für $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, 0)$, $(0, \frac{\pi}{a})$ und $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) = \mathbf{q}_0$, da sich dann \mathbf{k} und $-\mathbf{k}$ durch einen reziproken Gittervektor unterscheiden.

Bei den Zuständen positiver Parität kann man nun vier Fälle unterscheiden. R hat wegen $R^2 = +1$ die Eigenwerte ± 1 . Das Gleiche gilt für die Spiegelungen. Dabei ergeben sich für die Spiegelungen M_a an den Achsen die gleichen Eigenwerte, ebenso für die Spiegelungen M_d an den beiden Diagonalen. In der folgenden Tabelle führen wir erst die Notation für die entsprechende Symmetrie an, dann ein Beispiel, und dann die drei Eigenwerte.

		R	M_a	M_d	
s_+	1	+1	+1	+1	
$s_- = g$	$xy(x^2 - y^2)$	+1	-1	-1	(25.39)
d_+	$x^2 - y^2$	-1	+1	-1	
d_-	xy	-1	-1	+1	

Wenn $M_a = -1$, dann hat die Funktion für $k_x = 0$ und $k_y = 0$ einen Knoten, wie auch für $k_x = \frac{\pi}{a}$ und $k_y = \frac{\pi}{a}$. Falls $M_d = -1$ hat die Funktion für $k_y = \pm k_x$ Knoten.

Für die Zustände ungerader Parität ist es nicht möglich, für alle Operationen simultan einen bestimmten Eigenwert anzugeben. Man kann zum Beispiel $R = \pm i$ verlangen. Dann führt aber jede Spiegelung den Zustand mit $R = +i$ in den mit $R = -i$ über oder umgekehrt. Oder wir suchen einen Zustand, der unter Spiegelung an der x -Achse in sein negatives und unter Spiegelung an der y -Achse in sich übergeht. Dann werden aber die Spiegelungen an einer Diagonalen oder die Rotation um 90° den Zustand in einen überführen, der unter Spiegelung an der y -Achse in sein negatives und unter Spiegelung an der x -Achse in sich übergeht. Da immer zwei Zustände derartig miteinander verknüpft sind, spricht man hier von einer zweidimensionalen Darstellung der Gruppe. Wegen ihrer negativen Parität und da die einfachsten Funktionen x und y sind, spricht man von p -Zuständen. Für die p -Zustände hat man stets zweifache Entartung.

Wir werden die Instabilitäten nach diesen fünf Darstellungen klassifizieren.

25.d.β Alternierende Ordnung

Bei den Wechselwirkung V_A , V_C und V_Y tritt der Vektor \mathbf{q}_0 in Erscheinung, der ein alternierendes Verhalten beschreibt. Wir gehen davon aus, dass V reell ist, da in der symmetrischen Phase Zeitumkehrinvarianz und Paritäts-Erhaltung gilt. Dann erhält man unter Berücksichtigung der Hermitizität und der Symmetrie bei Vertauschung der Paare

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = V(\mathbf{k} + \mathbf{q}_0, \mathbf{q} + \mathbf{q}_0) \quad (25.40)$$

Dies hat zur Folge, dass man Eigenzustände mit $(\nu(\mathbf{k}) \pm \nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}_0))/\sqrt{2}$ bilden kann, die ich mit $Q = \pm 1$ kennzeichne.

25.d.γ Spin-Singulett und Spin-Triplett

Generell ist zwischen Spin-Singulett und Spin-Triplett zu unterscheiden. In dem supraleitenden Kanal haben wir $c_{\mathbf{k}s_1}^\dagger c_{-\mathbf{k}s_2}^\dagger$. Haben wir eine Funktion gerader Parität in \mathbf{k} , so muss die Spinwellen-Funktion

antisymmetrisch sein: Spin-Singulett. Ist sie von ungerader Parität, so ist die Spinwellen-Funktion gerade: Spin-Triplett. Auch für V_Y ergeben sich die Spin-Wellenfunktionen aus den Symmetrien der Orts- (oder besser Impuls-) Wellenfunktionen.

Anders ist die Situation für die Teilchen-Loch-Anregungen, die durch V_H , V_F , V_A und V_C beschrieben werden. Wir zerlegen zum Beispiel

$$\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} = \nu_{\mathbf{q}}^s \delta_{s,s'} + \sum_{\alpha} \nu_{\mathbf{q}}^{t\alpha} \sigma_{s,s'}^{\alpha} \quad (25.41)$$

in die Singulett-Amplitude ν^s und die Triplett-Amplituden $\nu^{t\alpha}$. Damit ergibt sich dann für die Ausdrücke im Hartree- und im Fock-Anteil der Wechselwirkung

$$\sum_{s,s'} \nu_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} = \sum_{s,s'} (\nu_{\mathbf{k}}^{*s} \delta_{s,s} + \sum_{\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{*t\alpha} \sigma_{s,s}^{*\alpha}) (\nu_{\mathbf{q}}^s \delta_{s',s'} + \sum_{\alpha} \nu_{\mathbf{q}}^{t\alpha} \sigma_{s',s'}^{\alpha}) = 4\nu_{\mathbf{k}}^{*s} \nu_{\mathbf{q}}^s \quad (25.42)$$

und

$$\sum_{s,s'} \nu_{\mathbf{k}s',\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} = \sum_{s,s'} (\nu_{\mathbf{k}}^{*s} \delta_{s',s} + \sum_{\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{*t\alpha} \sigma_{s',s}^{\alpha}) (\nu_{\mathbf{q}}^s \delta_{s',s'} + \sum_{\beta} \nu_{\mathbf{q}}^{t\beta} \sigma_{s',s'}^{\beta}) = 2\nu_{\mathbf{k}}^{*s} \nu_{\mathbf{q}}^s + 2 \sum_{\alpha} \nu_{\mathbf{k}}^{*t\alpha} \nu_{\mathbf{q}}^{t\alpha} \quad (25.43)$$

was auf

$$\frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} (2V_H(\mathbf{k},\mathbf{q}) - V_F(\mathbf{k},\mathbf{q})) \nu_{\mathbf{k}}^{*s} \nu_{\mathbf{q}}^s - \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\alpha} V_F(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{k}}^{*t\alpha} \nu_{\mathbf{q}}^{t\alpha} \quad (25.44)$$

führt, wobei hier allerdings $\nu_{\mathbf{k}}$ stets reell ist. Für die anomalen Erwartungswerte sieht die Zerlegung etwas anders aus

$$\Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} = \epsilon_{s,s'} \Delta_{\mathbf{q}}^s + (\epsilon \sigma^{\alpha})_{s,s'} \Delta_{\mathbf{q}}^{t\alpha}. \quad (25.45)$$

mit $\epsilon = \sigma^y$ und der Symmetrie

$$\Delta_{\mathbf{k}}^s = \Delta_{-\mathbf{k}}^s, \quad \Delta_{\mathbf{k}}^{t\alpha} = -\Delta_{-\mathbf{k}}^{t\alpha}. \quad (25.46)$$

Dann folgt

$$\sum_{s,s'} \Delta_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'}^* \Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} = (\epsilon_{s,s'}^* \Delta_{\mathbf{k}}^{*s} + (\epsilon^* \sigma^{*\alpha})_{s,s'} \Delta_{\mathbf{k}}^{*t\alpha}) (\epsilon_{s,s'} \Delta_{\mathbf{q}}^s + (\epsilon \sigma^{\alpha})_{s,s'} \Delta_{\mathbf{q}}^{t\alpha}) = 2\Delta_{\mathbf{k}}^{*s} \Delta_{\mathbf{q}}^s + 2 \sum_{\alpha} \Delta_{\mathbf{k}}^{*t\alpha} \Delta_{\mathbf{q}}^{t\alpha}. \quad (25.47)$$

Für Singulett- und Triplett-Kanal erhalten wir also die gleichen Beiträge. Allerdings gehört das Singulett zu gerader, das Triplett zu ungerader Parität.

Berücksichtigen wir alle drei Symmetrien, so unterscheiden wir

- a) gemäß der Gittersymmetrie s_+ , s_- , d_+ , d_- und p -Zustände,
 - b) homogene und alternierende Ordnungen, letztere mit $Q = +1$ und $Q = -1$,
 - c) Supraleitung und Teilchen-Loch-Ordnung letztere mit $S = 0$ und $S = 1$,
- insgesamt also $5 \times 3 \times 3 = 45$ verschiedene Möglichkeiten der Symmetrie-Brechung.

25.e Diagonalisierung

Für diese 45 Möglichkeiten kann man sich numerisch die Matrizen $V_{k,q}$ und die Entropiefaktoren f_k berechnen und hat dann die Eigenwerte zu untersuchen, das heißt man bestimmt die Eigenwerte von $\frac{U}{t}A + (\frac{U}{t})^2B + 1$. Sobald einer negativ wird, wird das System instabil. Man beachte, dass f , A und B nur von T/t abhängen. Daher bestimmt man für festes T/t den kritischen Eigenwert $(U/t)_c$, für den erstmals ein Eigenwert 0 wird.

Falls die Gittersymmetrie nicht s_+ ist oder $Q = -1$, dann verschwindet der Beitrag aus A und man bestimmt dann den niedrigsten Eigenwert λ von B und erhält das zugehörige $(U/t)_c = 1/\sqrt{-\lambda}$.

Wir geben unten die berechneten Instabilitäten an. Wir müssen sie auch interpretieren. Das Auftreten der Instabilitäten bedeutet, dass das System in einen Zustand niedrigerer freier Energie kommt, indem es den symmetrischen Zustand verlässt und in einen übergeht, für den ν oder Δ verschieden von 0 ist. Gäbe es nur die betrachteten quadratischen Terme in der freien Energie, dann würden ν oder Δ beliebig groß werden. Tatsächlich gibt es Terme höherer Ordnung in der Entropie, die wir nicht berechnet haben, die aber dafür sorgen, dass ν und Δ endlich bleiben. Wir setzen nun die Erwartungswerte von ν und Δ ein und gehen zu der sich daraus ergebenden neuen Normal-Ordnung über. Dann erhalten wir zum Beispiel aus dem V_B -Term von (23.23)

$$\frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s, s'} V_B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) : (\Delta_{\mathbf{k}s, -\mathbf{k}s'}^* + c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger) (\Delta_{\mathbf{q}s, -\mathbf{q}s'} + c_{-\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{q}s}) : \quad (25.48)$$

Summieren wir nun

$$\begin{aligned} \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{q}} V_B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{q}s, -\mathbf{q}s'} &= \epsilon_{ss'} \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{q}} V_B(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \Delta_{\mathbf{q}}^s + \sum_{\alpha} e^{\alpha} (\epsilon \sigma^{\alpha})_{s, s'} \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{q}} V_B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{q}}^t \\ &= \hat{V}_B^s(\mathbf{k}) \epsilon_{ss'} + \hat{V}_B^{t\alpha}(\mathbf{k}) (\epsilon \sigma)_{ss'} \end{aligned} \quad (25.49)$$

mit

$$\sigma = \sum_{\alpha} e^{\alpha} \sigma^{\alpha}. \quad (25.50)$$

Dabei ist \mathbf{e} ein Einheitsvektor. Es kommt hier zum Ausdruck, dass alle Komponenten des Triplets entartet sind, so dass man eine beliebige Überlagerung haben kann. Dann bleibt schließlich außer einer Konstanten, die die Energieabsenkung beschreibt und Termen $: c^\dagger c^\dagger c c :$ in der neuen Normal-Ordnung

$$\sum_{\mathbf{k}, s, s'} (\hat{V}_B^s(\mathbf{k}) \epsilon_{ss'} + \sum_{\alpha} \hat{V}_B^{t\alpha}(\mathbf{k}) (\epsilon \sigma)_{ss'}) : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger : \quad (25.51)$$

Ähnliches gilt für die anderen Kanäle. Wir geben das Verfahren noch explizit für V_H und V_F an. Aus

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s, s'} V_H(\mathbf{k}, \mathbf{q}) : (\nu_{\mathbf{k}s, \mathbf{k}s}^* + c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s}) (\nu_{\mathbf{q}s', \mathbf{q}s'} + c_{\mathbf{q}s'}^\dagger c_{\mathbf{q}s'}) : \\ &- \frac{1}{2V_P} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s, s'} V_F(\mathbf{k}, \mathbf{q}) : (\nu_{\mathbf{k}s', \mathbf{k}s}^* + c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'}) (\nu_{\mathbf{q}s', \mathbf{q}s} + c_{\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{q}s}) : \end{aligned} \quad (25.52)$$

erhalten wir die folgenden Beiträge $: c^\dagger c :$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s} (2V_H(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - V_F(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \nu_{\mathbf{q}}^s c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} - \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, s, s', \alpha} V_F(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \nu_{\mathbf{q}}^{t\alpha} c_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\alpha c_{\mathbf{k}s'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, s} \hat{V}^s(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \sum_{\mathbf{k}, s} \hat{V}^t(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'} c_{\mathbf{k}s'} \end{aligned} \quad (25.53)$$

mit

$$\hat{V}^s(\mathbf{k}) = \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{q}} (2V_H(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - V_F(\mathbf{k}, \mathbf{q})) \nu_{\mathbf{q}}^s, \quad (25.54)$$

$$\hat{V}^t(\mathbf{k}) = -\frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{q}} V_F(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \nu_{\mathbf{q}}^t. \quad (25.55)$$

Auch hier verwenden wir die Entartung des Triplets.

Betrachten wir jetzt noch die Gittersymmetrie. Die Funktionen ν und Δ sind danach klassifiziert. Wegen der Invarianz von $V(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ unter den Symmetrie-Operationen, sind auch die neuen Funktionen $\hat{V}_B(\mathbf{k})$, $\hat{V}^s(\mathbf{k})$ und $\hat{V}^t(\mathbf{k})$ danach zu klassifizieren. Wir geben nun die Funktionen mit den niedrigsten Fourier-Komponenten an

$$\begin{array}{l|l}
 s_+ & 1, \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \\
 s_- = g & \sin(k_x a) \sin(k_y a) (\cos(k_x a) - \cos(k_y a)) \\
 d_+ & \cos(k_x a) - \cos(k_y a) \\
 d_- & \sin(k_x a) \sin(k_y a) \\
 p & \sin(k_x a), \sin(k_y a)
 \end{array} \quad (25.56)$$

Bei halber Füllung ist an der Fermikante $\cos(k_x a) + \cos(k_y a) = 0$. Die zweite angegebene Funktion für s_+ , die auch mit s^* bezeichnet wird, hat daher einen Knoten an der Fermikante. Sie ist aber nicht von der Abstoßung betroffen, das heißt der abstoßende Beitrag in erster Ordnung in U wirkt sich für diese Funktion nicht aus. Daher wurde auch sie als Kandidat für die Supraleitung diskutiert.

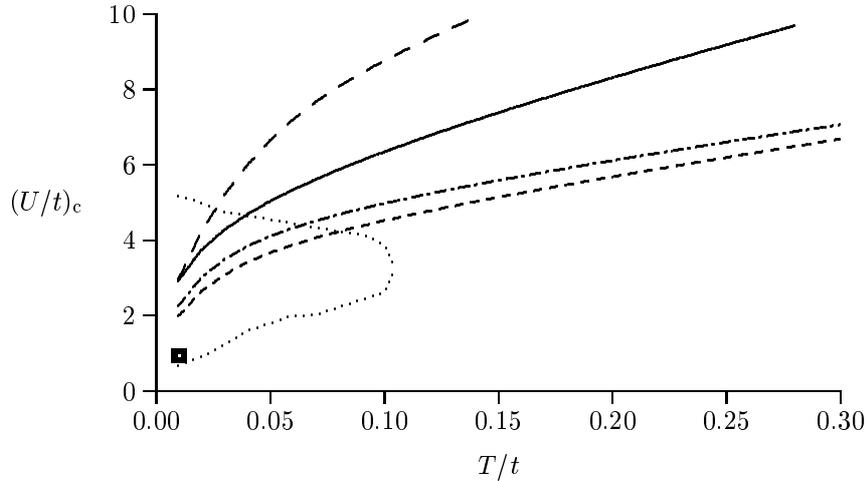
Für V_A , V_C und V_Y müssen wir noch zwischen $Q = +1$ und $Q = -1$ unterscheiden. Dann sind die Funktionen mit den niedrigsten Fourier-Komponenten

	$Q = +1$	$Q = -1$	
s_+	1	$\cos(k_x a) + \cos(k_y a)$	
$s_- = g$	$\sin(k_x a) \sin(k_y a) (\cos(2k_x a) - \cos(2k_y a))$	$\sin(k_x a) \sin(k_y a) (\cos(k_x a) - \cos(k_y a))$	(25.57)
d_+	$\cos(2k_x a) - \cos(2k_y a)$	$\cos(k_x a) - \cos(k_y a)$	
d_-	$\sin(k_x a) \sin(k_y a)$	$\sin(2k_x a) \sin(k_y a) + \sin(k_x a) \sin(2k_y a)$	
p	$\sin(2k_x a), \sin(2k_y a)$	$\sin(k_x a), \sin(k_y a)$	

25.f Ergebnisse

	channel	line pattern
Antiferromagnetism	$ph \ tr \ q_+ \ s_+$
Pomeranchuk instability	$ph \ si \ 0 \ d_+$	-----
Band splitting	$ph \ si \ q_- \ p$	-----
Superconductivity	$pp \ si \ 0 \ d_+$	————
Flux phases	$ph \ si/tr \ q_- \ d_+$
Pomeranchuk instability	$ph \ si \ 0 \ s_- = g$	-----

In den Figuren (auch farbig erhältlich) zeigen wir die kritischen Werte der niedrigsten $(U/t)_c$ als Funktion von T/t für zwei verschiedene Werte von μ/t . Zunächst sind in der Tabelle die wichtigsten auftretenden Instabilitäten angegeben. In der zweiten Reihe charakterisieren wir die Instabilitäten: ph steht für Teilchen-Loch (particle-hole), pp für Teilchen-Teilchen (particle-particle) si für Singulett, tr für Triplet, q_\pm für $Q = \pm 1$, sonst 0.



Antiferromagnetismus Bei $\mu = 0$ (halbe Füllung) ist die niedrigste Instabilität die antiferromagnetische. Es stellt sich allerdings heraus, dass der Beitrag in zweiter Ordnung in U den Antiferromagnetismus unterdrückt. Das ist im Einklang damit, dass für große U die antiferromagnetische Kopplung wieder abnimmt. Wenn wir die halbe Füllung verlassen, wird der Antiferromagnetismus schwächer und verschwindet schließlich.

Die nächste Instabilität ist eine Pomeranchuk- d_+ -Wellen-Instabilität. Sie ergibt einen die tetragonale Symmetrie brechenden Beitrag

$$2m \sum_{\mathbf{k},s} (\cos(k_x a) - \cos(k_y a)) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} = m \sum_{\mathbf{R},s} (c_s^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{a}_x) + c_s^\dagger(\mathbf{R} - \mathbf{a}_x) - c_s^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{a}_y) - c_s^\dagger(\mathbf{R} - \mathbf{a}_y)) c_s(\mathbf{R}). \quad (25.58)$$

Pomeranchuk-Instabilität und Verzerrung Diese Instabilität führt dazu, dass die Fermikante ihre tetragonale Symmetrie verliert und in einer Richtung ausgebuchtet wird. m kann ein beliebiges Vorzeichen haben und wächst betragsmäßig von T_c ab mit fallender Temperatur an. Dem entspricht bei Kopplung an das Gitter eine rhomboedrische Verzerrung und zwar eine rechteckige, die auch tatsächlich in einer Reihe von Hochtemperatur-Supraleitern gefunden wird.

Die damit verknüpfte Verzerrung kann man folgendermaßen verstehen: Die Hüpfmatrix-Elemente hängen vom Abstand der Atome ab, verändern sich also bei Verzerrung. Das führt zu einer Kopplung

$$\begin{aligned} & -(t - \tilde{t} \frac{\partial u_x}{\partial x}) \sum_{\mathbf{R}} (c^\dagger(\mathbf{R} + \mathbf{a}_x) + c^\dagger(\mathbf{R} - \mathbf{a}_x)) c(\mathbf{R}) + (x \rightarrow y) \\ & = -2(t - \tilde{t} \frac{\partial u_x}{\partial x}) \sum_{\mathbf{k}} \cos(k_x a) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + (x \rightarrow y) \end{aligned} \quad (25.59)$$

Dabei beschreibt $\frac{\partial u_x}{\partial x}$ die Verzerrung in x -Richtung. Mit dem Erwartungswert

$$A_x = \sum_{\mathbf{k}} \cos(k_x a) \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle \quad (25.60)$$

und analog für A_y erhält die freie Energie nun die Form

$$F = F_0(A_x, A_y) + 2\tilde{t} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} A_x + \frac{\partial u_y}{\partial y} A_y \right) + \frac{1}{2} C \left(\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 \right) \quad (25.61)$$

Dabei ist F_0 der Beitrag zur freien Energie des Hubbard-Modells ohne Ankopplung an die Verzerrungen. Der letzte Beitrag ist (in vereinfachter Form) die Elastizitäts-Energie des Gitters. Wir müssen nun das Minimum der freien Energie aufsuchen. Bezüglich der Verzerrung führt das auf

$$\frac{\partial F}{\partial \frac{\partial u_x}{\partial x}} = 2\tilde{t} A_x + C \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \quad (25.62)$$

was auf die Verzerrung

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = -\frac{2\tilde{t}}{C} A_x, \quad (25.63)$$

analog für $\partial u_y / \partial y$ führt. Da die Instabilität von d_+ -Symmetrie ist, folgt $A_y = -A_x$ und damit $\partial u_y / \partial y = -\partial u_x / \partial x$.

p-Wellen-Instabilität Als nächstes folgt eine Teilchen-Loch-Instabilität, die zu einem Beitrag

$$\sum_{\mathbf{k},s} i(m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a)) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \quad (25.64)$$

führt. Das ergibt dann Einteilchen-Eigenwerte

$$\hat{\epsilon}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + (m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a))^2}, \quad (25.65)$$

was eine Aufspaltung in zwei Bänder beschreibt, die allerdings an den beiden Stellen $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$ und $m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a) = 0$ zusammenhängen.

Supraleitungs-Instabilität Dieser schließt sich dann erst die Supraleitungs-Instabilität mit $d_{x^2-y^2}$ -Symmetrie an, die allerdings wesentlich stärker als die anderen supraleitenden Instabilitäten ist. Die zugehörigen größten und kleinsten Eigenwerte λ bei halber Füllung multipliziert mit 100 sind in der folgenden Tabelle angegeben.

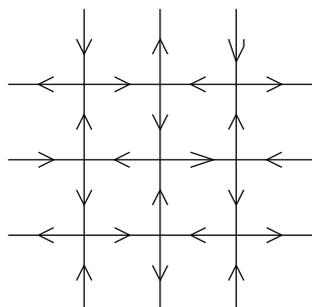
Symmetrie	$T = 0.1t$	$T = 0.03t$
s_+	12.51 ... -0.10	25.90 ... -0.39
$s_- = g$	0.00 ... -0.71	0.00 ... -1.75
d_+	0.01 ... -2.49	0.01 ... -5.49
d_-	0.69 ... -0.04	2.36 ... -0.06
p	1.35 ... -0.32	2.74 ... -0.97

Dabei ist nur der Beitrag zweiter Ordnung für s_+ berücksichtigt. Daraus ergeben sich kritische $(U/t)_c = 6.34$ für $T = 0.1t$ und 4.27 für $T = 0.03t$.

Flussphasen-Instabilität Es folgt die sogenannte Flussphasen-Instabilität, die von verschiedenen Autoren (Kotliar, Affleck und Marston, Chakravarty) diskutiert wurde. (Für $\mu = 0$ ist sie mit der d_+ -Supraleitungs-Instabilität entartet.) Für diese erhält man einen Beitrag zur Einteilchen-Energie

$$\sum_{\mathbf{k}} i(\cos(k_x a) - \cos(k_y a)) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}^\dagger c_{\mathbf{k}} = -\frac{i}{2} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}} (c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_x}^\dagger + c_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_x}^\dagger - c_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_y}^\dagger - c_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_y}^\dagger) c_{\mathbf{R}}. \quad (25.66)$$

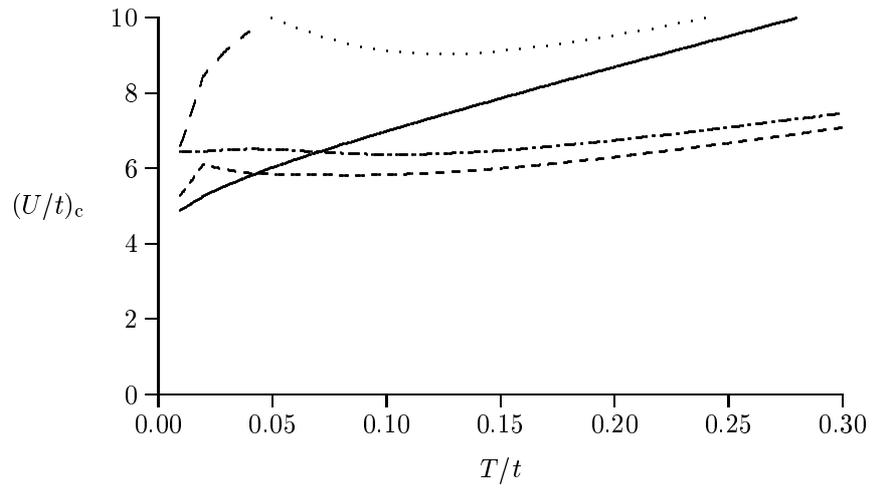
Wir können diesen imaginären Beitrag zum Hüpf-Matrix-Element dadurch veranschaulichen, dass wir jeweils einen Pfeil auf der Kante (link) zwischen den Nachbarpunkten in der Richtung einzeichnen, in der der Imaginärteil positiv ist. In Gegenrichtung ist er dann wegen der Hermitizität negativ.



Man sieht, dass auf dem Weg um eine Quadrat (Plaquette) alle Imaginärteile das gleiche Vorzeichen haben. Dies kann nicht weggeeeicht werden. Vielmehr ist die Summe der Phasen invariant. Sie kann auch durch einen entsprechenden magnetischen Fluss durch das Quadrat erzeugt werden. Daher spricht man von einer Flussphase. Durch diese Störung entsteht ebenfalls eine Aufspaltung in zwei Bänder, die energetisch günstig ist.

Als nächstes kommt eine **g -Wellen-Pomeranchuk-Instabilität**.

Wir haben hier die Instabilitäten in der Reihenfolge ihrer Stärke aufgezählt. Zu beachten bleibt, dass eine Symmetriebrechung häufig andere unterdrückt, so dass sich die stärkste auswirkt. In wieweit die anderen ebenfalls auftreten, müsste separat untersucht werden.



Schließlich zeigen wir noch das Ergebnis für $\mu/t = 1/4$, was einer Dotierung $x = 0.1159$ bis $x = 0.1030$ entspricht. Die antiferromagnetische Instabilität ist völlig verschwunden. Es sei noch darauf hingewiesen, dass die Ergebnisse bei tiefen Temperaturen ($T/t < 0.05$) mit Unsicherheiten verbunden sind. Dies wird gegenwärtig verbessert.

26 Molekularfeld-Näherung

Es gibt viele Systeme, bei denen zwei Phasen bei Annäherung an den sogenannten kritischen Punkt einander immer ähnlicher werden. Das bekannteste Beispiel ist der kritische Endpunkt der Koexistenzlinie von Flüssigkeit und Dampf. An diesem Endpunkt und bei höheren Temperaturen kann man nicht mehr zwischen zwei Phasen unterscheiden: Man hat nur noch das Gas. Ein anderes Beispiel ist ein Ferromagnet. Unterhalb der Curie-Temperatur ist das System ferromagnetisch. Ob der Magnetismus in der einen oder anderen Richtung ausgerichtet ist, hängt von der Vorgeschichte ab. Erwärmt man den Ferromagneten, so nimmt die Magnetisierung ab, bis sie schließlich am Curie-Punkt kontinuierlich verschwindet. Es gibt weitere Arten kontinuierlicher Phasenübergänge. Ihnen allen ist gemeinsam, dass man sie durch einen Ordnungsparameter beschreibt. Im Falle des Ferromagneten ist das die Magnetisierung, im Falle des Gas-Flüssig-Übergangs die Differenz zwischen der Dichte und der kritischen Dichte. Dieser Abschnitt ist in erheblichem Umfang dem Abschnitt II des Überblicks-Artikels von L.P. Kadanoff et al. in *Review of Modern Physics* 39 (1967) p. 395 entnommen.

26.a Landau-Theorie für kritische Phänomene

Landau hat eine allgemeine Formulierung für diese Phasenübergänge gegeben. Er schreibt die freie Energie (wir werden später sehen, dass es sich um ein Zwischending zwischen Hamilton-Funktion und freier Energie handelt) als Integral über den Raum

$$\mathcal{F} = \int d^3r f(\mathbf{r}) \quad (26.1)$$

und entwickelt die Dichte $f(\mathbf{r})$ nach Potenzen des "Feldes" $S(\mathbf{r})$,

$$f(\mathbf{r}) = f_0(T) - h(\mathbf{r})S(\mathbf{r}) + a(T)S^2(\mathbf{r}) + b(T)S^4(\mathbf{r}) + c(T)(\nabla S(\mathbf{r}))^2. \quad (26.2)$$

Dabei sei $S(\mathbf{r})$ die Größe (Operator), deren Erwartungswert der Ordnungsparameter ist, den wir mit m bezeichnen, $m = \langle S(\mathbf{r}) \rangle$. Wir nehmen an, dass die $S(\mathbf{r})$ klassische Größen sind. Der erste Term $f_0(T)$ ergibt die freie Energie bei verschwindendem Ordnungsparameter. Der zweite Term beschreibt die Ankopplung eines äußeren symmetriebrechenden Feldes (im magnetischen Fall eines Magnetfeldes $h = B$). Die weiteren Terme sind gerade in S , da vielfach eine Symmetrie $S \rightarrow -S$ besteht, die nur vom hS -Term gebrochen wird.

Wenn \mathcal{F} die freie Energie ist, dann erhält man den wahrscheinlichsten Zustand als Minimum der freien Energie. Wir ersetzen also unter Vernachlässigung aller Fluktuationen S durch den Erwartungswert m und variieren $m(\mathbf{r}) \rightarrow m(\mathbf{r}) + \delta m(\mathbf{r})$ und erhalten in erster Ordnung in δm

$$\delta \mathcal{F} = \int d^3r \delta m(\mathbf{r}) [-h(\mathbf{r}) + 2am(\mathbf{r}) + 4bm^3(\mathbf{r}) - 2c\Delta m(\mathbf{r})] \quad (26.3)$$

Da der Ausdruck für alle $\delta m(\mathbf{r})$ verschwinden muss, folgt

$$(2a + 4bm^2(\mathbf{r}) - 2c\Delta)m(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}). \quad (26.4)$$

Dann ergibt sich aus (26.4) der Ordnungsparameter. Ist die Lösung dieser Gleichung nicht eindeutig, so ist die mit der niedrigsten freien Energie zu wählen. Damit das Verfahren funktioniert, müssen b und c positiv sein. Falls b negativ ist, muss man einen S^6 -Term in der freien Energie hinzunehmen. Falls c negativ ist, kann der Ordnungsparameter nicht homogen sein.

Im einfachsten Fall ist h konstant. Dann erhält man

$$(2a + 4bm^2)m = h. \quad (26.5)$$

Für $h = 0$ hat die Gleichung die Lösungen

$$m = 0, \quad (26.6)$$

$$m = \pm(-a/2b)^{1/2}. \quad (26.7)$$

Die erste Lösung ergibt das Minimum der freien Energie für $a > 0$, die zweite für $a < 0$. Landau macht nun die einfachste Annahme für die Temperatur-Abhängigkeit von a ,

$$a(T) = a'(T - T_c). \quad (26.8)$$

Oberhalb T_c verschwindet der Ordnungsparameter, unterhalb ist er von 0 verschieden. Sein Vorzeichen kann positiv oder negativ sein. Legt man ein schwaches symmetriebrechendes Feld an, so ergibt sich eine Änderung δm des Ordnungs-Parameters für $T > T_c$ mit

$$2a(m + \delta m) + 4b(m^3 + 3m^2\delta m) = h, \quad (26.9)$$

woraus

$$\begin{aligned} \text{für } T > T_c \quad a > 0, \quad m &= 0, \quad \delta m = \frac{h}{2a} = \frac{h}{2a'(T-T_c)}, \\ \text{für } T < T_c \quad a < 0, \quad m &= (-a/2b)^{1/2}, \quad \delta m = \frac{h}{-4a} = \frac{h}{4a'(T_c-T)} \end{aligned} \quad (26.10)$$

folgt. Die Suszeptibilität divergiert also mit $|T - T_c|^{-1}$.

An der kritischen Temperatur ergibt sich aus (26.5) ein Anwachsen der Magnetisierung mit

$$m = \left(\frac{h}{4b} \right)^{1/3}. \quad (26.11)$$

Schließlich beobachten wir noch, dass die freie Energie bei $h = 0$ von der Form

$$\mathcal{F} = \begin{cases} V_P f_0(T) & \text{für } T > T_c \\ V_P (f_0(T) - a^2/4b) & \text{für } T < T_c. \end{cases} \quad (26.12)$$

ist. Dieser Extra-Beitrag in der freien Energie führt unter Berücksichtigung von

$$C_h = -T \partial^2 \mathcal{F} / \partial T^2 / V_P \quad (26.13)$$

auf einen Sprung in der spezifischen Wärme $\Delta C = T_c a'^2 / 2b$ pro Volumen bei T_c , wobei angenommen wird, dass die zweite Ableitung von $g_0(T)$ stetig ist.

Wir geben eine anschauliche Argumentation für die Beziehung (26.8). Wir betrachten das System auf einer Skala, auf der wir zur Bestimmung der Dichte $S(\mathbf{r})$ bereits mehrere Spins eines Ising-Modells einbeziehen, das heißt wir mitteln über ein Volumen ΔV mit vielen Spins. Dann beschreibt ein $S(\mathbf{r})$ eine große Anzahl von Konfigurationen, die in dem Volumen ΔV die gleiche Gesamt-Magnetisierung haben. Unser \mathcal{F} enthält sowohl die Energie wie auch die Entropie des Systems. Da die Wechselwirkung des Ising-Modells bilinear ist, erwarten wir Terme proportional $S(\mathbf{r})$, wenn ein Magnetfeld anliegt und proportional S^2 und $(\nabla S(\mathbf{r}))^2$. Da eine parallele Ausrichtung der Spins energetisch günstig ist, ist der Vorfaktor a_1 vor S^2 negativ und der Koeffizient c vor $(\nabla S(\mathbf{r}))^2$ positiv. Dazu kommt dann der Entropie-Beitrag. Man kann diesen nach Potenzen von S^2 entwickeln, $S_{\text{ent}} = f_0 + a_2 S^2 + b_2 S^4 + \dots$. Da die Entropie mit wachsender Ordnung, d.h. mit wachsendem S^2 abnimmt und zwar immer stärker, sind a_2 und b_2 negativ. Damit ergibt sich in der freien Energie $\mathcal{F} = E - TS$ ein positiver Koeffizient $b = -Tb_2$, aber $a = a_1 - Ta_2$, wobei sowohl a_1 als auch a_2 negativ ist. Man erkennt, dass a für hohe Temperaturen positiv ist, da der Entropie-Term überwiegt. Für tiefe Temperatur ist a negativ, da der Energie-Term überwiegt. Bei $T = T_c$ heben sie sich im Rahmen der Molekularfeld-Näherung weg.

26.b Korrelationen

Wir betrachten nun die Fluktuationen des Ordnungs-Parameters. Genauer gesagt, wir interessieren uns für die Korrelationen

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle (S(\mathbf{r}) - m)(S(\mathbf{r}') - m) \rangle = \langle S(\mathbf{r})S(\mathbf{r}') \rangle - m^2. \quad (26.14)$$

Diese können wir dadurch erhalten, dass wir uns fragen, um wieviel sich der Ordnungs-Parameter am Ort \mathbf{r} ändert, wenn wir am Ort \mathbf{r}' das h -Feld ändern. Aus

$$\langle A \rangle_\Delta = \frac{\text{tr}(A \exp[(-H + \Delta)/(k_B T)])}{\text{tr}(\exp[(-H + \Delta)/(k_B T)])} = \langle A \rangle_0 + \frac{\langle A \Delta \rangle - \langle A \rangle \langle \Delta \rangle}{k_B T} \quad (26.15)$$

folgt dann in erster Ordnung in δh für $A = S(\mathbf{r})$ und $\Delta = hS(\mathbf{r}')$

$$\delta m(\mathbf{r}) = \delta \langle S(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{k_B T} \int d^3 r' g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta h(\mathbf{r}'). \quad (26.16)$$

Ersetzen wir nun in (26.4) $m(\mathbf{r}) \rightarrow m(\mathbf{r}) + \delta m(\mathbf{r})$ und $h(\mathbf{r}) \rightarrow h(\mathbf{r}) + \delta h(\mathbf{r})$, so folgt

$$(2a + 12bm^2 - 2c\Delta)\delta m(\mathbf{r}) = \delta h(\mathbf{r}). \quad (26.17)$$

Diese Gleichung wird in drei Dimensionen durch

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{k_B T \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\xi)}{8\pi c |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (26.18)$$

mit

$$\xi = \sqrt{\frac{c}{a + 6bm^2}} = \begin{cases} (c/a')^{1/2} (T - T_c)^{-1/2} & \text{für } T > T_c, h = 0, \\ (c/2a')^{1/2} (T_c - T)^{-1/2} & \text{für } T < T_c, h = 0 \end{cases} \quad (26.19)$$

gelöst. Wir sehen daraus, dass sich die Korrelation bei Annäherung an den kritischen Punkt über große Entfernungen, gegeben durch die Korrelationslänge ξ , erstreckt. In drei Dimensionen fällt die Korrelation am kritischen Punkt mit $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ ab. In d Dimensionen erfolgt der Abfall mit $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-(d-2)}$.

26.c Gültigkeits-Bereich der Landau-Theorie

Diese Theorie nimmt an, dass man die freie Energie nach Potenzen des Ordnungsparameters entwickeln kann. Dies gilt für viele Theorien wie der van der Waals Gleichung für eine Flüssigkeit oder der Weisschen Molekularfeldtheorie. Wir haben auch die Supraleitung in dieser Form behandelt. Diese Theorien geben in der Regel korrekte Aussagen, so lange man nicht zu nahe am kritischen Punkt ist. In der unmittelbaren Umgebung des kritischen Punktes ergeben sie aber falsche Ergebnisse.

Ginzburg hat ein Kriterium angegeben, wann die Molekularfeld-Näherung gut ist. Dabei verwendet man folgendes Argument: Man hat erhebliche Fluktuationen des Ordnungsparameters. Jedoch kann man diese über ein Gebiet mitteln. Der größte Abstand, über den das sinnvoll ist, ist die Korrelationslänge. Man verlangt daher, dass die Korrelation klein ist gegen das Quadrat des Ordnungsparameters,

$$\langle \delta S(\mathbf{r}) \delta S(\mathbf{r}') \rangle_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \xi} \ll m^2. \quad (26.20)$$

Wir lassen nun der Einfachheit halber alle Zahlenfaktoren weg, betrachten das Problem aber für allgemeine Dimension d des Raums. Dann ergibt die Ungleichung zunächst

$$\frac{k_B T_c}{c \xi^{d-2}} \ll \frac{|a|}{b}. \quad (26.21)$$

Wir bezeichnen nun die Korrelationslänge bei Temperatur 0 mit ξ_0 und führen die relative Temperaturdifferenz $\tau = \frac{T - T_c}{T_c}$ ein. Dann können wir $\xi = \xi_0 / |\tau|^{1/2}$ und $a = a' T_c \tau$ schreiben, wodurch die Ungleichung die Form

$$\frac{k_B T_c |\tau|^{d/2-1}}{c \xi_0^{d-2}} \ll \frac{a' T_c |\tau|}{b} \quad \text{oder} \quad |\tau|^{2-d/2} \gg \frac{k_B b}{c a' \xi_0^{d-2}} \quad (26.22)$$

annimmt. Wir können nun noch a' , b und c eliminieren, in dem wir die Korrelationslänge bei Temperatur 0 und den Sprung ΔC in der spezifischen Wärme durch diese Größen ausdrücken,

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{c}{a' T_c}}, \quad \Delta C = T_c \frac{a'^2}{b}. \quad (26.23)$$

Wir erhalten dann

$$|\tau|^{2-d/2} \gg \frac{k_B}{\xi_0^d \Delta C}. \quad (26.24)$$

Tatsächlich ist für $d = 3$ noch ein numerischer Faktor einzufügen. Nach der vorhergehenden Rechnung wäre das $1/(16\pi e)$ für $d = 3$. Ginzburg und Levanyuk haben eine etwas sorgfältigere Argumentation durchgeführt und kommen zu dem Ergebnis, dass die Landau-Theorie für $|\tau|$ größer als

$$\tau_c = \frac{1}{32\pi^2} \left(\frac{k_B}{\Delta C \xi_0^3} \right)^2 \quad (26.25)$$

gut sein sollte. Der Faktor ξ_0^6 im Nenner von τ_c zeigt an, dass mit wachsender Reichweite der Kräfte, die zu einer größeren Korrelationslänge ξ_0 führt, der Bereich, in dem die Landau-Theorie nicht gilt, sehr klein werden kann. Dies gilt insbesondere für konventionelle Supraleiter. In Zinn findet man $\xi_0 = 2300 \text{ \AA}$ und $\Delta C = 0.8 \times 10^4 \text{ erg/cm}^3\text{K}$, woraus $\tau_c \approx 10^{-14}$ folgt. Im flüssigen Helium hat man ein ξ_0 , das dem Abstand der Atome entspricht. Es folgt $\tau_c \approx 1$. In Eisen ist der Sprung in der spezifischen Wärme $\Delta C \approx 3 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3 \text{ K}$ und $\xi_0 = 2 \text{ \AA}$, woraus $\tau_c \approx 10^{-2}$ folgt. Im Antiferromagneten haben die Magnetfelder der Spins die Tendenz, sich gegenseitig wegzuheben. Daher ist dort τ_c relativ groß. In Ferroelektrika hat Ginzburg $\tau_c \approx 10^{-4}$ abgeschätzt. Für Antiferroelektrika erwartet man wieder größere τ_c .

Wir haben die obige Rechnung für allgemeine Dimension durchgeführt. Damit haben wir nicht nur eine Abschätzung für zweidimensionale Schichten. Wir sehen noch etwas anderes: Wenn nämlich $d > 4$, dann steht auf der linken Seite der Gleichung (26.24) $|\tau|$ hoch einem negativen Exponenten. Das heißt, dann ist die Umgebung des kritischen Punktes nicht mehr von der Landau-Theorie ausgeschlossen. In vier Raumdimensionen ist $|\tau|^{2-d/2} = 1$. Tatsächlich ist dies ein Grenzfall für die Landau-Theorie, auf den wir zurückkommen werden.

27 Homogenitäts- und Skalengesetze

27.a Potenzgesetze und kritische Exponenten

Bereits um die Jahrhundertwende war bekannt, dass das Molekularfeld-Verhalten etwa der van der Waals-Gleichung das Verhalten in der Umgebung des kritischen Punktes nicht korrekt beschreibt. (Zur Geschichte der kritischen Phänomene siehe J.M.H. Levelt-Sengers, *Physica* 73 (1974) 73.)

Beispielsweise hatte man experimentell gefunden, dass die Dichte des Gases bzw. der Flüssigkeit nicht durch $\rho - \rho_c \propto (T - T_c)^\beta$ mit $\beta = 1/2$ beschrieben wird, sondern mit $\beta = 0.3434$ (Verschaffelt 1900). Auch die anderen Größen, wie Suszeptibilität, spezifische Wärme, Korrelationen zeigten Gesetze mit anderen Potenzen,

$$\begin{array}{ll}
 \text{spezifische Wärme} & C \propto \tau^{-\alpha} \\
 \text{Ordnungsparameter bei } h = 0 & m \propto \tau^\beta \\
 \text{Suszeptibilität} & \chi \propto \tau^{-\gamma} \\
 \text{Ordnungsparameter bei } T = T_c & m \propto h^{1/\delta} \\
 \text{Korrelation bei } T_c & g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2-d-\eta} \\
 \text{Korrelationslänge} & \xi \propto \tau^{-\nu}.
 \end{array} \tag{27.1}$$

Man bezeichnet die Größen $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta$ und ν als kritische Exponenten. In der folgenden Tabelle zeigen wir einige Werte von kritischen Exponenten

Exponent	Molekularfeld	Ising-M.	Ising-M.	Heisenberg-M.	sphärisches M.
		$d = 2$	$d = 3$	$d = 3$	$d = 3$
α	0(Sprung)	0(ln)	0.109	-0.116	-1
β	1/2	1/8	0.325	0.365	1/2
γ	1	7/4	1.241	1.387	2
δ	3	(15)	4.82	4.80	5
η	0	1/4	0.031	0.033	0
ν	1/2	1	0.630	0.705	1

(27.2)

Zunächst haben wir die Molekularfeld-Werte angegeben. Als nächstes die des zweidimensionalen Ising-Modells. Onsager gelang 1944 die Lösung dieses Modells. Er fand, dass die spezifische Wärme eine logarithmische Singularität hat. Weitere Rechnungen, vor allem von Yang (1952), brachten auch die spontane Magnetisierung und die Suszeptibilität. Allerdings kennt man die exakte Lösung nur für $h = 0$. Man erkannte hieraus, wie auch aus Rechnungen für das sphärische Modell (Berlin und Kac 1952), dass die kritischen Exponenten sich durchaus von den Molekularfeld-Werten unterscheiden können. Auf die Werte des dreidimensionalen Ising- und Heisenberg-Modells werde ich später zurückkommen. Es sei aber bereits bemerkt, dass die Werte für das dreidimensionale Ising-Modell auch für Flüssigkeiten am kritischen Punkt zutreffen sollten. Man sieht, dass Verschaffelts Exponent $\beta = 0.3434$, der tatsächlich nicht so präzise gemessen wurde, gut mit dem $\beta = 0.325$ für das Ising-Modell übereinstimmt.

Das sphärische Modell ist ein Modell mit der Wechselwirkung

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} I_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} S(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}') - h \sum_{\mathbf{r}} S(\mathbf{r}), \tag{27.3}$$

wobei die Wechselwirkung kurzreichweitig ist und die Felder $S(\mathbf{r})$ reell sind mit der einzigen Einschränkung $\sum_{\mathbf{r}} S^2(\mathbf{r}) = N$, wobei N die Anzahl der Gitterplätze ist.

27.b Skaleninvarianz und Skalengesetze

27.b.α Kritischer Punkt

Wir wollen jetzt die Idee der Skaleninvarianz einführen. Dazu betrachten wir etwa einen Ferromagneten oder ein Gas-Flüssigkeits-System am kritischen Punkt. Durch ein Mikroskop werden wir Domänen (oder Tröpfchen) unterschiedlicher Größe erkennen. Es wird Tröpfchen in Blasen und Bläschen in Tropfen geben, da der kritische Punkt durch starke Fluktuationen charakterisiert ist. Nun gehen wir

zu einer geringeren Vergrößerung über und reduzieren den Kontrast in geeigneter Weise. Dann werden wir wesentlich das gleiche Bild vor uns haben, das heißt, auf der neuen Skala haben wir die gleiche Verteilung von Domänen (oder Tropfen) vor uns. Wir sagen: Das kritische System ist skaleninvariant. Nehmen wir an, die ursprüngliche Vergrößerung ergibt eine Korrelation des Ordnungsparameters

$$\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r}) \rangle = g(r). \quad (27.4)$$

Eine Vergrößerung der Längenskala um den Faktor b

$$\mathbf{r} = b\mathbf{r}' \quad (27.5)$$

ändert die Dichte des Ordnungsparameters gemäß

$$S(\mathbf{r})d^d r = \tilde{S}(\mathbf{r}')d^d r' = b^{-d}\tilde{S}(\mathbf{r}')d^d r', \quad (27.6)$$

wobei d die Dimension des Raumes ist. Die Änderung des Kontrasts bewirkt einen weiteren Faktor, den wir mit b^{y_h} bezeichnen. Dann gilt

$$S(\mathbf{r}) = b^{y_h-d}S'(\mathbf{r}') \quad (27.7)$$

und

$$\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r}) \rangle = b^{2y_h-2d}\langle S'(\mathbf{0})S'(\mathbf{r}') \rangle. \quad (27.8)$$

Da sich das beobachtete Bild nicht geändert hat, haben wir

$$\langle S'(\mathbf{0})S'(\mathbf{r}') \rangle = g(r'), \quad (27.9)$$

woraus

$$g(r) = b^{2(y_h-d)}g(r/b) \quad (27.10)$$

folgt. Diese Gleichung gilt für eine Änderung der Längenskala um einen Faktor (Vergrößerung) b . Wir können dies p mal anwenden

$$g(r) = b^{2(y_h-d)p}g(r/b^p) \quad (27.11)$$

und können b sehr nahe an eins wählen. Dann erhalten wir mit $b^p = L$ und beliebigem L

$$g(r) = L^{2(y_h-d)}g(r/L). \quad (27.12)$$

Wählen wir schließlich $L = r$, so folgt

$$\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r}) \rangle_c = \frac{g(1)}{r^{d-2+\eta}} \quad (27.13)$$

mit dem kritischen Exponent $\eta = d + 2 - 2y_h$.

27.b.β Kritisches Gebiet

Im kritischen Gebiet ist unser System durch die Temperaturdifferenz $\tau = (T - T_c)/T_c$ und ein symmetriebrechendes Feld h charakterisiert. Wir beobachten das System wieder durch das Mikroskop. Wenn wir nun die Vergrößerung und den Kontrast wie vorher verändern, beobachten wir ein anderes Bild: Das System ist nicht mehr skaleninvariant. Bei einer geringeren Vergrößerung beobachten wir jedoch das Bild, das wir bei der ursprünglichen Vergrößerung bei einer anderen Temperaturdifferenz τ' und einem anderen symmetriebrechenden Feld h' beobachten. Daher ist die Änderung der Längenskala und der Skala des Ordnungsparameters äquivalent zu einer Abbildung von τ und h nach τ' und h' . Dann folgt für den Ordnungsparameter

$$m(\tau, h) = \langle S(\mathbf{r}) \rangle_{\tau, h} = b^{y_h-d}m(\tau', h'). \quad (27.14)$$

Für die Korrelation folgt

$$\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r}) \rangle_{\tau, h} = b^{2(y_h-d)}\langle S'(\mathbf{0})S'(\mathbf{r}') \rangle_{\tau', h'} \quad (27.15)$$

und damit für die Korrelationsfunktion G

$$G(r, \tau, h) = \langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r}) \rangle_{\tau, h} - m^2(\tau, h) = b^{2(y_h-d)} G\left(\frac{r}{b}, \tau', h'\right). \quad (27.16)$$

Auf große Entfernungen ist der Zerfall der Korrelationsfunktion näherungsweise exponentiell,

$$G(r, \tau, h) \propto \frac{\exp(-r/\xi(\tau, h))}{r^{2(d-y_h)}}. \quad (27.17)$$

Dann folgt für die Korrelationslänge

$$\xi(\tau, h) = b\xi(\tau', h'). \quad (27.18)$$

Eine ähnliche Beziehung erhält man für die Suszeptibilität (der Faktor $k_B T$ ist hier weggelassen)

$$\begin{aligned} \chi(\tau, h) &= \int d^d r \langle (S(0) - m)(S(\mathbf{r}) - m) \rangle_{\tau, h} \\ &= b^{2y_h-d} \int d^d r \langle (S'(0) - m')(S'(\mathbf{r}') - m') \rangle_{\tau', h'} \\ &= b^{2y_h-d} \chi(\tau', h'). \end{aligned} \quad (27.19)$$

Wir werden später finden, dass τ' und h' nicht-singuläre Funktionen von τ und h sind. Da sich definitionsgemäß $\tau = 0$, $h = 0$ auf $\tau' = 0$, $h' = 0$ abbilden, können wir für kleine τ und h

$$\tau' = \lambda_E \tau + \lambda' h, \quad (27.20)$$

$$h' = \lambda'' \tau + \lambda_h h \quad (27.21)$$

schreiben. Da ein Vorzeichenwechsel von h nur das Vorzeichen von h' ändern wird, aber nicht τ' , sind $\lambda' = \lambda'' = 0$. Wir betrachten nun den Spezialfall $\tau = 0$. Dann gilt offensichtlich

$$m(0, h) = b^{y_h-d} m(0, \lambda_h h), \quad (27.22)$$

$$\chi(0, h) = b^{2y_h-d} \chi(0, \lambda_h h). \quad (27.23)$$

Differenzieren wir (27.22) nach h , so folgt

$$\chi(0, h) = b^{y_h-d} \lambda_h \chi(0, \lambda_h h). \quad (27.24)$$

Der Vergleich von (27.23) mit (27.24) ergibt

$$\lambda_h = b^{y_h}. \quad (27.25)$$

Ähnlich kann man durch Betrachtung des singulären Anteils der Energie und der spezifischen Wärme

$$\lambda_E = b^{y_E} \quad (27.26)$$

schreiben. Wenn wir nun $b^p = L$ wie früher setzen, dann erhalten wir die Homogenitätsgesetze

$$G(r, \tau, h) = L^{2(y_h-d)} G\left(\frac{r}{L}, \tau L^{y_E}, h L^{y_h}\right), \quad (27.27)$$

$$\xi(\tau, h) = L \xi(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}), \quad (27.28)$$

$$m(\tau, h) = L^{y_h-d} m(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}), \quad (27.29)$$

$$\chi(\tau, h) = L^{2y_h-d} \chi(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}). \quad (27.30)$$

Die Gleichung (27.27) kann nach h integriert werden. Dies ergibt die Dichte der freien Energie, die wir nun mit F bezeichnen (tatsächlich nur den singulären Anteil davon)

$$F_{\text{sing}}(\tau, h) = L^{-d} F_{\text{sing}}(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}). \quad (27.31)$$

Diese Beziehung gibt wieder, dass sich die Dichte der freien Energie mit dem Faktor L^d wie das inverse Volumen umskalt, so dass die freie Energie selbst erhalten bleibt. Genau genommen ziehen wir aus der freien Energie auch noch den Faktor $k_B T$ heraus,

$$F = \mathcal{F}/(V_P k_B T). \quad (27.32)$$

Tatsächlich ist F_{sing} nicht die komplette Dichte der freien Energie. Es gibt noch einen regulären Anteil, der nicht zum kritischen Verhalten beiträgt,

$$F = F_{\text{sing}} + F_{\text{reg}}. \quad (27.33)$$

Differenziert man (27.31) zweimal nach τ , so erhält man den singulären Anteil der spezifischen Wärme

$$C_{\text{sing}}(\tau, h) = L^{2y_E - d} C_{\text{sing}}(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}). \quad (27.34)$$

Aus diesen Ausdrücken können wir nun mit der Wahl $h = 0$ (manchmal auch $\tau = 0$) und $|\tau| L^{y_E} = 1$ ablesen, dass die kritischen Exponenten gegeben sind durch

$$\alpha = \frac{2y_E - d}{y_E}, \quad \beta = \frac{d - y_h}{y_E}, \quad \gamma = \frac{2y_h - d}{y_E}, \quad \delta = \frac{y_h}{d - y_h}, \quad \nu = \frac{1}{y_E}. \quad (27.35)$$

Da nur zwei Skalen-Exponenten y_h und y_E die kritischen Exponenten bestimmen, sind diese nicht unabhängig. Vielmehr gelten die Skalengesetze

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (27.36)$$

$$2 - \alpha = d\nu, \quad (27.37)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (27.38)$$

$$\delta\beta = \beta + \gamma = 2 - \alpha - \beta. \quad (27.39)$$

Der letzte Exponent wird auch mit Δ bezeichnet. Er verknüpft Größen, die sich jeweils in einer Ableitung nach h unterscheiden. Man prüfe diese Skalengesetze für die Daten in der Tabelle (27.1) nach. Für welche Dimension d sind die Daten für die Molekularfeld-Näherung erfüllt?

Das Homogenitätsbild lässt sich experimentell überprüfen. Wir gehen aus von Gleichung (27.29)

$$m(\tau, h) = L^{y_h - d} m(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}) \quad (27.40)$$

und legen L durch $|\tau| L^{y_E} = 1$ fest. Dann folgt

$$\frac{m}{|\tau|^{(d-y_h)/y_E}} = m(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}) \text{ oder } \frac{m}{|\tau|^\beta} = m(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^\Delta}). \quad (27.41)$$

Für den Ferromagneten CrBr_3 wurde $h/|\tau|^\Delta$ gegen $m/|\tau|^\beta$ aufgetragen (Ho und Litster, Phys. Rev. Lett. 22 (1969) 603). Man erkennt, dass die Messpunkte auf zwei Kurven, die eine für $T > T_c$, die andere für $T < T_c$ fallen. Eine ähnliche Auftragung gibt es auch für Nickel (Kouvel und Comly, Phys. Rev. Lett. 20 (1968) 1237). Siehe auch Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Kapitel 11, §4.

Die dabei beobachteten Exponenten sind für CrBr_3 $\beta = 0.368$, $\gamma = 1.215$, für Nickel $\beta = 0.378$, $\gamma = 1.34$.

28 Renormierungsgruppe

28.a Grundidee

Wir haben im vorhergehenden Abschnitt ein intuitives Bild für die Homogenitätsgesetze entwickelt. In diesem Abschnitt wollen wir es mit Renormierungsgruppenideen begründen. Die Beobachtung, dass die Korrelationsfunktion am kritischen Punkt skaleninvariant ist, lässt vermuten, dass auch die effektive Wechselwirkung am kritischen Punkt diese Eigenschaft hat. Wir nennen die Prozedur, die die Skala der Wechselwirkung verändert, Renormierungsgruppe (RG). Wir bezeichnen die Hamilton-Funktion mit \mathcal{H} und führen

$$H = \mathcal{H}/(k_B T) \quad (28.1)$$

ein. Der Einfachheit halber bezeichnen wir H als Hamilton-Funktion. Die Dichte der freien Energie ist definiert als

$$-F = \frac{1}{V_P} \ln \text{tr} \exp(-H). \quad (28.2)$$

Die Renormierungsgruppen-Transformation besteht nun aus zwei Schritten

a) einer Änderung der Längenskala um einen Faktor $b = e^l$ in allen linearen Dimensionen. Wir lassen dabei die Zustandssumme $Z = \ln \text{tr} \exp(-H)$ invariant. Da das Volumen um einen Faktor e^{dl} schrumpft, gilt für die Dichten F

$$F_0 = e^{-dl} F_l. \quad (28.3)$$

b) einer Elimination und/oder Transformation der Freiheitsgrade S , die die freie Energie invariant lässt.

Der zweite Schritt ist notwendig, um einen Hamilton-Operator zu erhalten, der mit dem ursprünglichen verglichen werden kann. Die Dichte der Freiheitsgrade S muss auf die ursprüngliche reduziert werden durch das Ausdünnen der Freiheitsgrade, die Fluktuationen kurzer Wellenlängen beschreiben (Fourier-Komponenten mit großen Wellenlängen). Zum anderen muss das System erweitert werden auf eines mit dem Volumen des ursprünglichen. Dann gibt es eine eins-zu-eins-Entsprechung der ursprünglichen und der neuen Variablen. Wenn wir unser System unter dem Mikroskop betrachten, beobachten wir unter geringerer Vergrößerung weniger Details, was dem Eliminations-Prozess entspricht. Andererseits beobachten wir dann ein größeres Volumen, was der Erweiterung des Volumens entspricht.

Die vollständige RG-Transformation von H_0 nach H_l schreiben wir

$$H_l = R_l(H_0), \quad F(H_0) = e^{-dl} F(H_l). \quad (28.4)$$

In vielen Fällen ist es möglich, die RG-Prozedur für infinitesimales l zu formulieren. Dann kann die erste Gleichung (28.4) in differentieller Form geschrieben werden

$$\frac{dH}{dl} = \mathcal{G}H, \quad (28.5)$$

wobei \mathcal{G} der Generator der Renormierungsgruppe ist. Im allgemeinen wirkt \mathcal{G} nichtlinear auf H .

28.b Fixpunkt, Klassifizierung von Operatoren

Nun machen wir zwei Annahmen:

a) Wir nehmen an, dass es eine Fixpunkt-Hamilton-Funktion H^* gibt,

$$\mathcal{G}H^* = 0. \quad (28.6)$$

H^* ist eine Hamilton-Funktion, die sich auf sich selbst abbildet.

b) Wir nehmen an, dass eine kritische Hamilton-Funktion gegen H^* konvergiert.

$$\lim_{l \rightarrow \infty} H_l = H^*. \quad (28.7)$$

Dies ist eine wesentlich schwächere Bedingung als die Forderung, die kritische Hamilton-Funktion sei H^* . Die Bedingung (28.7) verlangt nur, dass die effektive Wechselwirkung unter der Renormierungsgruppe gegen einen Fixpunkt konvergiert.

Um nun das kritische Verhalten zu untersuchen zerlegen wir den Generator \mathcal{G} in den linearen Anteil \mathcal{L} und den Beiträgen höherer Ordnung \mathcal{Q} ,

$$\mathcal{G}(H^* + \Delta H) = \mathcal{L}\Delta H + \mathcal{Q}(\Delta H), \quad (28.8)$$

wobei $\mathcal{Q}(\Delta H) = O(\Delta H)^2$. Wir definieren nun Eigen-Operatoren (Eigen-Funktionen)

$$\mathcal{L}O_i = y_i O_i \quad (28.9)$$

und nehmen im Folgenden an, dass die Eigen-Operatoren einen kompletten Satz von Operatoren bilden, so dass jede Hamilton-Funktion (jeder Hamilton-Operator) H_0 entwickelt werden kann als

$$H_0 = H^* + \sum_i \mu_i O_i. \quad (28.10)$$

Dann erhalten wir in linearer Ordnung in μ

$$H_l = H^* + \sum_i \mu_i e^{y_i l} O_i. \quad (28.11)$$

Je nach Eigenwert y unterscheidet man

$$\begin{aligned} y > 0 & \quad \text{relevante Operatoren} \\ y = 0 & \quad \text{marginale Operatoren} \\ y < 0 & \quad \text{irrelevante Operatoren.} \end{aligned} \quad (28.12)$$

Der Gleichung (28.11) entnimmt man unmittelbar, dass am kritischen Punkt die Felder (in der Feldtheorie Quellen) μ_i aller relevanten Operatoren verschwinden müssen.

Marginale Operatoren können als relevante oder irrelevante Operatoren agieren. Dies hängt davon ab, ob die nichtlinearen Terme μ_i nach Null oder von Null wegtreiben. Es gibt auch den seltenen Fall, dass ein marginaler Operator eine Linie von Fixpunkten erzeugt wie beim zweidimensionalen Acht-Vertex-Modell.

Es gibt einen speziellen Operator, den konstanten (das heißt den von S unabhängigen) Beitrag $\mu_0 V_P$, für den formal

$$O_0 = V_P, \quad y_0 = d \quad (28.13)$$

gilt, da V_P um einen Faktor e^{-dl} schrumpft, was durch ein Anwachsen von μ_0 um einen Faktor e^{dl} kompensiert wird. Das Hinzufügen einer Konstanten ändert am kritischen Verhalten jedoch nichts. Er ist der Ursprung des regulären Anteils der freien Energie.

Die Art des kritischen Verhaltens hängt von der Anzahl der symmetrie-erhaltenden relevanten Operatoren ab. (Symmetrie-erhaltend bedeutet, dass die Symmetrie des Hamilton-Operators erhalten bleibt; eine spontan gebrochene Symmetrie des Systems wird dadurch nicht ausgeschlossen.) Entwickeln wir

$$\mathcal{H} = \sum_i \mu_i^0 O_i, \quad H^* = \sum_i \mu_i^* O_i, \quad (28.14)$$

so erhalten wir

$$\mu_i = \beta \mu_i^0 - \mu_i^*. \quad (28.15)$$

Für einen normalen kritischen Punkt hat man einen relevanten symmetrie-erhaltenden Operator (außer O_0) O_E , der die kritische Temperatur bestimmt

$$\mu_E \equiv \tau = \beta \mu_E^0 - \mu_E^* = (\beta - \beta_c) \mu_E^0, \quad \beta_c = \frac{\mu_E^*}{\mu_E^0}. \quad (28.16)$$

Grob gesprochen ist O_E proportional zu H abzüglich Erwartungswert am kritischen Punkt. An einem trikritischen Punkt hat man zwei relevante symmetrie-erhaltende Operatoren (außer O_0) und folglich zwei Bedingungen für kritisches Verhalten.

Die RG-Prozedur ist nicht eindeutig definiert. Dies hat eine Anzahl von Folgerungen, die wir hier nur aufzählen (F.W., J. Physics C7 (1974) 2098): H^* hängt von der RG-Transformation ab. Variiert man die RG-Transformation infinitesimal, dann ändert sich H^* um Operatoren, die wir redundant nennen. Formal hängen die Exponenten y der redundanten Operatoren von der Wahl der RG ab, aber die redundanten Operatoren tragen nicht zur freien Energie bei. Daher haben die Exponenten der redundanten Operatoren keine physikalische Bedeutung. Die Exponenten der anderen Operatoren sind invariant gegen infinitesimale Variationen der RG-Gleichungen. Redundante Operatoren können in numerischen Rechnungen recht störend sein, wenn sie formal Eigenwerte $y > 0$ haben. Sie haben nur kurzreichweitige Korrelationen.

28.c Skalen der freien Energie

Nehmen wir an, es reiche aus nur zwei Operatoren O_E und den Operator des Ordnungs-Parameters O_h zu berücksichtigen,

$$H_0 = H^* + \tau O_E + h O_h, \quad (28.17)$$

was

$$H_l = H^* + \tau e^{y_E l} O_E + h e^{y_h l} O_h \quad (28.18)$$

mit

$$F(\tau, h) = e^{-dL} F(\tau e^{y_E l}, h e^{y_h l}) \quad (28.19)$$

ergibt, was mit $L = e^l$ mit der Gleichung für den singulären Anteil der freien Energie (27.31) unseres intuitiven Bilds übereinstimmt.

Normalerweise hat man eine unendliche Anzahl von Störungen $\mu_i O_i$ in Gleichung (28.10). Um ihren Effekt auf das Homogenitätsgesetz zu betrachten, fügen wir wenigstens einen hinzu,

$$H_0 = H^* + \tau O_E + h O_h + \mu_i O_i \quad (28.20)$$

und erhalten

$$H_l = H^* + \tau e^{y_E l} O_E + h e^{y_h l} O_h + \mu_i e^{y_i l} O_i, \quad (28.21)$$

$$F(\tau, h, \mu_i) = |\tau|^{d/y_E} F(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, \frac{\mu_i}{|\tau|^{y_i/y_E}}). \quad (28.22)$$

Wir interessieren uns für das kritische Verhalten, das heißt den Limes $\tau \rightarrow 0$

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\mu_i}{|\tau|^{y_i/y_E}} = \begin{cases} 0 & y_i < 0 \text{ oder } \mu_i = 0 \\ \pm\infty & y_i > 0 \text{ und } \mu_i \neq 0. \end{cases} \quad (28.23)$$

Falls O_i relevant ist, ($y_i > 0$), dann muss μ_i explizit berücksichtigt werden. Für irrelevante Operatoren kann der Term $\mu_i/|\tau|^{y_i/y_E}$ vernachlässigt werden, wenn F nach Potenzen von μ_i entwickelt werden kann. Man beachte, dass die rechte Seite von (28.21) die freie Energie weit entfernt vom kritischen Punkt enthält. Der irrelevante Operator führt zu einer Korrektur zum Skalen-Verhalten

$$F = |\tau|^{d/y_E} F(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, 0) + \mu_i |\tau|^{(d-y_i)/y_E} F'(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, 0) + \dots \quad (28.24)$$

Solch eine Korrektur wurde im superfluiden Helium gefunden (Ahlers, Phys. Rev. A8 (1973) 530).

28.d Korrelationen

Bisher haben wir nur translationsinvariante Operatoren betrachtet. Wir können auch die Eigenwertgleichung für einen lokalen Operator \tilde{O}_i betrachten

$$\mathcal{L}\tilde{O}_i = -x_i \tilde{O}_i. \quad (28.25)$$

Dann ergibt sich in linearer Näherung aus

$$H_0 = H^* + \lambda_i \tilde{O}_i. \quad (28.26)$$

die Hamilton-Funktion

$$H_l = H^* + \lambda_i e^{-x_i l} \tilde{O}_i. \quad (28.27)$$

An Stelle von \tilde{O}_i , das eine Funktion der $S(\mathbf{r}')$ ist, können wir $\tilde{O}_i(\mathbf{r})$, das wir erhalten, indem wir $S(\mathbf{r}')$ durch $S(\mathbf{r}' + \mathbf{r})$ ersetzen. Dieser Operator $\tilde{O}_i(\mathbf{r})$ wirkt in der Umgebung von \mathbf{r} . Aus

$$H_0 = H^* + \lambda_i \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \quad (28.28)$$

folgt dann

$$H_l = H^* + \lambda_i e^{-x_i l} \tilde{O}_i(\mathbf{r}e^{-l}), \quad (28.29)$$

da die Längenskala unter der RG-Transformation um einen Faktor e^{-l} schrumpft.

Wir können nun die Exponenten x_i und y_i durch Einführen des translationsinvarianten Operators

$$O_i = \int d^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \quad (28.30)$$

miteinander verknüpfen. Wir erhalten dann aus

$$H_0 = H^* + \mu_i O_i = H^* + \mu_i \int d^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \quad (28.31)$$

die Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H_l &= H^* + \mu_i e^{-x_i l} \int d^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}e^{-l}) \\ &= H^* + \mu_i e^{(d-x_i)l} \int d^d (r e^{-l}) \tilde{O}_i(\mathbf{r}e^{-l}) \\ &= H^* + \mu_i e^{(d-x_i)l} O_i. \end{aligned} \quad (28.32)$$

Der Vergleich mit (28.11) ergibt

$$y_i = d - x_i, \quad (28.33)$$

es sei denn das Integral verschwindet, was passiert, wenn man den Gradienten eines Operators \tilde{O}_i betrachtet. Man überzeugt sich in diesem Fall leicht, dass aus (28.29)

$$\mathcal{L} \nabla \tilde{O}_i = -(x_i + 1) \nabla \tilde{O}_i \quad (28.34)$$

folgt.

Aus einem Hamilton-Operator

$$H_0 = H^* + \tau O_E + h O_h + \lambda_1 \tilde{O}_h(\mathbf{0}) + \lambda_2 \tilde{O}_h(\mathbf{r}) \quad (28.35)$$

folgt dann

$$H_l = H^* + \tau e^{y_E l} O_E + h e^{y_h l} O_h + \lambda_1 e^{(y_h - d)l} \tilde{O}_h(\mathbf{0}) + \lambda_2 e^{(y_h - d)l} \tilde{O}_h(\mathbf{r}e^{-l}). \quad (28.36)$$

Differenzieren wir die zugehörige freie Energie (diesmal nicht die Dichte), so erhalten wir die Korrelationsfunktion

$$G(\mathbf{r}, \tau, h) = -\frac{\partial^2}{\partial \lambda_1 \partial \lambda_2} (V_0 F(H_0))|_{\lambda_1 = \lambda_2 = 0} \quad (28.37)$$

Da die freie Energie unter der Renormierungsgruppe erhalten bleibt, $V_0 F(H_0) = V_l F(H_l)$, folgt

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \tau, h) &= -\frac{\partial^2}{\partial \lambda_1 \partial \lambda_2} (V_l F(H_l))|_{\lambda_1 = \lambda_2 = 0} \\ &= e^{2(y_h - d)l} G(r e^{-l}, \tau e^{y_E l}, h e^{y_h l}), \end{aligned} \quad (28.38)$$

womit dann auch (27.27) hergeleitet ist.

28.e Nichtlineare Beiträge

Bisher haben wir angenommen, dass wir nur den linearen Term \mathcal{L} des Generators \mathcal{G} zu berücksichtigen brauchen. Wir wollen nun betrachten, was nicht-lineare Terme bewirken. Dazu nehmen wir auch Beiträge zweiter Ordnung in \mathcal{G} mit und erhalten die Gleichungen

$$\frac{d\mu_i}{dl} = y_i \mu_i + \frac{1}{2} \sum_{j,k} a_{i,j,k} \mu_j \mu_k + O(\mu^3) \quad (28.39)$$

28.e.α Nichtlineare Skalenfelder

Wir können nun nicht-lineare Skalenfelder g_i einführen, die exakt

$$\frac{dg_i}{dl} = y_i g_i \quad (28.40)$$

genügen sollen, wobei auch diese nach den μ entwickelt werden,

$$g_i = \mu_i + \frac{1}{2} \sum_{j,k} b_{i,j,k} \mu_j \mu_k + O(\mu^3). \quad (28.41)$$

Setzen wir nun (28.41) in (28.40) ein, so folgt

$$y_i \mu_i + \frac{1}{2} \sum_{j,k} a_{i,j,k} \mu_j \mu_k + \frac{1}{2} \sum_{j,k} (y_j + y_k) b_{i,j,k} \mu_j \mu_k = y_i \mu_i + \frac{1}{2} \sum_{j,k} y_i b_{i,j,k} \mu_j \mu_k + O(\mu^3), \quad (28.42)$$

was mit

$$b_{i,j,k} = \frac{a_{i,j,k}}{y_i - y_j - y_k} \quad (28.43)$$

gelöst wird. Solange also jeweils $y_i \neq y_j + y_k$ (und entsprechendes für Terme in höherer Ordnung in μ), kann man diese Skalenfelder g einführen. Für diese gilt exakt

$$F(\dots g_i \dots) = e^{-dl} F(\dots g_i e^{y_i l} \dots). \quad (28.44)$$

28.e.β Regulärer Anteil der freien Energie

Addiert man eine Konstante zur Wechselwirkung, so ändert diese nur μ_0 im Beitrag $\mu_0 V_P$ in Gleichung (28.13). Sie wirkt sich aber nicht auf die anderen μ aus. Daher gilt

$$F(g_0 \dots g_i \dots) = g_0 + F(0 \dots g_i \dots) \quad (28.45)$$

Der reguläre Term der freien Energie ist nun

$$F_{\text{reg}} = g_0 = \mu_0 + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \frac{a_{0,j,k}}{d - y_j - y_k} \mu_j \mu_k + O(\mu^3), \quad (28.46)$$

während der zweite Beitrag in (28.45) der singuläre Beitrag ist. Der reguläre Beitrag wird in der Regel einen Beitrag proportional τ^2 enthalten, der dann einen Untergrund zur spezifischen Wärme liefert.

28.e.γ Logarithmische spezifische Wärme

Falls der kritische Exponent der spezifischen Wärme verschwindet, $\alpha = 0$, folgt aus (27.35) $2y_E = d$. In diesem Fall kann das Skalenfeld g_0 nicht so einen einfachen Term proportional τ^2 haben, da der Nenner in (28.43) verschwindet. Beschränken wir uns auf das Gleichungssystem

$$\frac{d\mu_0}{dl} = d\mu_0 + \frac{1}{2} a_{0,E,E} \tau^2, \quad \frac{d\tau}{dl} = y_E \tau, \quad (28.47)$$

so folgt

$$g_0 = \mu_0 - \frac{1}{2} a_{0,E,E} (l - l_0) \tau^2, \quad g_E = \tau. \quad (28.48)$$

Dabei ist l_0 eine Integrationskonstante. Wir können nun, da g_E mit $e^{dl/2}$ anwächst, $l - l_0 = \frac{2}{d} \ln |g_E| = \frac{2}{d} \ln |\tau|$ schreiben und finden schließlich

$$g_0 = \mu_0 - \frac{1}{d} a_{0,E,E} \tau^2 \ln |\tau|, \quad g_E = \tau. \quad (28.49)$$

Jetzt steckt in dem bisher regulären g_0 die logarithmische Singularität, während der singuläre Anteil $\tau^2 F_{\text{sing}}(\tau = \pm 1)$ einen Sprung in der spezifischen Wärme enthalten kann. Eine logarithmische Singularität der spezifischen Wärme tritt im zweidimensionalen Ising-Modell auf (Onsager). Im Acht-Vertex-Modell (Baxter) findet man logarithmische Singularitäten der Form $(T - T_c)^n \ln |T - T_c|$ für gerade n . Die hier gegebene Erklärung findet sich bereits bei Widom und bei Kadanoff.

28.e.δ Marginaler Operator

Interessantes Verhalten ergibt sich auch, wenn ein marginaler Operator O_m auftritt, $y_m = 0$. Dann folgt aus

$$\frac{d\mu_m}{dl} = \frac{1}{2} a_{mmm} \mu_m^2 \quad (28.50)$$

die Lösung

$$\mu_m(l) = -\frac{2}{a_{mmm}(l + l_0)} = \frac{2\mu_m(0)}{2 - a_{mmm}l\mu_m(0)}. \quad (28.51)$$

Falls $a_{mmm}\mu(0)$ und damit $l_0 = 2/(a\mu_m(0))$ negativ ist, konvergiert $\mu(l)$ (sehr) langsam gegen 0, ist es dagegen positiv, so divergiert es. Hat man nun für τ die Gleichung

$$\frac{d\tau}{dl} = y_E \tau + a_{EmE} \mu_m \tau, \quad (28.52)$$

so folgt

$$\tau(l) = e^{y_E l} \left(\frac{l + l_0}{l_0} \right)^{-2a_{EmE}/a_{mmm}} \tau(0) \quad (28.53)$$

Dies führt dazu, dass man für Erwartungswerte nicht nur Potenzen von τ , sondern auch Potenzen von τ multipliziert mit nicht ganzzahligen Potenzen von $|\ln |\tau||$ erhalten kann. Solche Singularitäten wurden zuerst für das sphärische Modell gefunden, später generell für die S^4 -Theorie in $d = 4$ Dimensionen (Larkin und Khmel'nitskii), wie auch für die S^6 -Theorie in $d = 3$ Dimensionen (Riedel und F.W.). Dies gilt auch in $d = 3$ für bestimmte Systeme mit Dipol-Wechselwirkung.

Literaturangaben in F.W., The Critical State, General Aspects, in C. Domb and M.S. Green (eds.) Phase Transitions and Critical Phenomena, Academic Press, 6 (1976) p.7-124

29 Renormierungs-Gruppe mit scharfem Abschneide-Impuls

29.a Ursprung der Renormierung

Das Problem der Renormierung trat zunächst in der Elementarteilchenphysik auf. Es besteht darin, dass bei der störungstheoretischen Berechnung von Größen Integrale auftreten, die divergieren, und zwar um so mehr, je höher die Ordnung der Entwicklung ist. Was tun? Die Integrale divergieren meist bei großen Wellenvektoren. Führt man einen maximalen Wellenvektor ein, bis zu dem man integriert, so bleiben die Integrale endlich. Man weiß aber nicht, welchen maximalen Wellenvektor Λ man verwenden soll. Man verglich daher die Ergebnisse für verschiedene große Λ und fand, dass man bei geeignetem Umskalen verschiedener Größen und geeignetem Verändern von Kopplungen einen Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ definieren kann, der endliche Ergebnisse für Größen von festen Wellenvektoren ergibt. Das Verfahren, das einem den Zusammenhang der Kopplungen und Skalen mit der Änderung des Abschneide-Impulses Λ ergibt, nennt man Renormierungsgruppe.

In der Festkörperphysik hat man dieses Problem in der Regel nicht. Man geht zum Beispiel von einem periodischen Gitter aus. Dann sind die Integrationen nur innerhalb der Brillouinzone auszuführen. Man hat einen natürlichen Abschneide-Impuls Λ . Trotzdem ist auch hier die Renormierungsgruppe bei den kritischen Phänomenen eingezogen. Da wir hier die Längenskala ändern müssen, sind wir (zumindest bei einem scharfen Abschneiden) gezwungen, die Freiheitsgrade, die nach dem Umskalen Wellenvektoren größer Λ haben, auszuintegrieren und zu verfolgen, wie sich dadurch die effektive Wechselwirkung bei kleinen Wellenvektoren verändert.

29.b Renormierung der Landau-Wechselwirkung

Wir wollen nun eine explizite Rechnung mit der Renormierungs-Gruppe durchführen. Wir gehen aus von einer Wechselwirkung der Form vom Landau-Typ (26.2)

$$H = \int d^d r \left(\frac{1}{2} (\nabla \mathbf{S}(\mathbf{r}))^2 + \frac{a_1}{2} \mathbf{S}(\mathbf{r})^2 - \mathbf{h} \mathbf{S}(\mathbf{r}) + \frac{a_2}{4} (\mathbf{S}(\mathbf{r})^2)^2 \right). \quad (29.1)$$

Diese Wechselwirkung haben wir gleich für das isotrope n -Vektormodell hingeschrieben. Das Feld unseres Ordnungsparameters hat also n Komponenten und die Wechselwirkung ist isotrop (bis auf den Term $\mathbf{h} \mathbf{S}$, der für $\mathbf{h} \neq \mathbf{0}$ eine Richtung auszeichnet).

Wir führen zunächst die Skalentransformationen durch. Dies ergibt mit $\eta = 0$

$$H' = \int d^d r' \left(\frac{1}{2} (\nabla' \mathbf{S}'(\mathbf{r}'))^2 + \frac{a_1}{2} b^2 \mathbf{S}'(\mathbf{r}')^2 - \mathbf{h} b^{d/2+1} \mathbf{S}'(\mathbf{r}') + \frac{a_2}{4} b^{4-d} (\mathbf{S}'(\mathbf{r}')^2)^2 \right), \quad (29.2)$$

wobei wir $\mathbf{r} = b \mathbf{r}'$, $\mathbf{S}(\mathbf{r}) = b^{1-d/2} \mathbf{S}'(\mathbf{r}')$ substituiert haben. Wir lassen im Folgenden die Striche ' weg. Wir drücken die Wechselwirkung nun durch die Fourier-Komponenten

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_P}} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (29.3)$$

aus und erhalten

$$H' = \sum_{\mathbf{q}} \frac{q^2 + a_1 b^2}{2} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} - \sqrt{V_P} \mathbf{h} b^{d/2+1} \mathbf{S}_0 + \frac{a_2 b^{4-d}}{4 V_P} \sum (\mathbf{S}_{\mathbf{q}_1} \mathbf{S}_{\mathbf{q}_2}) (\mathbf{S}_{\mathbf{q}_3} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3}). \quad (29.4)$$

Wir gehen davon aus, dass die ursprüngliche Wechselwirkung H Fourier-Komponenten bis Λ enthielt. Auf Grund der Skalentransformation enthält die Wechselwirkung H' Fourier-Komponenten bis Λb . Wir müssen daher die Fourier-Komponenten zwischen Λ und Λb eliminieren. Wir müssen daher

$$e^{-H_i} = \prod_{|\mathbf{q}| > \Lambda, \alpha} \left(\int dS_{\mathbf{q}\alpha} \right) e^{-H'} \quad (29.5)$$

ausintegrieren. Dabei numeriert der Index α die n Komponenten von \mathbf{S} . Wir werten dieses Integral aus, indem wir uns fragen: Wie ändern sich die Koeffizienten a_1 und a_2 vor \mathbf{S}_0^2 und $(\mathbf{S}_0^2)^2$? Diese Beiträge rühren her von

$$\Delta H' = \frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} (q^2 + b^2 a_1) \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} + \frac{a_2 b^{4-d}}{2V_P} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} (\mathbf{S}_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}) (\mathbf{S}_0^2) + \frac{a_2 b^{4-d}}{V_P} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} (\mathbf{S}_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_0) (\mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \mathbf{S}_0). \quad (29.6)$$

Mit der Wahl $b = e^l$, l infinitesimal, sind alle anderen Beiträge vernachlässigbar. Wir schreiben diese Wechselwirkung in der Form

$$\Delta H' = \frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} (q^2 + b^2 a_1) S_{\mathbf{q}\alpha} S_{-\mathbf{q}\beta} (\delta_{\alpha,\beta} + f_{\alpha,\beta}), \quad (29.7)$$

wobei

$$f_{\alpha\beta} = c' (\delta_{\alpha,\beta} \mathbf{S}_0^2 + 2S_{0\alpha} S_{0\beta}), \quad c' = \frac{a_2 b^{4-d}}{V_P (q^2 + b^2 a_1)}. \quad (29.8)$$

Nun ist

$$\begin{aligned} & \int dS_{\mathbf{q},1} dS_{\mathbf{q},2} \dots dS_{\mathbf{q},n} dS_{-\mathbf{q},1} dS_{-\mathbf{q},2} \dots dS_{-\mathbf{q},n} \exp \left(- \sum_{\alpha\beta} (q^2 + b^2 a_1) S_{\mathbf{q}\alpha} S_{-\mathbf{q}\beta} (\delta_{\alpha,\beta} + f_{\alpha,\beta}) \right) \\ &= \frac{\text{const}}{(q^2 + b^2 a_1)^n \det(1 + f)}, \end{aligned} \quad (29.9)$$

was

$$\prod_{|\mathbf{q}| > \Lambda, \alpha} \left(\int dS_{\mathbf{q}\alpha} \right) \exp(-\Delta H') = \text{const} \exp \left(- \frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} \ln \det(1 + f) \right) \quad (29.10)$$

ergibt. Wir entwickeln nun nach Potenzen von f

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} \ln \det(1 + f) &= \frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} \ln \left(1 + \sum_{\alpha} f_{\alpha\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (f_{\alpha\alpha} f_{\beta\beta} - f_{\alpha\beta} f_{\beta\alpha}) + \dots \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} \left(\sum_{\alpha} f_{\alpha\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} f_{\beta\alpha} + \dots \right) \end{aligned} \quad (29.11)$$

Für infinitesimales l ergibt die Summe

$$\sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} g(q) = V_P l c g(\Lambda), \quad (29.12)$$

wobei c eine Konstante ist und sich c' auf

$$c' = \frac{a_2}{V_P (a_1 + \Lambda^2)} \quad (29.13)$$

reduziert. Damit haben wir dann

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha\alpha} = (n+2) \frac{a_2}{V_P (a_1 + \Lambda^2)} \mathbf{S}_0^2, \quad (29.14)$$

$$\sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} f_{\beta\alpha} = (n+8) \frac{a_2^2}{V_P^2 (a_1 + \Lambda^2)^2} (\mathbf{S}_0^2)^2 \quad (29.15)$$

und damit schließlich den Beitrag der Eliminations-Prozedur

$$\frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{q}| > \Lambda} \ln \det(1 + f) = \frac{1}{2} (n+2) \frac{l c a_2}{a_1 + \Lambda^2} \mathbf{S}_0^2 - \frac{1}{4} (n+8) \frac{l c a_2^2}{V_P (a_1 + \Lambda^2)^2} (\mathbf{S}_0^2)^2. \quad (29.16)$$

Berücksichtigen wir die Änderung von a_1 , a_2 und h nach (29.4) und (29.16), so erhalten wir die Differentialgleichungen

$$\frac{da_1}{dl} = 2a_1 + \frac{a_2 c(n+2)}{a_1 + \Lambda^2}, \quad (29.17)$$

$$\frac{da_2}{dl} = (4-d)a_2 - \frac{a_2^2 c(n+8)}{(a_1 + \Lambda^2)^2}, \quad (29.18)$$

$$\frac{dh}{dl} = \left(\frac{d}{2} + 1\right)h. \quad (29.19)$$

29.c ϵ -Entwicklung

Für den Fixpunkt muss nun gelten

$$\frac{da_1}{dl} = \frac{da_2}{dl} = \frac{dh}{dl} = 0. \quad (29.20)$$

Da die soeben durchgeführte Rechnung exakt ist für $a_2 = 0$, erwarten wir, dass sie eine gute Näherung für kleine a_2 darstellt. Auf Grund der Landau-Theorie erwarten wir, dass a_1 im kritischen Gebiet klein ist. Wir entwickeln daher die Gleichungen bis zur quadratischen Ordnung in den a s,

$$\frac{da_1}{dl} = 2a_1 + \frac{c}{\Lambda^2}(n+2)a_2 - \frac{c}{\Lambda^4}(n+2)a_1 a_2, \quad (29.21)$$

$$\frac{da_2}{dl} = \epsilon a_2 - \frac{c}{\Lambda^4}(n+8)a_2^2, \quad (29.22)$$

wobei wir die Abkürzung

$$\epsilon = 4 - d \quad (29.23)$$

eingeführt haben.

Wir finden dann

a) den trivialen Fixpunkt mit

$$a_1^* = 0, \quad a_2^* = 0, \quad h^* = 0, \quad (29.24)$$

b) den nicht-trivialen Fixpunkt

$$a_1^* = -\frac{\epsilon(n+2)\Lambda^2}{2(n+8)}, \quad a_2^* = \frac{\epsilon\Lambda^4}{c(n+8)}, \quad h^* = 0. \quad (29.25)$$

Diese Größen sind also für kleines ϵ tatsächlich klein. Linearisieren wir jetzt die Gleichungen um den Fixpunkt, so finden wir

$$\frac{da_1}{dl} = \left(2 - \frac{c}{\Lambda^4}(n+2)a_2^*\right)(a_1 - a_1^*) + \dots(a_2 - a_2^*), \quad (29.26)$$

$$\frac{da_2}{dl} = \left(\epsilon - \frac{2c}{\Lambda^4}(n+2)a_2^*\right)(a_2 - a_2^*). \quad (29.27)$$

Daraus ergeben sich dann die Skalenexponenten für den trivialen Fixpunkt

$$y_E = 2, \quad y_2 = \epsilon, \quad y_h = 3 - \frac{\epsilon}{2} \quad (29.28)$$

und für den nicht-trivialen Fixpunkt zu

$$y_E = 2 - \frac{n+2}{n+8}\epsilon, \quad y_2 = -\epsilon, \quad y_h = 3 - \frac{\epsilon}{2}. \quad (29.29)$$

Für $d < 4$ hat der nicht-triviale Fixpunkt einen, der triviale Fixpunkt zwei relevante symmetrienerhaltende Operatoren. Daher erwartet man für $d < 4$, dass der nicht-triviale Fixpunkt das Verhalten in der Umgebung eines normalen kritischen Punktes beschreibt. Der triviale Fixpunkt beschreibt das trikritische Verhalten in drei Dimensionen.

$$\alpha = \frac{1}{2}, \beta = \frac{1}{4}, \gamma = 1. \quad (29.30)$$

Wir hatten anfangs $\eta = 0$ gesetzt. Natürlich ist diese Größe zunächst unbestimmt. Zu bestimmen ist sie aus dem Vorfaktor von $(\nabla \mathbf{S}(\mathbf{r}))^2$. In der Tat ist dieser Term der Hamilton-Funktion der einzige, der nicht klein ist. Er muss erhalten bleiben. Es stellt sich heraus, ohne dass wir das näher untersucht haben, dass η in erster Ordnung in ϵ gleich Null bleibt.

Es sei erwähnt, dass man bei der obigen Rechnung zum Beispiel eine kubische Anisotropie $\sum_{\alpha} S_{\alpha}^4(\mathbf{r})$ hinzufügen kann. Es ergibt sich dann ein interessantes Flussdiagramm für a_2 und die neue Kopplung.

29.d Ergebnisse für das isotrope n -Vektormodell

Was wir soeben betrachtet haben, ist der Anfang der ϵ -Entwicklung, das heißt einer Entwicklung der Exponenten in Potenzen von $\epsilon = 4 - d$. Die Terme in Ordnung ϵ haben wir gerade berechnet. Wir geben noch die Terme in Ordnung ϵ^2 an. Aus η und γ kann man die anderen Exponenten α , β , δ und ν aus (27.36) bis (27.39) berechnen. Der Exponent ω beschreibt die führende Korrektur zum Skalen, $\omega = (d - y_i)/y_E$ in (28.24)

$$\eta = \frac{n+2}{2(n+8)^2} \epsilon^2 + O(\epsilon^3), \quad (29.31)$$

$$\gamma = 1 + \frac{n+2}{2(n+8)} \epsilon + \frac{(n+2)(n^2+22n+52)}{4(n+8)^3} \epsilon^2 + O(\epsilon^3), \quad (29.32)$$

$$\omega = \epsilon - \frac{3(3n+14)}{(n+8)^2} \epsilon^2 + O(\epsilon^3). \quad (29.33)$$

Wir beobachten, dass die Exponenten sowohl von der Dimension $4 - \epsilon$ als auch von der Anzahl n der Komponenten des Ordnungsparameters $\mathbf{m} = \langle \mathbf{S} \rangle$ abhängen. Systeme, die durch ein und denselben Fixpunkt beschrieben werden, haben gleiche kritische Exponenten. Man sagt, sie gehören zur gleichen Universalitätsklasse. Konventionelle kritische und trikritische Phasenübergänge gehören zu verschiedenen Universalitätsklassen. Systeme mit der langreichweitigen Dipol-Wechselwirkung werden durch eine weitere Universalitätsklasse beschrieben.

Stanley hat gezeigt, dass das n -Vektormodell im Limes $n \rightarrow \infty$ durch das sphärische Modell beschrieben wird. Für dieses erhält man im Bereich $2 < d \leq 4$ die Exponenten $\eta = 0$, $\gamma = 2/(d-2)$. Ausgehend von diesem Limes gibt es eine $1/n$ -Entwicklung. Für $d = 3$ Raumdimensionen ergibt diese

$$\eta = \frac{8}{3\pi^2 n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right), \quad (29.34)$$

$$\gamma = 2 - \frac{24}{\pi^2 n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (29.35)$$

Schließlich haben Mermin und Wagner gezeigt, dass es für $n \geq 2$ keine spontane Magnetisierung bei endlichen Temperaturen gibt. Für $n > 2$ gibt es die folgende Entwicklung in $\epsilon' = d - 2$

$$\eta = \frac{\epsilon'}{n-2} + O(\epsilon'^2), \quad (29.36)$$

$$\nu = \frac{1}{\epsilon'} - \frac{1}{n-2} + \frac{4-n}{2(n-2)^2} \epsilon' + O(\epsilon'^2). \quad (29.37)$$

Man kann auch zeigen, dass sich das System mit $n = -2$ formal weitgehend wechselwirkungsfrei verhält, woraus $\eta = 0$, $\gamma = 1$ unabhängig von der Dimension folgt. Jedoch ist keine Entwicklung in $n+2$ bekannt. Man kann ein n, d -Diagramm mit Höhenlinien für Exponenten zeichnen. Für α und γ finden sie sich in F.W., Lecture Notes in Physics 54 (1976) 1-29 (Springer).

Viele Daten sind in J. Zinn-Justin, Quantum Field Theory and Critical Phenomena, Oxford Science Publications zu finden.

30 Pfadintegrale für klassische Felder

30.a Pfadintegrale

Wir wollen uns nun mit Pfadintegral-Darstellungen befassen und zwar sowohl für klassische Systeme als auch für quantenmechanische. Wir beginnen mit einem klassischen System, das von einem reellen Feld $\phi(\mathbf{r})$ abhängt. Wir betrachten also die Zustandssumme

$$Z = \int D\phi \exp(-S(\phi)). \quad (30.1)$$

Dabei bedeutet $D\phi$, dass wir über ϕ an allen Orten integrieren. Wie das im Einzelnen zu verstehen ist, stellen wir im Weiteren dar. Es sei nur bemerkt, dass der Grenzübergang zum kontinuierlichen \mathbf{r} nicht ohne Probleme ist. Da wir an Erwartungswerten und Korrelationen interessiert sind, fügen wir einen Quellterm hinzu

$$Z(J) = \int D\phi \exp(-S(\phi) + J \cdot \phi) \text{ mit } J \cdot \phi = \int d^d r J(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}). \quad (30.2)$$

Durch Differentiation nach J erhalten wir

$$\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})} Z(J)|_{J=0} = Z(0)\langle\phi(\mathbf{r})\rangle \quad (30.3)$$

und entsprechend für höhere Ableitungen

$$\frac{\delta^n}{\delta J(\mathbf{r}_1)\delta J(\mathbf{r}_2)\dots\delta J(\mathbf{r}_n)} Z(J)|_{J=0} = Z(0)\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\dots\phi(\mathbf{r}_n)\rangle. \quad (30.4)$$

Wir wollen zu einer störungstheoretischen Beschreibung übergehen. Dazu betrachten wir zunächst das Gauss-Integral

$$Z_0(J) = \int D\phi \exp(-\frac{1}{2}\phi K\phi + J \cdot \phi) \text{ mit } \phi K\phi = \int d^d \mathbf{r} \int d^d \mathbf{r}' \phi(\mathbf{r})K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}'). \quad (30.5)$$

Dabei nehmen wir an, dass der Kern K symmetrisch und positiv ist. Wir führen nun das Inverse G_0 zu K ein,

$$\int d^d \mathbf{r}'' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'')K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (30.6)$$

Dann kann man das Integral (30.5) auswerten, indem man quadratisch ergänzt zu

$$Z_0(J) = \int D\phi \exp(-\frac{1}{2}(\phi - G_0 J)K(\phi - G_0 J) + \frac{1}{2}JG_0 J) = Z_0(0) \exp(\frac{1}{2}JG_0 J). \quad (30.7)$$

Unter Verwendung dieser Gleichung überzeuge man sich, dass für die Gauss-Verteilung

$$\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\rangle_0 = G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (30.8)$$

$$\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3)\phi(\mathbf{r}_4)\rangle_0 = G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)G_0(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) + G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3)G_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) + G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4)G_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \quad (30.9)$$

gilt. Hat man ein Produkt von $2n$ Faktoren ϕ , so hat man die Orte \mathbf{r}_i auf alle Arten zu Paaren zusammenzufügen und das Produkt der jeweiligen G_0 aufzusummieren. Es gibt dann insgesamt $(2n - 1)!! = (2n - 1) \cdot (2n - 3) \dots 3 \cdot 1$ Beiträge.

Wir haben das Feld durch die lokalen Amplituden $\phi(\mathbf{r})$ dargestellt. Man kann auch von einer anderen Basis ausgehen. Da K und die Wechselwirkung V , die wir unten einführen, in der Regel translationsinvariant sind, ist es häufig zweckmäßig, die Fouriertransformierte

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_P} \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (30.10)$$

$$\phi_{\mathbf{k}} = \int d^d r \phi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (30.11)$$

einzuführen. Dann transformiert sich

$$\phi K \phi = \int d^d \mathbf{r} \int d^d \mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') = \frac{1}{V_P} \sum K_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k K_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} \quad (30.12)$$

mit

$$K_{\mathbf{k}} = \int d^d r K(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (30.13)$$

Speziell für

$$\phi K \phi = \int d^d r (m^2 \phi^2(\mathbf{r}) + (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2) \quad (30.14)$$

folgt

$$K_{\mathbf{k}} = m^2 + k^2, \quad G_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{m^2 + k^2}, \quad G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{m^2 + k^2}. \quad (30.15)$$

Wir kommen nun zur Störungstheorie. Es sei

$$S(\phi) = \frac{1}{2} \phi K \phi + V(\phi). \quad (30.16)$$

Beachten wir, dass

$$\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})} e^{J \cdot \phi} = \phi(\mathbf{r}) e^{J \cdot \phi}, \quad (30.17)$$

dann können wir das Funktional-Integral

$$Z(J) = \int D\phi \exp(-S(\phi) + J \cdot \phi) \quad (30.18)$$

ausdrücken als

$$Z(J) = \exp\left(-V\left(\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})}\right)\right) \cdot \exp\left(\frac{1}{2} J G_0 J\right) \quad (30.19)$$

und damit für die Zustandssumme

$$Z(0) = \exp\left(-V\left(\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})}\right)\right) \cdot \exp\left(\frac{1}{2} J G_0 J\right) \Big|_{J=0}. \quad (30.20)$$

Für die Korrelationen können wir nach wie vor die Gleichung (30.4) verwenden und erhalten

$$Z(0) \langle \phi(\mathbf{r}_1) \phi(\mathbf{r}_2) \dots \phi(\mathbf{r}_n) \rangle = \frac{\delta^n}{\delta J(\mathbf{r}_1) \delta J(\mathbf{r}_2) \dots \delta J(\mathbf{r}_n)} \exp\left(-V\left(\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})}\right)\right) \cdot \exp\left(\frac{1}{2} J G_0 J\right) \Big|_{J=0}. \quad (30.21)$$

Die Ausdrücke (30.20) und (30.21) erlauben uns eine störungstheoretische Entwicklung nach Potenzen des Potentials V durchzuführen.

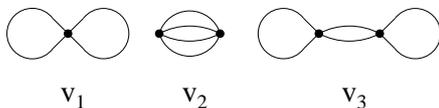
30.b Störungstheorie und Diagramme

Man zeichne alle möglichen Diagramme, indem man zunächst Vertices für die Kopplungen $V_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k)$ in

$$V(\phi) = \sum_k \frac{1}{k!} \int d^d r_1 d^d r_2 \dots d^d r_k V_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k) \phi(\mathbf{r}_1) \phi(\mathbf{r}_2) \dots \phi(\mathbf{r}_k) \quad (30.22)$$

in vorgegebener Anzahl zeichnet. Dabei erhalten diese je k äußere Beine, die mit Orten \mathbf{r} versehen werden. Weiter zeichnet man Orte mit Beinen für die Faktoren $\phi(\mathbf{r})$, die in der Korrelation auftreten. Dann verbindet man die verschiedenen Beine die von den ϕ s der Korrelationen und den ϕ s der Vertices herrühren, durch Linien, denen man die Propagatoren $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ mit den jeweiligen Orten zuordnet. Die Propagatoren und die Kopplungen V_k sind miteinander zu multiplizieren und über die Orte der Vertices ist aufzuintegrieren. Dies ergibt einen diagrammatischen Beitrag.

Dieser ist allerdings noch mit einem kombinatorischen Faktor zu multiplizieren. Dazu stellen wir folgende Überlegung an. Wir nummerieren die Enden der Propagatoren der Reihe nach durch. Zunächst wählen wir einen ersten Punkt willkürlich, als zweiten das andere Ende des Propagators. Dann einen dritten Punkt nach Belieben, dann den vierten als anderes Ende des von drei ausgehenden Propagators. Haben wir in unserem Diagramm n_k Faktoren V_k , so haben wir anfangs einen Faktor $\prod_k (1/n_k! k!^{n_k})$. Dabei stecken die Faktoren $1/k!$ bereits in der Definition der Wechselwirkung. Der Faktor $1/n_k!$ rührt von der Entwicklung der Exponentialfunktion $\exp(-V_k)$ her. Wir fragen nun, wieviele Möglichkeiten es gibt, dieses Diagramm herzustellen. Hängt der Punkt eins an einem V_k , so hat man die Wahl zwischen n_k solcher Vertices, dazu noch die Wahl aus k Linien, die von diesem Vertex weggehen; insgesamt also eine $n_k \cdot k$ -fache Wahl. Beim Punkt zwei besteht, falls er am gleichen Vertex liegt, die Wahl zwischen $k - 1$ äußeren Enden, falls er an einem anderen Vertex V_k liegt, hat man eine $(n_k - 1)k$ fache Wahl. Liegt er an einem Vertex $V_{k'}$ mit $k' \neq k$, so bleibt der Faktor $n_{k'} k'$. Lediglich, wenn man an einen äußeren Punkt gelangt, hat man keine Wahl andere Wahl. Insgesamt stellt man fest, dass durch diese Faktoren der Anfangsfaktor $\prod_k (1/n_k! k!^{n_k})$ kompensiert wird. Allerdings kann es sein, dass mehrere dieser Wahlmöglichkeiten das gleiche Diagramm liefern. Dann hat man zuviel gezählt. Gibt es also insgesamt s verschiedene Abbildungen des Diagramms auf sich selbst, so ist es mit dem Faktor $1/s$ zu multiplizieren. So gilt schon, wenn ein Propagator von einem Vertex auf diesen zurückkehrt, dass allein dafür ein Faktor $1/2$ anzusetzen ist, da gewissermaßen der Propagator in beide Richtungen durchlaufen werden kann. Weiterhin ist noch das Vorzeichen $(-)^{\sum_k n_k}$ zu berücksichtigen.



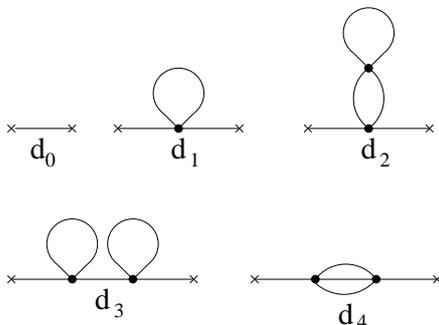
In dieser Figur bringen wir zunächst die Diagramme für die Zustandssumme bis zur zweiten Ordnung in V_4 ,

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 - \frac{1}{8}v_1 + \frac{1}{48}v_2 + \frac{1}{16}v_3 + \frac{1}{128}v_1^2 + \dots \quad (30.23)$$

Der Faktor $1/8$ bei v_1 kommt zum Beispiel dadurch zustande, dass man in jedem der beiden Propagatoren die beiden Enden austauschen kann, ohne dass sich dadurch das Diagramm verändert. Schließlich kann man auch die beiden Propagatoren miteinander vertauschen und das Diagramm geht in sich über. Daher drei Faktoren $1/2$. Eine andere Betrachtung ist die, dass man zur Berechnung dieses Diagramms den Erwartungswert eines Produktes von vier Faktoren ϕ an dem Vertex $V_1/24$ zu berechnen hat. Das Ergebnis ist die Summe der drei Beiträge in (30.9). Daher erhält man den Faktor $3/4! = 1/8$. Wir bilden nun den Logarithmus von Z ,

$$-\frac{F}{k_B T} = \ln Z = \ln Z_0 - \frac{1}{8}v_1 + \frac{1}{48}v_2 + \frac{1}{16}v_3 + \dots \quad (30.24)$$

Hat ein zusammenhängendes Diagramm v_i einen Symmetriefaktor $1/s_i$, so gilt für ein Produkt $\prod_i v_i^{n_i}$ der Symmetriefaktor $\prod_i (1/n_i! s_i^{n_i})$, da man die n_i Diagramme in $n_i!$ Permutationen herstellen kann. Daher gilt für die freie Energie, dass man sie als Summe aller in sich geschlossenen zusammenhängenden Diagramme erhält.



Bei der Berechnung der Korrelationen erhält man nach (30.21) zunächst $Z(0)$ multipliziert mit der Korrelation. Man bemerkt, dass sowohl Diagramme auftreten, bei denen alle Teile über Propagatoren

mit äußeren Enden zusammenhängen, wie auch solche, die Vakuum-Beiträge enthalten. Bezeichnen wir die Diagramme ohne Vakuum-Diagramme mit d_i , so sieht man, dass sich $Z(0)\langle\prod_i\phi(\mathbf{r}_i)\rangle = Z_0\sum_i(\pm d_i/s_i)\times$ Vakuum-Diagramme schreiben lässt, so dass man

$$\langle\prod_i\phi(\mathbf{r}_i)\rangle = \sum_i(\pm d_i/s_i) \tag{30.25}$$

hat. Die Korrelationen ergeben sich als Summe der zusammenhängenden Diagramme. Im konkreten Fall der Zweipunkt-Korrelation folgt

$$\langle\phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}')\rangle = d_0 - \frac{d_1}{2} + \frac{d_2}{4} + \frac{d_3}{4} + \frac{d_4}{6} + \dots \tag{30.26}$$

Beachte, dass man die beiden Enden \mathbf{r} und \mathbf{r}' nicht miteinander vertauschen kann. Für $d_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ hat man $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

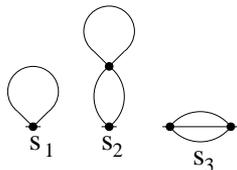
30.c Dyson-Gleichung

Betrachten wir die Diagramme d_i zur Zweipunkt-Funktion, so sehen wir, dass sich in d_3 die Schleife aus d_1 wiederholt. Allgemein haben die Beiträge zur Zweipunkt-Funktion eine Anzahl von Propagatoren, bei deren durchschneiden das Diagramm in zwei Teile zerfällt. Zwischen diesen Propagatoren sind jeweils Beiträge, die man als Selbstenergie Σ bezeichnet, so dass man schreiben kann

$$G = G_0 + G_0\Sigma G_0 + G_0\Sigma G_0\Sigma G_0 + \dots = G_0 + G_0\Sigma G \text{ oder } G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma. \tag{30.27}$$

Diese letztere Beziehung ist die Dyson-Gleichung. Die Beiträge erster und zweiter Ordnung finden sich in der nächsten Figur.

$$\Sigma = -\frac{s_1}{2} + \frac{s_2}{4} + \frac{s_3}{6} + \dots \tag{30.28}$$

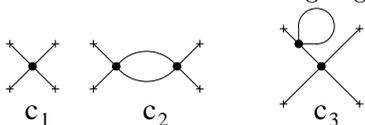


30.d Vierer-Korrelation

Wir betrachten noch die Vierer-Korrelation $\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3)\phi(\mathbf{r}_4)\rangle$. Wir beobachten dass wir alle Beiträge aus GG erhalten und zusätzlich noch Beiträge C , bei denen alle vier Orte $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_4$ miteinander verbunden sind,

$$\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3)\phi(\mathbf{r}_4)\rangle = G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)G(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) + G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3)G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) + G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4)G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4). \tag{30.29}$$

Die Beiträge zu C bis zur zweiten Ordnung sind in der nächsten Figur gezeigt. Dabei treten allerdings die Beiträge c_2 in drei Varianten auf, da es drei Möglichkeiten gibt, die äußeren Orten $\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_4$ zu Paaren zusammenzufügen. Die Beiträge c_3 treten in vier Varianten auf, da der Selbstenergiebeitrag s_1 in jeder der äußeren Linie eingefügt werden kann.



Man erhält damit

$$C = -c_1 + \frac{c_2 + 2 \text{ Permutationen}}{2} + \frac{c_3 + 3 \text{ Permutationen}}{2} + \dots \tag{30.30}$$

Man kann aus C die vier äußeren Beine herausziehen und erhält

$$C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \int d^d r'_1 d^d r'_2 d^d r'_3 d^d r'_4 G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) G(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_3) G(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}'_4) \Gamma(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_3, \mathbf{r}'_4). \quad (30.31)$$

Γ enthält dann bis in zweiter Ordnung in V_4 nur die Beiträge aus c_1 und c_2 , nicht aber aus c_3 , aus denen man die äußeren Propagatoren entfernt hat.

30.e Komplexe Felder

Man hat bei manchen Problemen auch mit komplexen Feldern ϕ zu tun. Häufig startet man von

$$Z_0(J) = \int D\phi \exp(-\phi^\dagger K \phi + J^\dagger \phi + \phi^\dagger J), \quad (30.32)$$

$$\phi^\dagger K \phi = \int d^d \mathbf{r} \int d^d \mathbf{r}' \phi^*(\mathbf{r}) K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}'), \quad (30.33)$$

$$J^\dagger \phi = \int d^d r J^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \quad (30.34)$$

mit $K^\dagger = K$ und erhält

$$Z_0(J) = Z_0(0) \exp(J^\dagger G_0 J). \quad (30.35)$$

Man beachte, dass man jetzt die Kopplungen V in der Form

$$V = \sum_{k,l} \frac{1}{k!l!} \int d^d r_1 \dots d^d r_k d^d r'_1 \dots d^d r'_l V_{k,l}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_l) \phi^*(\mathbf{r}_1) \dots \phi^*(\mathbf{r}_k) \phi(\mathbf{r}'_1) \dots \phi(\mathbf{r}'_l) \quad (30.36)$$

schreibt. Es gibt jetzt die Permutations-Symmetrie nur noch bezüglich der k Faktoren ϕ^* untereinander und der l Faktoren ϕ untereinander. Dementsprechend kann man jetzt die beiden Enden eines Propagators nicht mehr miteinander vertauschen. Um das klar darzustellen, ist es zweckmäßig, die Propagatoren mit einem Pfeil vom Ort mit $\phi(\mathbf{r})$ nach dem mit dem Faktor ϕ^* zu versehen. Damit ergeben sich andere Symmetriefaktoren und man erhält für die Korrelationen jetzt

$$\langle \phi^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle = d_0 - d_1 + d_2 + d_3 + \frac{d_4}{2} + \dots \quad (30.37)$$

und für den Logarithmus der Zustandssumme

$$\ln Z = \ln Z_0 - \frac{v_1}{2} + \frac{v_2}{8} + \frac{v_3}{2} + \dots \quad (30.38)$$

Treten in V nur Beiträge mit $k = l$ auf, so ist S gegen Transformationen $\phi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\alpha} \phi(\mathbf{r})$ mit beliebigem Winkel α invariant. Solange diese Symmetrie nicht gebrochen ist, können nur Korrelationen $\langle \phi^{*k} \phi^l \rangle$ von Null verschieden sein, wenn $k = l$. Welcher Beitrag in (30.29) verschwindet dann? Wie ändern sich die Symmetriefaktoren für die drei Beiträge c_2 ?

31 Pfadintegrale für Bosonen

Wir wollen nun betrachten, wie man die Zustandssumme $Z = \text{tr} e^{-\beta H}$ eines bosonischen Systems mittels Pfad-Integralen darstellen kann.

31.a Kohärente Zustände und Zustandssumme

Es sei $|c\rangle$ eine Überlagerung von Zuständen unterschiedlicher Besetzungszahl eines Bosons (Erzeuger b^\dagger und Vernichter b), die die Gleichung

$$b|c\rangle = c|c\rangle \quad (31.1)$$

erfüllt, wobei c eine komplexe Zahl ist. Die Lösung findet man mit

$$b(b^\dagger)^n|0\rangle = n(b^\dagger)^{n-1}|0\rangle \quad (31.2)$$

als

$$|c\rangle = \exp(cb^\dagger)|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} c^n (b^\dagger)^n |0\rangle. \quad (31.3)$$

Man bezeichnet solche Zustände als kohärente Zustände. Man erhält für die Matrixelemente

$$\langle c'|c\rangle = \sum_{n,m} \frac{1}{n!} (c'^*)^n \frac{1}{m!} c^m \underbrace{\langle 0|b^n (b^\dagger)^m|0\rangle}_{\delta_{n,m} m!} = \exp(c'^* c). \quad (31.4)$$

Wir behaupten nun, dass sich die Identität schreiben lässt als

$$\mathbb{1} = \int d^2c |c\rangle \langle c| e^{-c^* c}, \quad (31.5)$$

wobei wir unter d^2c die Integration über c in der gesamten komplexen Ebene meinen,

$$d^2c = \frac{d\Re c d\Im c}{\pi} = \frac{dc dc^*}{2\pi i} = \frac{r dr d\phi}{\pi} \quad (31.6)$$

mit $c = r e^{i\phi}$. Denn mit den normierten n - und m -Teilchenzuständen $|n\rangle$ und $|m\rangle$ folgt

$$\begin{aligned} \langle n|\mathbb{1}|m\rangle &= \int d^2c \underbrace{\langle n|c\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{n!}} c^n} \underbrace{\langle c|m\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{m!}} (c^*)^m} e^{-c^* c} \\ &= \int \frac{r dr d\phi}{\pi} \frac{1}{\sqrt{n!m!}} r^{n+m} e^{i(n-m)\phi} e^{-r^2} = \frac{\delta_{n,m}}{n!} \int dr^2 (r^2)^n e^{-r^2} = \delta_{n,m}. \end{aligned} \quad (31.7)$$

Wir bestimmen nun das Matrix-Element

$$\begin{aligned} \langle c'| (b^\dagger)^k b^l |c\rangle &= \sum_{m,n} \frac{(c'^*)^m c^n}{m!n!} \underbrace{\langle 0|b^m (b^\dagger)^k}_{\frac{m!}{(m-k)!} \langle 0|b^{m-k} (b^\dagger)^{n-l}|0\rangle} \underbrace{b^l (b^\dagger)^n |0\rangle}_{\frac{n!}{(n-l)!}} \\ &= \sum_{m',n'} \frac{(c'^*)^{m'+k} c^{n'+l}}{m'!n'!} \underbrace{\langle 0|b^{m'} (b^\dagger)^{n'}|0\rangle}_{\delta_{m',n'} m'!} = (c'^*)^k c^l e^{c'^* c}. \end{aligned} \quad (31.8)$$

Hieraus folgt die für das Weitere wichtige Identität

$$\langle c'| A(b^\dagger, b) |c\rangle = e^{c'^* c} A(c'^*, c), \quad (31.9)$$

wobei der Operator $A(b^\dagger, b)$ normalgeordnet sein muss, dass heißt die Erzeuger b^\dagger müssen links von den Vernichtern b stehen.

Dies können wir nun zur Darstellung der Zustandssumme verwenden

$$\begin{aligned}
Z &= \text{tr} e^{-\beta H} = \lim_{n \rightarrow \infty} \text{tr} (e^{-\beta H/n})^n \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{l=1}^n \int d^2 c_l \langle c_n | e^{-\beta H/n} | c_{n-1} \rangle \langle c_{n-1} | e^{-\beta H/n} | c_{n-2} \rangle \dots \langle c_1 | e^{-\beta H/n} | c_n \rangle e^{-c_n^* c_n - \dots - c_1^* c_1} \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_l \int d^2 c_l \exp \left(\sum_l c_l^* c_{l-1} - \sum_l c_l^* c_l \right) \prod_l (1 - \beta H(c_l^*, c_{l-1})/n) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_l \int d^2 c_l \exp \sum_l (c_l^* c_{l-1} - c_l^* c_l - \beta H(c_l^*, c_{l-1})/n). \tag{31.10}
\end{aligned}$$

Dabei ist $c_0 \equiv c_n$ zu verstehen. Wir können also die Zustandssumme in der Form

$$Z = \int D^2 c \exp(-S), \quad S = \sum_l ((c_l^* c_l - c_l^* c_{l-1} + \beta H(c_l^*, c_{l-1})/n)) \tag{31.11}$$

schreiben.

Wir wollen diesen Ausdruck nun für ein ideales Gas auswerten. Es sei

$$H_0 = (\epsilon - \mu) b^\dagger b. \tag{31.12}$$

Dann folgt für die Zustandssumme

$$Z_0 = \prod_l \int d^2 c_l \exp \left(- \sum_l c_l^* c_l + \sum_l c_l^* c_{l-1} a \right) \text{ mit } a = 1 - \beta(\epsilon - \mu)/n. \tag{31.13}$$

Mit

$$\prod_l \int d^2 c_l \exp(-c^\dagger K c) = \frac{1}{\det K} \tag{31.14}$$

erhalten wir

$$Z_0 = 1 / \begin{vmatrix} 1 & -a & & & \\ & 1 & -a & & \\ & & 1 & -a & \\ & & & \ddots & \\ -a & & & & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{1 - a^n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon - \mu)}}, \tag{31.15}$$

was auch mit dem bekannten Ergebnis $Z_0 = 1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)} + e^{-2\beta(\epsilon - \mu)} + \dots$ übereinstimmt.

31.b Kontinuums-Limes

Wir betrachten noch den Kontinuums-Limes. In diesem führen wir $c(\tau)$ ein durch

$$c_l = c(\tau_l), \quad \tau_l = \frac{l}{n} \beta, \quad \Delta \tau = \frac{\beta}{n} \tag{31.16}$$

und führen in der Wirkung S in (31.10) den Kontinuums-Limes $n \rightarrow \infty$, $\Delta \tau \rightarrow 0$ durch und erhalten

$$S = \int_0^\beta d\tau (c^*(\tau) \dot{c}(\tau) + H(c^*(\tau), c(\tau))). \tag{31.17}$$

Wir transformieren bezüglich der imaginären Zeit in den Frequenz-Raum

$$c(\tau) = k \sum_j c(\omega_j) e^{-i\omega_j \tau} \tag{31.18}$$

mit

$$\beta \omega_j = 2\pi j, \quad \omega_j = 2j\pi k_B T, \tag{31.19}$$

womit dann die Randbedingung $c_n = c(\beta) = c_0 = c(0)$ erfüllt ist. Die Frequenzen ω_j bezeichnet man als Matsubara-Frequenzen. k ist eine Konstante, über die wir noch in verschiedener Weise verfügen werden. Damit erhält man dann umgekehrt

$$c(\omega_j) = \frac{1}{k\beta} \int_0^\beta d\tau c(\tau) e^{i\omega_j \tau} \quad (31.20)$$

oder solange man noch mit diskreten $c(\tau_l)$ arbeitet,

$$c(\omega_j) = \frac{1}{kn} \sum_l c(\tau_l) e^{i\omega_j \tau_l} \quad (31.21)$$

Wir stellen nun die Wirkung S durch die $c(\omega)$ dar. In der Kontinuums-Formulierung erhalten wir

$$S = k^2 \beta \sum_j (-i\omega_j + \epsilon - \mu) c^*(\omega_j) c(\omega_j), \quad (31.22)$$

in der diskreten

$$S = k^2 n \sum_j (1 - ae^{2\pi i j/n}) c^*(\omega_j) c(\omega_j). \quad (31.23)$$

Wir wählen nun $k = 1/\sqrt{n}$. Dann ist die Transformation unitär und die Normierung von Z ungeändert. Im diskreten Fall erhalten wir hieraus

$$Z_{\text{disk}} = \prod_j \frac{1}{1 - ae^{2\pi i j/n}} = \frac{1}{1 - a^n} \quad (31.24)$$

wie vorher. Wir wollen nun für die Kontinuums-Formulierung j nur von $-(n-1)/2$ bis $(n-1)/2$ laufen lassen, so dass wir die gleiche Anzahl von Feldern $c(\omega_j)$ haben wie für die diskrete. Dann erhalten wir

$$Z_{\text{kont}} = \prod_{j=-\frac{n-1}{2}}^{\frac{n-1}{2}} \frac{n}{-2\pi i j + \beta(\epsilon - \mu)} = \frac{n^n}{\prod_{j=1}^{\frac{n-1}{2}} (2\pi j)^2} \frac{1}{\beta(\epsilon - \mu) \prod_{j \neq 0} \left(1 + \left(\frac{\beta(\epsilon - \mu)}{2\pi j}\right)^2\right)}, \quad (31.25)$$

was im Limes großer n

$$Z_{\text{kont}} \sim \left(\frac{e}{\pi}\right)^n \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\beta(\epsilon - \mu)}{2}\right)} = \left(\frac{e}{\pi}\right)^n e^{-\frac{\beta(\epsilon - \mu)}{2}} Z_{\text{disk}} \quad (31.26)$$

ergibt. Der Faktor $(e/\pi)^n$ rührt daher, dass die Ersetzung von $1 - \exp(i\omega_j \beta/n)$ durch $-i\omega_j \beta/n$ für Werte j in der Größenordnung $n/2$ nicht mehr gut ist. Sobald aber $\omega_j \gg \epsilon - \mu$ ist die Abweichung durch $\epsilon - \mu$ vernachlässigbar, so dass nur ein von $\epsilon - \mu$ unabhängiger Faktor zwischen Z_{kont} und Z_{disk} auftreten sollte. Tatsächlich findet man aber einen Faktor $e^{-\frac{\beta(\epsilon - \mu)}{2}}$. Woher rührt er?

Der Grund liegt darin, dass wir $c^*(\tau_l) c(\tau_l - \Delta\tau) \hat{=} b^\dagger b$ durch $c^*(\tau_l) c(\tau_l)$ im Hamilton-Operator ersetzt haben. Nun entspricht aber $c^*(\tau_l) c(\tau_l + \Delta\tau) \hat{=} b b^\dagger = b^\dagger b + 1$. Das heißt $c^*(\tau) c(\tau')$ ist an der Stelle $\tau' = \tau$ diskontinuierlich. Da wir die Funktionen mittels der Fourier-Transformierten dargestellt haben, ergibt die Rücktransformation den Mittelwert aus $\tau' = \tau + 0$ und $\tau' = \tau - 0$, das heißt $c^*(\tau_l) c(\tau_l) \hat{=} b^\dagger b + \frac{1}{2}$. Wir müssen daher entweder in einer störungstheoretischen Entwicklung stets den Vernichter $c(\tau - 0)$ verwenden oder $b^\dagger b$ durch $c^* c - \frac{1}{2}$ ersetzen. In letzterem Fall bedeutet das, dass man eine Normalordnung mit $\langle b^\dagger b \rangle = \frac{1}{2}$ einführen muss und in diesem so normal-geordneten Hamilton-Operator $b^\dagger \hat{=} c^*$ und $b \hat{=} c$ ersetzt. Insbesondere folgt dann auch $b^{\dagger 2} b \hat{=} c^{*2} c - c^*$, $b^\dagger b^2 \hat{=} c^* c^2 - c$ und $b^{\dagger 2} b^2 \hat{=} c^{*2} c^2 - 2c^* c + \frac{1}{2}$. Siehe auch Gollisch und Wetterich cond-mat/0008273.

Für unser obiges Beispiel bedeutet das, dass wir zu S noch einen Term $-\frac{\beta(\epsilon - \mu)}{2}$ hinzuzufügen haben, was dann

$$Z = e^{\beta(\epsilon - \mu)/2} Z_{\text{kont}} = \left(\frac{e}{\pi}\right)^n Z_{\text{disk}} \quad (31.27)$$

ergibt und wir damit abgesehen von der Gesamt-Normierung Übereinstimmung mit dem diskreten Limes erhalten.

31.c Korrelationen

Wir fügen nun zur Wirkung S wieder Quellterme hinzu

$$Z(J^*, J) = \int D^2 c \exp(-S + J^\dagger c + c^\dagger J), \quad J^\dagger c = \int_0^\beta d\tau J^*(\tau) c(\tau) \quad (31.28)$$

und finden (J und J^* können unabhängig angenommen werden)

$$\frac{\delta Z}{\delta J^*(\tau)} = \int D^2 c c(\tau) \exp(-S + J^\dagger c + c^\dagger J), \quad (31.29)$$

$$\frac{\delta Z}{\delta J(\tau)} = \int D^2 c c^*(\tau) \exp(-S + J^\dagger c + c^\dagger J). \quad (31.30)$$

und insbesondere

$$\left. \frac{\delta^2 Z}{\delta J(\tau') \delta J^*(\tau)} \right|_{J=J^*=0} = \int D^2 c c^*(\tau') c(\tau) \exp(-S) = Z(0) \langle c^*(\tau') c(\tau) \rangle. \quad (31.31)$$

Gehen wir auf die diskrete Formulierung (31.10) zurück, so sehen wir, dass

$$\int D^2 c c^*(\tau') c(\tau) \exp(-S) = \begin{cases} \text{tr}(e^{-(\beta-\tau')H} b^\dagger e^{(\tau-\tau')H} b e^{-\tau H}) & \tau' > \tau \\ \text{tr}(e^{-(\beta-\tau)H} b e^{(\tau'-\tau)H} b^\dagger e^{-\tau' H}) & \tau > \tau' \end{cases} \quad (31.32)$$

Man führt daher Operatoren

$$\tilde{b}(\tau) = e^{\tau H} b^\dagger e^{-\tau H}, \quad b(\tau) = e^{\tau H} b e^{-\tau H} \quad (31.33)$$

ein und hat damit

$$\left. \frac{\delta^2 Z}{\delta J(\tau') \delta J(\tau^*)} \right|_{J=J^*=0} = -Z(0) G(\tau, \tau') \quad (31.34)$$

mit (das Minuszeichen vor G ist Konvention)

$$-G(\tau, \tau') = \langle T_\tau (\tilde{b}(\tau') b(\tau)) \rangle = \begin{cases} \langle \tilde{b}(\tau') b(\tau) \rangle & \tau < \tau' \\ \langle b(\tau) \tilde{b}(\tau') \rangle & \tau > \tau'. \end{cases} \quad (31.35)$$

Man nennt T_τ den Zeit-Ordnungs-Operator. Er bringt den Operator mit der größeren Zeit stets links vor den Operator mit der kleineren Zeit. Unter Verwendung der zyklischen Invarianz unter der Spur findet man

$$G(\tau, \tau') = G(\tau - \tau'). \quad (31.36)$$

Man hat also Translationsinvarianz in τ und man findet

$$G(\tau < 0) = G(\tau + \beta). \quad (31.37)$$

Weiterhin findet man die Limites

$$-G(+0) = \langle b b^\dagger \rangle = 1 + n, \quad -G(-0) = \langle b^\dagger b \rangle = n. \quad (31.38)$$

G ist also bei $\tau = 0$ unstetig, $G(+0) - G(-0) = -1$.

Wir führen nun zu G die Fourier-Transformierte ein

$$G(\tau) = k_B T \sum_j e^{-i\omega_j \tau} G(\omega_j), \quad G(\omega_j) = \int_{\tau_0}^{\beta+\tau_0} d\tau e^{i\omega_j \tau} G(\tau), \quad (31.39)$$

wobei wegen der Periodizität von $G(\tau)$ ein beliebiges τ_0 zwischen $-\beta$ und 0 gewählt werden kann.

Für ein freies Boson folgt mit

$$H_0 = (\epsilon - \mu) b^\dagger b, \quad \tilde{b}(\tau) = e^{(\epsilon - \mu)\tau} b^\dagger, \quad b(\tau) = e^{-(\epsilon - \mu)\tau} b \quad (31.40)$$

und daraus

$$-G_0(\tau) = \begin{cases} ne^{-(\epsilon-\mu)\tau} & \tau < 0, \\ (1+n)e^{-(\epsilon-\mu)\tau} & \tau > 0. \end{cases} \quad (31.41)$$

und

$$G_0(\omega_j) = -(1+n) \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_j - \epsilon + \mu}\tau = \frac{1}{i\omega_j - \epsilon + \mu}. \quad (31.42)$$

Setzen wir jetzt

$$J^\dagger c + c^\dagger J = \sum_j (J_j^* c(\omega_j) + J_j c^*(\omega_j)), \quad (31.43)$$

so finden wir mit

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau (c^*(\tau)\dot{c}(\tau) + (\epsilon - \mu)c^*(\tau)c(\tau)) = \beta \sum_j (-i\omega_j + \epsilon - \mu)c^*(\omega_j)c(\omega_j) \quad (31.44)$$

durch quadratische Ergänzung die Zustandssumme

$$Z_0(J^*, J) = Z_0(0, 0) \exp\left(\sum_j \frac{J_j^* J_j}{\beta(i\omega_j - \epsilon + \mu)}\right) = Z_0(0, 0) \exp(k_B T \sum_j J_j^* J_j G_0(\omega_j)). \quad (31.45)$$

Für allgemeines H können wir $G(\omega_j)$ umformen

$$\begin{aligned} G(\omega_j) &= k_B T \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega_j(\tau-\tau')} G(\tau, \tau') \\ &= -k_B T \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega_j(\tau-\tau')} \langle c^*(\tau')c(\tau) \rangle \\ &= -\beta \langle c^*(\omega_j)c(\omega_j) \rangle, \end{aligned} \quad (31.46)$$

wobei wir in (31.18) jetzt $k = 1$ wählen. Dies führt auf

$$Z(J^*, J) = \int D^2 c \exp(-S + J^\dagger c + c^\dagger J) \quad (31.47)$$

mit

$$S = \int_0^\beta d\tau (c^*(\tau)\dot{c}(\tau) + H(c^*(\tau), c(\tau))) = \beta \sum_j -i\omega_j c^*(\omega_j)c(\omega_j) + \int_0^\beta d\tau H(c^*(\tau), c(\tau)). \quad (31.48)$$

Mit

$$H = \sum_{k,l} \frac{V^{(k,l)}}{k!l!} c^{*k} c^l \quad (31.49)$$

folgt

$$\int_0^\beta d\tau H(c^*(\tau), c(\tau)) = \beta \sum_{k,l} \frac{V^{(k,l)}}{k!l!} \sum c^*(\omega_{j'_1}) \dots c^*(\omega_{j'_k}) c(\omega_{j_1}) \dots c(\omega_{j_l}) \delta_{\sum j'_i, \sum j_i}. \quad (31.50)$$

Dies ist jetzt wieder Ausgangspunkt einer Diagramm-Entwicklung. Dabei hat man jetzt Propagatoren $\langle c^* c \rangle_0 = -k_B T G_0$ und Vertices $-\beta V$. An jedem Vertex hat man auf Grund der zeitlichen Translations-Invarianz eine δ -Funktion in den Matsubara-Frequenzen.

Wir haben bisher nur einen Bosonen-Freiheitsgrad betrachtet. Alle Überlegungen lassen sich analog für viele Bosonen-Freiheitsgrade durchführen. Man muss dann nur die Freiheitsgrade (b^\dagger , b , c^* , c) von den entsprechenden Orten oder Impulsen abhängen lassen.

Wir sehen hier auch, warum in der Regel bei kritischen Phänomenen die Quantennatur des Systems nicht berücksichtigt werden muss. Für $\omega_j \neq 0$ hat man im Nenner des Propagators ein zusätzliches

$i\omega_j$, das verhindert, dass der Propagator divergiert. Daher tragen diese Matsubara-Frequenzen nicht wesentlich zum kritischen Verhalten bei. Man kann sich diese Freiheitsgrade vielmehr ausintegriert denken. Dann bleibt nur noch eine Theorie mit der alleinigen Matsubara-Frequenz 0 übrig. Dies ist aber eine klassische Theorie. Geht allerdings die Temperatur gegen 0, dann gibt es auch kleine Matsubara-Frequenzen. Die zugehörigen Freiheitsgrade können dann wichtig werden. Man spricht dann von quantenkritischem Verhalten.

32 Pfadintegrale: Ausblick

32.a Fermionen

Wir haben bisher nur die Feldtheorie für Bosonen aufgestellt. Dabei waren wir erst von dem klassischen Feld für Bosonen, einem komplexen Feld ausgegangen, und haben für solch ein Feld die Pfadintegrale entwickelt. Daran anschließend wurde die Pfadintegral-Formulierung für Bosonen entwickelt. Es ergibt sich, dass die Vertauschungs-Regeln zwischen Erzeugern und Vernichtern dazu führen, dass man eine zusätzliche Zeitvariable (letztendlich neben Orts- oder Impuls-Koordinaten) einführen muss. Wir haben die Theorie für endliche Temperaturen entwickelt, in der die Zeit imaginär war und von 0 bis $i\beta$ lief. Es gibt auch eine Theorie für den Grundzustand. Dort rechnet man mit reellen Zeiten. Schließlich kann man für endliche Temperaturen auch neben den imaginären noch reelle Zeiten einführen. Dann multipliziert sich die Anzahl der Felder mit zwei.

Ähnlich kann man für Fermionen vorgehen. Man braucht dort zunächst das äquivalente klassische Feld. Da die Erzeuger antikommutieren, müssen auch die klassischen Felder antikommutieren. Dies leisten Grassmann-Variablen. Sie können das zum Beispiel unter <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~wegner/grassmann.ps> nachlesen. Formal findet man viel Ähnlichkeit mit der Herleitung für Bosonen.

Auf einen Punkt möchte ich hier noch eingehen. Man definiert die Korrelations-Funktion ähnlich wie für die Bosonen,

$$-G(\tau, \tau') = \langle T_\tau (\tilde{f}(\tau') f(\tau)) \rangle = \begin{cases} \langle \tilde{f}(\tau') f(\tau) \rangle & \tau < \tau' \\ -\langle f(\tau) \tilde{f}(\tau') \rangle & \tau > \tau'. \end{cases} \quad (32.1)$$

mit der Zeitentwicklung

$$\tilde{f}(\tau) = e^{\tau H} f^\dagger e^{-\tau H}, \quad f(\tau) = e^{\tau H} f e^{-\tau H} \quad (32.2)$$

für die fermionischen Erzeuger und Vernichter f^\dagger und f . Dabei vertauscht der Zeitordnungs-Operator nicht nur die beiden Operatoren \tilde{f} und f , sondern ändert auch noch das Vorzeichen beim Vertauschen. Es gilt wieder $G(\tau, \tau') = G(\tau - \tau')$. Man erhält $G(+0) = -1 + n$, $G(-0) = n$, woraus wieder der Sprung $G(+0) - G(-0) = -1$ folgt. Die zyklische Invarianz liefert jedoch

$$G(\tau) = -G(\tau + \beta), \quad -\beta < \tau < 0. \quad (32.3)$$

Die Folge ist, dass bei der Entwicklung

$$G(\tau) = k_B T \sum_j e^{-i\omega_j \tau} G(\omega_j) \quad (32.4)$$

jetzt nicht mehr $e^{-i\omega_j \beta} = 1$ gilt, was bei den Bosonen auf die Matsubara-Frequenzen $\omega_j = 2j\pi k_B T$ führte, sondern $e^{-i\omega_j \beta} = -1$, was die fermionischen Matsubara-Frequenzen $\omega_j = (2j + 1)\pi k_B T$ ergibt. Insbesondere ist $\omega = 0$ keine Matsubara-Frequenz für Fermionen.

32.b Summation von Diagrammen

Ein gängiges Verfahren bei der Auswertung von Korrelationen ist es, bestimmte Klassen von Diagrammen aufzusummieren. Wir hatten im Abschnitt 30.c die Dyson-Gleichung und die Selbstenergie betrachtet. Ein Näherungs-Verfahren besteht darin, bestimmte Beiträge der Selbstenergie mitzunehmen, im einfachsten Fall etwa das Diagramm s_1 . Etwas besser rechnet man, wenn man in s_1 den Propagator G_0 durch G selbst-konsistent ersetzt. Dann hat man zum Beispiel auch s_2 und viele andere Beiträge berücksichtigt. Man kann sich davon überzeugen, dass dies bei den Fermionen der Hartree-Fock-Näherung entspricht.

Ähnlich wie wir bei der Dyson-Gleichung die Beiträge betrachtet haben, die die Einteilchen-irreduziblen Einschübe Σ sind, kann man bei dem Korrelations-Anteil C zunächst die äußeren Propagatoren G herausziehen, schematisch $C = GGFGG$ (30.31) und dann betrachten, welche Zweiteilchen-irreduziblen Anteile K verbleiben, die durch Durchschneiden von zwei Propagatoren nicht zerfallen. Dies führt auf die Bethe-Salpeter-Gleichung, schematisch

$$\Gamma = K + KGG\Gamma. \quad (32.5)$$

Dies kann auf zwei Arten und Weisen geschehen. Entweder die beiden Propagatoren laufen in die gleiche Richtung, dann betrachtet man Zwei-Teilchen-Anregungen, oder sie laufen in Gegenrichtung, dann betrachtet man Teilchen-Loch-Paare. Approximiert man $K = V$, so erhält man für Teilchen-Loch-Paare die RPA-Näherung. Im allgemeinen sind die K für diese beiden Bethe-Salpeter-Gleichungen verschieden.

$$\Gamma = K + K \cdot G \cdot \Gamma$$

$$\Gamma = K + K \cdot G \cdot \Gamma$$

Man kann also bekannte Näherungen durch Klassen von Diagrammen darstellen. Es wird auch offensichtlich, wie man diese Näherungen verbessern kann, indem man zum Beispiel zu Σ oder K weitere Beiträge hinzunimmt.

Mehr kann man in Büchern wie Fetter/Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, Abrikosov, Gorkov, Dzyaloshinski, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics, Nozieres, The Theory of Interacting Fermi Systems (nur T=0), Zinn-Justin, Quantum Field Theory and Critical Phenomena finden.

Index

- Adiabatische Näherung, 3
- Antiferromagnet, 56
- Antikommutatoren, 61

- Bänder
 - Symmetrien, 44
- Band-Elektronen, 38
- bcc, 5
- Besetzungszahl
 - Phononen, 22
- Bewegungsgleichung
 - elastische Schwingungen, 14
- Bloch-Theorem, 38
- Born-Oppenheimer-Huang-Näherung, 3
- Bose-Statistik, 22

- Debye-Frequenz, 23
- Debye-Temperatur, 24
- Debye-Waller-Faktor, 25
 - kubischer Kristall, 28
- Deckoperationen, 5
- Drehachsen
 - Zähligkeit, 6
- Drehung, 6
- Dulong-Petit-Gesetz, 22

- Ein-Teilchen-Operatoren, 61
- Einheitszelle, 5
- Einstein-Frequenz, 24
- Einstein-Temperatur, 24
- Elastizitäts-Moduln, 14
- Elektromagnetisches Feld
 - Quantisierung, 31
- Elektron
 - in gekreuztem elektrischen und Magnetfeld, 47
- Elektronen
 - freies Gas, 34
 - unabhängige, 34
- Elementarzelle, 5
- Ensemble
 - großkanonisches, 35
- Ensemblekanonisches, 34
- Erzeugungs-Operatoren
 - Bosonen, 64
 - Fermionen, 59
 - Phononen, 21

- fcc, 5
- Fermi-Energie, 34
- Fermi-Geschwindigkeit, 34
- Fermi-Impuls, 34

- Fermi-Statistik, 34
- Fermikugel, 34
- Ferromagnet, 53

- Gitter
 - kubische, 5
 - periodisches, 5
 - reziprokes, 7
- Gleitspiegelung, 6
- Grundzustandsenergie, antiferromagnetische, 58
- Gruppengeschwindigkeit, 43

- Halleitfähigkeit, 48
- Hallstromdichte, 48
- Hamilton-Operator
 - Phononen, 21
- Heisenberg-Modell, 53
- Holstein-Primakoff-Transformation, 54

- Impuls-Erwartungswert von Elektronen, 43
- Inversion, 6
- Inversion und Zeitumkehrinvarianz, 45

- Kontinuumstheorie
 - elastische, 13
 - Lagrange-Formulierung, 17
- Korrelationsfunktion, 8
- Kraftdichte, 15

- Lagrange-Dichte
 - Polaritonen, 29
- Landau-Niveau, 48

- Mössbauer-Effekt, 28
- Magnetisierung, 55
 - antiferromagnetische, 58
- Magnonen, 53
- Masse
 - effektive, 43
- Matrix, dynamische, 11

- Neutronen-Streuung, 25
- Normalkoordinaten, 20

- Phononen, 10, 20
 - akustische, 16
 - Bewegungsgleichungen, 11
 - kubischer Kristall, 16
- Phononenstatistik, 22
- Polariton
 - longitudinales, 30
- Polaritonen, 29
 - transversale, 31

Potential
 chemisches, 35
 periodisches, 38
 Punktgruppe, 6
 Quanten-Halleffekt
 ganzzahlig, 48
 gebrochenzahlig, 50
 Quantenhall-Effekt, 47
 Randbedingungen, periodische, 12
 Raumgruppe, 6
 Riemannsches ζ -Funktion, 56
 Rotations-Invarianz, 10
 sc, 5
 Schallgeschwindigkeit, 16
 Schraubung, 6
 Sommerfeld-Verfahren, 36
 Spannungen
 äußere, 18
 Spannungstensor, 15
 Spezifische Wärme
 Antiferromagnet, 58
 Elektronen, 37
 Magnonen, 55
 Phononen, 22
 Spiegelung, 6
 Spin-Bahn-Kopplung, 45
 Spinwellen, 53
 antiferromagnetische, 56
 Starke-Bindungs-Näherung, 40
 Streuamplitude, 7
 Streuquerschnitt, 7
 Streuung
 elastische, 7, 27
 inkohärente, 28
 Streuvektor, 7
 Streuwelle, 25
 Teilchenzahl-Darstellung, 65
 Teilchenzahl-Operator
 Phononen, 21
 Tight-binding Näherung, 40
 Translationen, 5
 Translations-Invarianz, 10
 Translations-Operator, 38
 Vernichtungs-Operatoren
 Bosonen, 64
 Fermionen, 59
 Phononen, 21
 Verzerrungstensor, 14, 15
 Wannier-Funktionen, 42
 Wigner-Seitz-Zelle, 5
 Wirkungsquerschnitt
 differentieller, 25
 kohärenter, 27
 Zeitumkehr-Invarianz, 45
 Zustandsdichte
 elektronische, 35
 Phononen, 23
 Zwei-Teilchen-Operatoren, 62
 Zyklotron-Bewegung, 51

Inhalt

Übersicht Skripten Hunklinger/Enss - Wegner	2
1 Born-Oppenheimer-Huang-Näherung	3
2 Periodische Gitter: Deckoperationen	5
2.a Translationen	5
2.b Allgemeine Deckoperationen	5
2.c Gruppeneigenschaften, Raumgruppe und Punktgruppe	6
3 Reziprokes Gitter und Streuung	7
3.a Etwas elastische Streuung	7
3.b Gitter und reziprokes Gitter	8
3.c Streuung am Gitter	9
4 Phononen in harmonischer Näherung	10
4.a Bewegungsgleichungen	10
4.b Symmetrien	10
4.c Lösung der Bewegungsgleichungen	11
4.d Periodische Randbedingungen	12
5 Kontinuumstheorie	13
5.a Mikroskopische Kontinuumstheorie	13
5.b Verzerrungs- und Spannungstensor	15
5.b.α Verzerrungstensor	15
5.b.β Spannungstensor	15
5.c Akustische Äste	16
5.c.α Spezialfall: Kubischer Kristall	16
5.d Ergänzungen	17
5.d.α Lagrange-Formulierung	17
5.d.β Kristall unter äußerer Spannung	18
6 Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen	20
6.a Diagonalisierung und Normalkoordinaten	20
6.b Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren	21
7 Phononenstatistik und spezifische Wärme	22
7.a Bose-Statistik	22
7.b Energie und spezifische Wärme I	22
7.c Zustandsdichte	23
7.d Debye-Frequenz und Phononen-Energie II	23
8 Neutronen-Streuung und Debye-Waller-Faktor	25
9 Polaritonen	29
9.a Lagrange-Funktion	29
9.b Hamilton-Operator und Quantisierung	31
10 Unabhängige Elektronen	34
10.a Freies Elektronen-Gas	34
10.b Fermi-Statistik	34
10.c Zustandsdichte, spez. Wärme und chemisches Potential	35

11 Elektronen im periodischen Potential	38
11.a Bloch-Theorem, Bänder	38
11.b Fast freie Elektronen	39
11.c Tight-binding Näherung	40
11.c.α Das Bandspektrum von Diamant und ein nützlicher Satz über die Eigenwerte von Matrizen	41
11.d Wannier-Funktionen	42
12 Einige Eigenschaften von Bändern	43
12.a Impuls und effektive Massen	43
12.b Symmetrien	44
12.b.α Folgerungen aus der Punktgruppe	44
12.b.β Spezielle Symmetrie-Richtungen	44
12.c Spin-Bahn-Kopplung und Zeitumkehr-Invarianz	45
12.d Inversion und Zeitumkehrinvarianz	45
13 Quanten-Halleffekt	47
13.a Freie Elektronen im Magnetfeld und im elektrischen Feld	47
13.a.α Wiederholung aus der Mechanik und Bewegungsgleichungen	47
13.a.β Quantenmechanische Behandlung	47
13.b Ganzzahliger Halleffekt	48
13.c Gebrochenzahliger quantisierter Halleffekt	50
13.d Zyklotron-Bewegung	51
14 Magnonen	53
14.a Ferromagnet	53
14.a.α Spinwellen-Näherung	53
14.a.β Behandlung mit der Holstein-Primakoff-Transformation	54
14.a.γ Spezifische Wärme und Magnetisierung	55
14.b Antiferromagnet	56
14.b.α Spinwellen-Näherung	56
14.b.β Holstein-Primakoff-Transformation	57
14.b.γ Spezifische Wärme und Untergittermagnetisierung	58
15 Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren	59
15.a Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Fermionen	59
15.b Einteilchen-Operatoren	61
15.c Zwei-Teilchen-Operatoren	62
15.d Lokales Potential	63
15.e Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Bosonen	64
16 Hartree-Fock-Näherung, RPA (Random-Phase-Approximation), Plasmonen	67
16.a Einteilchen-Anregungen in Hartree-Fock-Näherung	67
16.b Normal-Ordnung	68
16.c Teilchen-Loch-Anregungen in RPA	69
16.d Plasmonen-Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren	72
17 Dielektrizitätskonstante und Abschirmung	73
17.a Statische Abschirmung: Metall	74
17.b Statische Abschirmung: Halbleiter	75
17.c Dielektrizitätskonstante: Isolator	75
17.d Plasmaschwingung mit Dämpfung	75

18 Effektive Paar-Wechselwirkung	77
18.a Elektron-Phonon-Wechselwirkung	77
18.b Die Fröhlichsche Transformation	78
18.c Transformation mittels Flussgleichungen	79
19 Cooper-Paare und BCS-Lösung	82
19.a BCS-Grundzustand	82
19.b Anregungen	83
19.c Sprungtemperatur	84
19.d Ergänzungen	86
20 Elektrodynamik des Supraleiters	87
20.a Dauerströme	87
20.b Meissner-Effekt und London-Gleichung	87
20.c Störungstheorie	88
20.d Herleitung der London-Gleichung	88
21 Hubbard-Modell	91
21.a Mott-Metall-Isolator-Übergang	91
21.b Pauli-Paramagnetismus und Stoner-Kriterium	91
21.c Antiferromagnetismus	92
22 Das t-J-Modell	97
23 Hochtemperatur-Supraleiter I	101
23.a Cuprat-Schichten	101
23.b Vom Dreiband- zum Einband-Hubbard-Modell	103
23.c Eine effektive Wechselwirkung	104
24 Landau-Theorie	105
24.a Kompressibilität	106
24.b Suszeptibilität	107
24.c Galilei-Invarianz	107
24.d Instabilitäten	107
25 Hochtemperatur-Supraleiter II	108
25.a Die Fluss-Gleichungen	108
25.b Störungs-Theorie	109
25.c Freie Energie	109
25.d Symmetrien	112
25.d. α Gittersymmetrie	112
25.d. β Alternierende Ordnung	112
25.d. γ Spin-Singulett und Spin-Triplett	112
25.e Diagonalisierung	114
25.f Ergebnisse	115
26 Molekularfeld-Näherung	119
26.a Landau-Theorie für kritische Phänomene	119
26.b Korrelationen	120
26.c Gültigkeits-Bereich der Landau-Theorie	121
27 Homogenitäts- und Skalengesetze	123
27.a Potenzgesetze und kritische Exponenten	123
27.b Skaleninvarianz und Skalengesetze	123
27.b. α Kritischer Punkt	123
27.b. β Kritisches Gebiet	124

28 Renormierungsgruppe	127
28.a Grundidee	127
28.b Fixpunkt, Klassifizierung von Operatoren	127
28.c Skalen der freien Energie	129
28.d Korrelationen	129
28.e Nichtlineare Beiträge	131
28.e.α Nichtlineare Skalenfelder	131
28.e.β Regulärer Anteil der freien Energie	131
28.e.γ Logarithmische spezifische Wärme	131
28.e.δ Marginaler Operator	132
29 Renormierungs-Gruppe mit scharfem Abschneide-Impuls	133
29.a Ursprung der Renormierung	133
29.b Renormierung der Landau-Wechselwirkung	133
29.c ϵ -Entwicklung	135
29.d Ergebnisse für das isotrope n -Vektormodell	136
30 Pfadintegrale für klassische Felder	137
30.a Pfadintegrale	137
30.b Störungstheorie und Diagramme	138
30.c Dyson-Gleichung	140
30.d Vierer-Korrelation	140
30.e Komplexe Felder	141
31 Pfadintegrale für Bosonen	142
31.a Kohärente Zustände und Zustandssumme	142
31.b Kontinuums-Limes	143
31.c Korrelationen	145
32 Pfadintegrale: Ausblick	148
32.a Fermionen	148
32.b Summation von Diagrammen	148