

1.6 Metall-Isolator Übergang

1.6.1 Mott-Übergang

Falls die Atome im Festkörper weit genug auseinander sind, bricht das Blochbild zusammen. Angenommen, wir hätten ein Elektron pro Einheitszelle:

- Wenn die Atome nahe genug zusammen sind (d.h. ein genügender Überlapp da ist), dann haben wir ein Metall, falls die Blochwellen die Eigenzustände der Elektronen sind.
- Wenn die Atome weit genug auseinander sind (d.h. ein kleiner Überlapp), dann sind die Elektronen stark gebunden. Es gibt korrelierte Wellenfunktionen, und der Festkörper ist Isolator.

Nehmen wir nun an, dass wir ein Gas von wechselwirkenden Elektronen mit der Dichte ρ hätten. Dieses Gas überdeckt einen gleichförmigen positiven Hintergrund, der die elektrostatische Ladung vernichtet. Weiter sei $T = 0$. Wie im Bild 1.46 führen wir nun eine Punktladung Ze ins System.

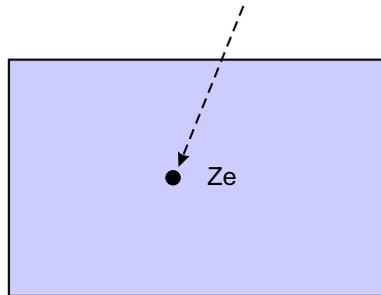


Abbildung 1.46:

Das Elektronpotenzial ändert sich um $\delta U(r)$, wobei r die Entfernung von der zusätzlichen Ladung ist.

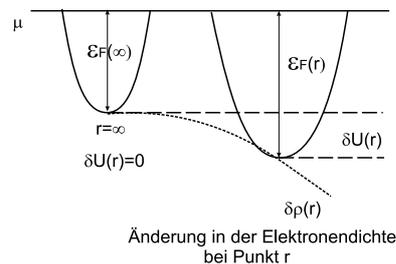


Abbildung 1.47: Änderung der Potenzialenergie und Ladungsdichte bei der Einführung zusätzlicher Ladung

$$\epsilon_F(\infty) - \epsilon_F(r) = \delta U(r)$$

$$\delta n(r) \simeq \frac{\delta n(r)}{\delta \epsilon_F(r)} = \frac{D(\epsilon_F)}{V} (-\delta U(r))$$

($N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon$, n : Dichte der Elektronen)

$\delta U(r)$ sollte eigentlich nicht nur die Änderung der Potenzialenergie eines Elektrons bzgl. einer Ladung Ze sein, sondern sollte auch noch das Feld der anderen Elektronen beinhalten, die von der Ladung angezogen wurden. $\delta U(r)$ ist deshalb ein *selbst-konsistentes* Potenzial.

Änderungen in der Elektronendichte korrespondieren mit den Änderungen der Ladungsdichte, also Änderungen im Potenzial. Mit der Poisson-Gleichung können wir es betrachten:

$$\nabla^2 \delta\varphi(r) = -\frac{1}{\epsilon_0} \delta\rho(r),$$

wobei $\delta\rho(r)$ die Änderung der Ladungsdichte am Punkt ist, der eine Entfernung r mit der zusätzlichen Ladung hat

$$\begin{aligned} \nabla^2 \delta\varphi(r) &= -\frac{1}{\epsilon_0} \delta\rho(r) \\ &= -(-e) \frac{1}{\epsilon_0} \delta n(r) \\ &= -(-e) \frac{1}{\epsilon_0} \frac{D(\epsilon_F)}{V} \underbrace{(-\delta U(r))}_{-(-e)\delta\varphi} \\ &= \frac{e^2 D(\epsilon_F)}{\epsilon_0 V} \delta\varphi \end{aligned}$$

Wir nehmen nun an, dass die Lösung wie $\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r}$ nahe der Ladung sind:

$$\delta\varphi = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-\lambda r}, \quad \lambda^2 := \frac{e^2 D(\epsilon_F)}{\epsilon_0 V}$$

$1/\lambda$ heißt *Thomas-Fermi-Abschirmlänge*. Die ist das Analogon zum Hochtemperatur-Plasma die *Debye-Hückel-Abschirmlänge* für tiefe Temperatur.

Beim genauen Hinsehen bekommen wir dann eine Oszillation für das Potenzial φ und die Ladungsdichte, die *Friedel-Oszillation*.

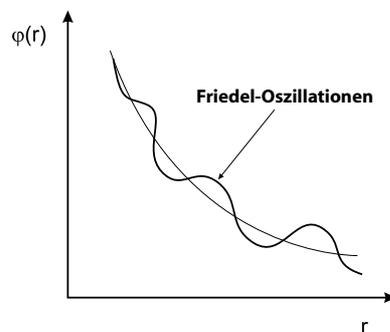


Abbildung 1.48: Friedel-Oszillation von dem Potenzial φ

$$\lambda^2 = \frac{(3\pi^2)^{1/3} me^2}{\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0} n^{1/3} = \underbrace{\frac{(3\pi^2)^{1/3}}{\pi}}_{\approx 1} \frac{4n^{1/3}}{a_H},$$

wobei $a_H = \frac{\hbar^2}{me^2} 4\pi\epsilon_0$ der Bohr'sche Radius von H ist. Andererseits ist $D(\epsilon_F)$ für ein freies Elektronengas

$$D(\epsilon_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{kT_F},$$

T_F : Fermi-Temperatur.

Angenommen, wir hätten H -Atome vorliegen, die sehr nahe beieinander seien. Dann ist das Blochbild eine gute Approximation, und das System ist ein Metall, in dem keines der Elektronen an einem H -Atom lokalisiert ist. Wir erhöhen nun den Abstand zwischen den Protonen. Das Blochbild wird irgendwann zusammenbrechen.

Wenn λ groß ist (d.h. $1/\lambda \leq a_H$), dann ist es für das Proton unmöglich, ein Elektron zu binden, und wir haben Metall. Wenn der Abstand zwischen Atomen genügend groß ist, dann ist n genügend klein, so dass $1/\lambda > a_H$ und die Elektronen können gebunden werden. Dann werden aber alle Elektronen gebunden, und wir erhalten einen Isolator.

Mott-Kriterium:

Ein Metall-Isolator-Übergang erfolgt, wenn $1/\lambda \approx a_H$:

$$\begin{aligned} \implies & \frac{1}{a_H^2} \frac{(3\pi^2)^{1/3}}{\pi} \frac{4n^{1/3}}{a_H} \\ \implies & n^{-1/3} \simeq 4a_H. \end{aligned}$$

1.6.2 Das Hubbard-Modell

Wir betrachten ein teilgefülltes s -Band mit n Elektronen pro Atom. Seien $\psi_{\vec{k}}$ und $\varepsilon_{\vec{k}}$ die Blochsche Funktion bzw. die Energie zum Wellenvektor \vec{k} , die im Rahmen einer *Hartree-Fock*-Näherung berechnet würden (kein Spin). Weiter seien $c_{\vec{k}s}^+$, $c_{\vec{k}s}$ die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren für Elektronen im Blochzustand (\vec{k}, s) , $s = \pm 1$. Dann ist:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}, s} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}s}^+ c_{\vec{k}s} \quad (1)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2} \sum_{s_1, s_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \frac{1}{r} | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle c_{\vec{k}_1 s_1}^+ c_{\vec{k}_2 s_2}^+ c_{\vec{k}'_2 s_2} c_{\vec{k}'_1 s_1} \quad (2)$$

$$- \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_s \left[2 \langle \vec{k} \vec{k}' | \frac{1}{r} | \vec{k} \vec{k}' \rangle - \langle \vec{k} \vec{k}' | \frac{1}{r} | \vec{k}' \vec{k} \rangle \right] \mu_{\vec{k}'} c_{\vec{k}s}^+ c_{\vec{k}s} \quad (3) \quad (*)$$

(Nur die Wellenvektoren in der ersten Brillouin-Zone werden berücksichtigt.)
Hierbei ist:

(1) : Bandenergie der Elektronen

(2) : Wechselwirkung

(3) : Potenzielle Energie der Elektronen bzw. der Wechselwirkung mit den s -Band-Elektronen, und $\mu_{\vec{k}}$ ist die Besetzungszahl der Zustände innerhalb der Hartree-Fock-Näherung.

Definieren wir nun

$$\phi(\vec{r}) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

wobei N Anzahl der Atome ist

$$\implies \varphi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k}\vec{a}_i} \phi(\vec{r} - \vec{a}_i).$$

\vec{a}_i : Orte der Atome (Ein Atom pro Elementarzelle). Weiter sind

$$c_{\vec{k}s} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k}\vec{a}_i} c_{is}$$

und

$$c_{\vec{k}s}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}\vec{a}_i} c_{is}^+.$$

Setze dieses in (*) ein. Zunächst der erste Term:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \sum_{\vec{k}s} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}s}^+ c_{\vec{k}s} \\ &= \frac{1}{N} \varepsilon_{\vec{k}} \sum_i \sum_j e^{-i\vec{k}\vec{a}_i} c_{is}^+ e^{i\vec{k}\vec{a}_j} c_{js} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i,j} \sum_s \underbrace{\sum_{\vec{k}} \frac{1}{N} \varepsilon_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{a}_j - \vec{a}_i)}}_{=: T_{ij}} c_{is}^+ c_{js} \\
&= \sum_{i,j} \sum_s T_{ij} c_{is}^+ c_{js}.
\end{aligned}$$

Für den zweiten Term:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N^2} \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2} \sum_{s_1, s_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \frac{1}{r} | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle \sum_{ijkl} e^{-\vec{k}_1 \vec{a}_i} c_{is_1}^+ e^{-\vec{k}_2 \vec{a}_j} c_{js_2}^+ e^{\vec{k}'_2 \vec{a}_l} c_{ls_2} e^{\vec{k}'_1 \vec{a}_k} c_{ss_1} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{s_1, s_2} \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2} e^{-\vec{k}_1 \vec{a}_i} e^{-\vec{k}_2 \vec{a}_j} e^{\vec{k}'_2 \vec{a}_l} e^{\vec{k}'_1 \vec{a}_k} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | \frac{1}{r} | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle c_{is_1}^+ c_{js_2}^+ c_{ls_2} c_{ss_1} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{s_1, s_2} \langle ij | \frac{1}{r} | kl \rangle c_{is_1}^+ c_{js_2}^+ c_{ls_2} c_{ss_1}.
\end{aligned}$$

Analog für den dritten Term

$$- \sum_{ijkl} \sum_s \left[2 \langle ij | \frac{1}{r} | kl \rangle - \langle ij | \frac{1}{r} | lk \rangle \right] \mu_{jl} c_{is}^+ c_{ks}^+$$

mit

$$\mu_{jl} := \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mu_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{a}_j - \vec{a}_i)}.$$

Approximation: Schmales Energieband und damit ϕ in etwa gleich den s -Orbitalen. Weiter müssen wegen des schmalen Energiebandes die s -Orbitale Schalen bilden, wobei der Radius klein gegenüber dem Gitterabstand ist.

$\Rightarrow \langle ii | \frac{1}{r} | ii \rangle = I \gg$ als alle anderen.

$$\Rightarrow \sum_{i,j} \sum_{\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} I \sum_i \sum_{\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} - I \sum_{i,\sigma} \nu_{ii} n_{i\sigma},$$

mit $n_{i\sigma} := c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$. Weiter gilt

$$\begin{aligned}
\nu_{ii} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} = \frac{1}{2} n \\
\Rightarrow & -\frac{1}{2} I n \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} = -\frac{1}{2} I N n^2 = \text{Const.}
\end{aligned}$$

Dieser Term kann weggelassen werden. Die weit außerhalb liegenden Terme können wegen des Screenings der Wechselwirkung durch das Elektronengas weggelassen werden.

Elektronen dürfen von Nachbarn zu Nachbarn *hüpfen*. Die Coulombsche Wechselwirkung wird also in das Hüpfen umgesetzt. Wir gehen von einer *Ein-Bandstruktur* aus. Die Hamiltonfunktion des Hubbard-Modells ist

$$\mathcal{H} = t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \left(c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^+ c_{i,\sigma} \right) + U \sum_i \underbrace{n_{i\downarrow}}_{n_i := c_i^+ c_i} n_{i\uparrow},$$

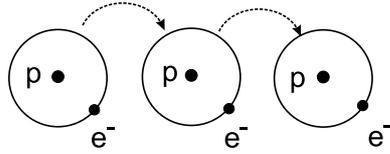


Abbildung 1.49:

wobei:

$c_{i,\sigma}^+$ erzeugt ein Fermion mit Spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ am Gitterplatz i

$c_{i,\sigma}$ vernichtet ein Fermion mit Spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ am Gitterplatz i

t : Hopping-Matrixelement ≈ 1 eV

U : Coulomb-Energie ≈ 20 eV

$\langle ij \rangle$: Nächste Nachbarn.

Es ist allgemein akzeptiert:

- In 2 und 3 Dimensionen weist der Grundzustand für ein halbgefülltes repulsives Modell ($\infty > U > 0$) anti-ferromagnetische langreichweitige Ordnung auf.
- Das Zufügen oder die Wegnahme von Elektronen (Löcher) zerstört die langreichweitige Ordnung.
- Der Grundzustand für $U = \infty$ ist ferromagnetisch und hat ein Loch in einem ansonsten halbgefüllten Band.
- Bei $U < 0$ bilden die Elektronen singlet gebundene Zustände.

High- T_c : *Drei-Band-Hubbard-Modell* (Emery-Modell)

Die Hamilton-Funktion hat einen kinetischen Term, der das Hüpfen zwischen $Cu - O$, sowie zwischen $O - O$ durch die Hopping-Integrale t_{Cu-O} , t_{O-O} beschreibt. Weiterhin ist anstatt einer Kopplungsstärke U nun die Kopplungsstärke U_{Cu} und U_0 enthalten.

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{\sigma,\sigma'} U_{ij} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \quad (\text{Emery - Modell})$$

U_{ij} beschreibt die inter-site Wechselwirkung.

Wir wollen nun Lösungsmöglichkeiten für das Problem von wechselwirkenden Fermionen betrachten. Überlicherweise, um thermodynamische Eigenschaften von Systemen mit wechselwirkenden Fermionen zu betrachten, eliminieren wir die fermionischen Freiheitsgrade aus der Zustandsfunktion und führen an ihre Stelle bosonische Felder ein. Hierzu benötigen wir die *Feynmann Pfadintegraldarstellung* und die Identität:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a\phi^2 - b\phi} d\phi = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}, \quad a > 0.$$

ϕ seien die bosonischen Felder. Für Gittersysteme können wir alternativ die *Trotter-Suzuky-Formel* verwenden. Sei $U > 0$ (repulsives Hubbard-Modell)

$$Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(H - \mu N)} \right\}$$

$$= \lim_{m \rightarrow \infty} \text{Tr} \left\{ \left(e^{-\beta(K-\mu N)/m} e^{-\beta V/m} \right)^m \right\}$$

mit $H = K + V$

$$e^{-\frac{\beta U}{m} \sum_{l=1}^N n_{l\uparrow} n_{l\downarrow}} \propto \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{l=1}^N d\phi_l e^{-m\phi_l^2/2\beta\mu - \phi_l(n_{l\uparrow} - n_{l\downarrow}) - \beta U(n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow})/2m}$$

$$\begin{aligned} Z_m &= \text{Tr} \left\{ \left(e^{-\beta(K-\mu N)/m} e^{-\beta V/m} \right)^m \right\} \\ &= \int d\phi \text{Tr} \left\{ e^{c_{i\sigma}^+ A_{ij}^{(1)} c_{j\sigma}} \dots e^{c_{i\sigma}^+ A_{ij}^{(2m)} c_{j\sigma}} \right\}, \end{aligned}$$

wobei $A_{ij}^{(k)} = A_{ij}^{(k)}(\phi, \sigma)$: Spur über alle möglichen Konfigurationen der N -Fermionen.

Nun gilt:

$$\text{Tr} \left\{ e^{c_{i\sigma}^+ A_{ij}^{(1)} c_{j\sigma}} \dots e^{c_{i\sigma}^+ A_{ij}^{(p)} c_{j\sigma}} \right\} = \det \left(1 + e^{A^{(1)}} \dots e^{A^{(p)}} \right)$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} Z_m &\sim \int \prod_{l,j} d\phi_{lj} e^{\phi_{lj}^2} \det \left(1 + e^{-\beta\tilde{K}/m - \tilde{V}(\phi_{l,1})} \dots e^{-\beta\tilde{K}/m - \tilde{V}(\phi_{l,m})} \right) \\ &\quad \det \left(1 + e^{-\beta\tilde{K}/m - \tilde{V}(-\phi_{l,1})} \dots e^{-\beta\tilde{K}/m - \tilde{V}(-\phi_{l,m})} \right) \end{aligned}$$

mit $\tilde{K} = K - (\mu - V/2)N$: kinetische Energiematrix für ein Einteilchen-Propagator auf dem Gitter und $\tilde{V}(\phi_l)$ ist Diagonalmatrix.

Die Zustandssumme der m -ten Zeitscheibe hat die Form

$$\begin{aligned} Z_m &= \int d\phi e^{-S[\phi]} \det \underbrace{\begin{matrix} M_{\uparrow} \\ \text{Fermion-Determinante} \end{matrix}}_{M_{\uparrow}} M_{\downarrow} \\ \det M_{\uparrow} &= \det \begin{bmatrix} B_1 & -1 & & & \\ & B_2 & -1 & & \\ & & B_3 & -1 & \\ & & & \ddots & \\ 1 & & & & B_m \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Falls eine Elektron-Loch-Symmetrie vorliegt, dann folgt

$$\det M_{\downarrow}(\phi) e^{-\frac{1}{m} \sum_{ij} \sqrt{2U\phi_i(t_m)}} \det M_{\uparrow}$$

$\Rightarrow \det M_{\downarrow} \det M_{\uparrow}$ positiv definiert

$$\Rightarrow \sqrt{\det(M_{\downarrow}^T M_{\downarrow})} = \int d\phi_{\uparrow} e^{-\phi_{\uparrow} \sigma_{\uparrow}^{-1} \phi_{\uparrow}}, \quad \sigma_{\uparrow} := M_{\uparrow}^T M_{\downarrow}.$$

Ebenso für M_{\downarrow}

$$\Rightarrow Z_m = \int d\phi d\psi_{\uparrow} d\psi_{\downarrow} e^{-S_{eff}[\phi, \psi_{\uparrow}, \psi_{\downarrow}]}$$

Resultate:

- $D = 2, U > 0$
 - $T = 0$, halbgefülltes Band: Ferromagnetisch
 - $T = 0$, halbgefülltes Band + Elektron: Paramagnetisch

keine Supraleitung

- $D = 2, U < 0$
 - $T_c = 0$ Grundzustand supraleitend und Ladungsdichtewellen mit langreichweitiger Ordnung
 - Für ein nicht halbgefülltes Band gilt $T_c > 0$

Fundamentales Problem: *Minuszeichen-Problem*

Sei ein Feld mit x bezeichnet, dann ist der Erwartungswert einer Observablen A

$$\langle A \rangle = \frac{\int A(x)\rho(x)dx}{\int \rho(x)dx},$$

wobei $\rho(x)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte ist.

Für Modelle wie das Ising Modell ist $\rho(x) > 0$. Für fermionische Systeme gilt dies nicht im Allgemeinen. Im Rahmen des Hubbard-Modell ist dies wahrscheinlich eine Konsequenz der Fermi-Statistik.

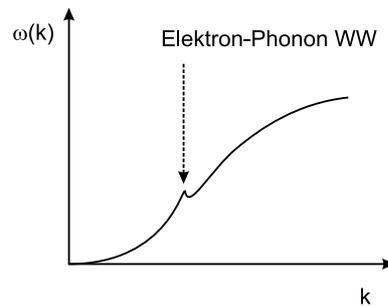


Abbildung 1.50: Dispersionskurve vom Phonon mit der Elektron-Phonon Wechselwirkung

1.6.3 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

In diesem Abschnitt behandeln wir die Elektronen und Phononen zusammen als ein Vielteilchensystem. Dafür werden verschiedene Approximationen gebraucht:

- *Adiabatische Approximation*: Phononen
- *Perfektes Gitter*: Blochsche Wellen

Wenn wir die Elektronen und die Phononen zusammen behandeln wollen, dann müssen wir ein Vielteilchen-Problem lösen, wobei wir auf verschiedene Fragen mit verschiedenen Approximationen losgehen müssen, z.B.:

- Wie beeinflussen die Elektronen die Dispersionsrelation von Phononen $\omega(\vec{k})$?
- Wie lange ist die Lebensdauer der Phononen bzw. der Blochschen Wellen, bevor sie zerfallen?

Daraus können wir auch die Wärmeleitfähigkeit bzw. die elektrische Leitfähigkeit untersuchen.

Elektron-Phonon-Streuung

Für den perfekten (ungestörten) Kristall ist die Hamilton-Funktion für die Elektronen (Blochzustand):

$$\mathcal{H}_e = \sum_{\vec{k}, s} \epsilon_{\vec{k}s} b_{\vec{k}s}^\dagger b_{\vec{k}s}$$

und

$$\mathcal{H}_p = \sum_{\vec{k}, \eta} \left(a_{\vec{k}\eta}^\dagger a_{\vec{k}\eta} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\vec{k}\eta}$$

der Phononen. Die gesamte Hamilton-Funktion ergibt sich dann:

$$\mathcal{H}_{total} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_p + \Delta V,$$

wobei ΔV die Wechselwirkung zwischen Elektron und Phonon ist.

Nehmen wir an, dass wir die Atome verschieben können, ohne die Wechselwirkungsenergie zwischen Elektron und Atom zu verändern.

Weiterhin angenommen, dass die Potenzialenergie eines Elektrons im ungestörten Kristall

$$V(\vec{r}) = \sum_{n,j} \tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j))$$

ist. n und j sind Indizes von den Zellen des Bravais-Gitters und von den Atomen in der Zelle. Wenn es beim j -ten Atom von der n -ten Zelle eine Verschiebung \vec{u}_{jn} gibt, dann ist die gestörte Potenzialenergie

$$V'(\vec{r}) = \sum_{n,j} \tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j + \vec{u}_{jn})).$$

Die Wechselwirkung zwischen dem Elektron und dem Phonon ΔV ist dann:

$$\begin{aligned} \Delta V(\vec{r}) &= V'(\vec{r}) - V(\vec{r}) \\ &= \sum_{n,j} \left[\tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j + \vec{u}_{jn})) - \tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j)) \right]. \end{aligned}$$

Nehmen wir weiter an, dass \vec{u}_{jn} sehr klein ist:

$$\Delta V(\vec{r}) \approx \sum_{n,j} -\vec{u}_{jn} \cdot \nabla_{\vec{r}} \tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j)) + O(u_{jn}^2).$$

($O(u_{jn}^2)$) ist von mehr als einem Phonon erzeugt.)

Mit der Berücksichtigung der Schwankung des Atoms erweitern wir jetzt die Potenzialenergie $V(\vec{r})$ des Elektrons mit

$$V(\vec{r}) = \sum_{n,j} \tilde{v}_j(\vec{r} - \vec{a}_n - \vec{d}_j - \vec{u}_{jn}).$$

ΔV verursacht die Streuung vom Elektron:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}s | \Delta V | \vec{k}'s' \rangle &= \int e^{-i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}s}^*(\vec{r}) \Delta V(\vec{r}) e^{i\vec{k}'\vec{r}} u_{\vec{k}'s'}(\vec{r}) d^3r \\ &\approx \int e^{-i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}s}^*(\vec{r}) \left(\sum_{n,j} -\vec{u}_{jn} \cdot \nabla_{\vec{r}} \tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j)) \right) e^{i\vec{k}'\vec{r}} u_{\vec{k}'s'}(\vec{r}) d^3r \end{aligned}$$

mit

$$\vec{u}_{jn} = \sum_{\vec{q},\eta} \vec{A}_{\vec{q}\eta}^j e^{i\vec{q}\vec{a}_n} (a_{\vec{q}\eta} + a_{-\vec{q}\eta}^\dagger)$$

und

$$\vec{A}_{\vec{q}\eta}^j = \frac{1}{\sqrt{N}} \vec{v}_j(\vec{q}, \eta) \left(\frac{\hbar}{2M^{(c)}\omega_{\vec{q}\eta}} \right)^{1/2}.$$

Die zweite Quantisierung von ΔV hat die folgende Form:

$$\Delta V = \sum_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}s s'\eta} b_{\vec{k}s}^\dagger b_{\vec{k}'s'} (\alpha_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}s s'\eta} (a_{\vec{q}\eta} + a_{-\vec{q}\eta}^\dagger))$$

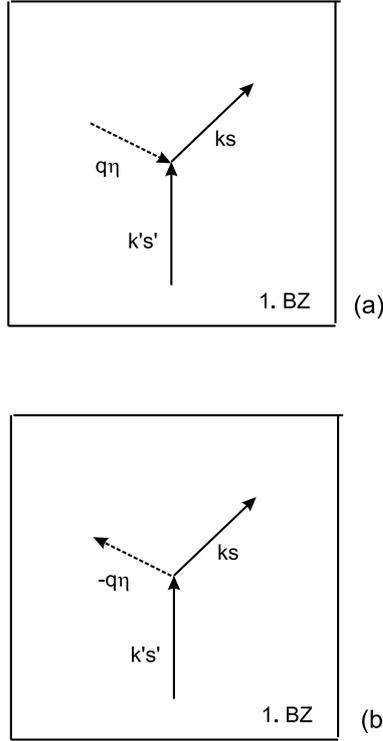


Abbildung 1.51: Normaler Prozess der Elektron-Phonon-Wechselwirkung:

(a) $b_{ks}^+ b_{k's'}^- a_{q\eta}$; (b) $b_{ks}^+ b_{k's'}^- a_{-q\eta}$

wobei

$$\begin{aligned}
 \alpha_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}ss'\eta} &= \int e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} u_{\vec{k}s}^*(\vec{r}) \sum_{nj\eta} \nabla_{\vec{r}} \tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j)) \vec{A}_{\vec{q}\eta}^j e^{i\vec{q}\vec{a}_n} u_{\vec{k}'s'} d^3r \\
 &= \int e^{i(\vec{k}'-\vec{k}+\vec{q})\vec{r}} u_{\vec{k}s}^*(\vec{r}) \underbrace{\sum_{nj\eta} \nabla_{\vec{r}} \tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j)) \vec{A}_{\vec{q}\eta}^j e^{i\vec{q}(\vec{a}_n - \vec{r})} u_{\vec{k}'s'}}_{=\sum_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{r}} \Lambda_{\vec{g}}} d^3r \\
 &= \sum_{\vec{g}} \int \Lambda_{\vec{g}} e^{i(\vec{k}'-\vec{k}+\vec{q}+\vec{g})\vec{r}} d^3r,
 \end{aligned}$$

da $u_{\vec{k}s}^*(\vec{r}) \sum_{nj\eta} \nabla_{\vec{r}} \tilde{v}_j(\vec{r} - (\vec{a}_n + \vec{d}_j)) \vec{A}_{\vec{q}\eta}^j e^{i\vec{q}(\vec{a}_n - \vec{r})} u_{\vec{k}'s'}$ die Periodizität des Gitters aufweist und als $\sum_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{r}} \Lambda_{\vec{g}}$ (Blochsche Funktion) dargestellt werden kann.

$\alpha_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}ss'\eta} = 0$, falls $\vec{k}' - \vec{k} + \vec{q}$ kein reziproker Gittervektor ist.

Falls $\vec{k}' - \vec{k} + \vec{q} = 0$, gibt es einen normalen Prozess der Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

Falls $\vec{k}' - \vec{k} + \vec{q} = \vec{g} \neq 0$, dann gibt es einen Umklapp-Prozess. Die Hamiltonfunktion des gesamten Systems kann in der zweiten Quantisierung dargestellt werden:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_p + \mathcal{H}_{e-p}$$

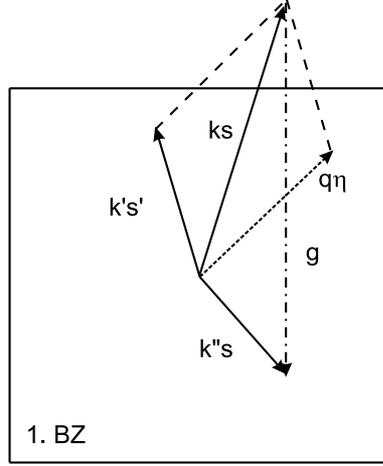


Abbildung 1.52: Umklapp-Prozess der Elektron-Phonon-Wechselwirkung

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\vec{k}, \eta} \left(a_{\vec{k}\eta}^+ a_{\vec{k}\eta} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\vec{k}\eta} + \sum_{\vec{k}, s} \epsilon_{\vec{k}s} b_{\vec{k}s}^+ b_{\vec{k}s} \\
&+ \sum_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}s s'\eta} \alpha_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}s s'\eta} b_{\vec{k}s}^+ b_{\vec{k}'s'} (a_{\vec{q}\eta} + a_{-\vec{q}\eta}^+),
\end{aligned}$$

wobei $\mathcal{H}_{e-p} = \Delta V$.

Polar-Isolator

Betrachten wir die Wechselwirkung zwischen einem Elektron im Leitungsband und genau einem longitudinalen optischen Zweig des Phonons in der Nähe von $k = 0$. Mit der Störungstheorie zweiter Ordnung erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{\vec{k}s}^{pert} &= \epsilon_{\vec{k}s}^0 + \sum_n \frac{\langle \vec{k}s | \mathcal{H}_{e-p} | n \rangle \langle n | \mathcal{H}_{e-p} | \vec{k}s \rangle}{\epsilon_{\vec{k}s}^0 - \epsilon_n} \\
&= \epsilon_{\vec{k}s}^0 \sum_{\vec{q}\eta} \frac{|\langle \vec{k} - \vec{q}, s, \vec{q}\eta | \mathcal{H}_{e-p} | \vec{k}s \rangle|^2}{\epsilon_{\vec{k}s}^0 - (\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},s}^0 + \hbar \omega_{\vec{q}\eta})} \\
&= \epsilon_{\vec{k}s}^0 \sum_{\vec{q}\eta} \frac{|\langle \vec{k} - \vec{q}, s, \vec{q}\eta | \mathcal{H}_{e-p} | \vec{k}s \rangle|^2}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \left[\frac{\hbar^2}{2m^*} (k^2 + q^2 + 2\vec{k}\vec{q}) + \hbar \omega_{\vec{q}\eta} \right]} \\
&= \epsilon_{\vec{k}s}^0 - \frac{2m^*}{\hbar^2} \sum_{\vec{q}\eta} \frac{|\langle \vec{k} - \vec{q}, s, \vec{q}\eta | \mathcal{H}_{e-p} | \vec{k}s \rangle|^2}{q^2 + \underbrace{\frac{2m^*}{\hbar} \omega_{\vec{q}\eta}}_{\tilde{\omega}} - 2\vec{k}\vec{q}}.
\end{aligned}$$

Da wir alles in der Nähe von $k = 0$ betrachten wollen, können wir $\epsilon_{\vec{k}s}^{pert}$ in k entwickeln:

$$\begin{aligned}\epsilon_{\vec{k}s}^{pert} &= \epsilon_{\vec{k}s}^0 - \frac{2m^*}{\hbar^2} \sum_{\vec{q}} \left| \langle \vec{k} - \vec{q}, s, \vec{q} | \mathcal{H}_{e-p} | \vec{k}s \rangle \right|^2 \frac{1}{\tilde{\omega} + q^2} \left(\underbrace{1}_* + \underbrace{\frac{2\vec{k}\vec{q}}{\tilde{\omega} + q^2}}_{**} + \left(\frac{2\vec{k}\vec{q}}{\tilde{\omega} + q^2} \right)^2 + \dots \right) \\ &= const + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'} \\ &= const + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \underbrace{\left(\frac{1}{m^*} + \frac{1}{m'} \right)}_{:= \frac{1}{\tilde{m}}}\end{aligned}$$

*: Eine konstante Verschiebung des Leitungsbands

*: $\sum_{\vec{q}} \frac{2\vec{k}\vec{q}}{\tilde{\omega} + q^2} = 0$ wegen der Symmetrie $k \leftrightarrow -k$

\tilde{m} ist eine neue *renormierte Elektronmasse*.

Elektron + Virtuelle Phononwolke = *Polaron*

Effektive Masse des Elektrons wird durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung verändert!

1.6.4 Transport

Der Transport besteht aus drei Komponenten:

- Strom (Elektronen, Phononen, Photonen, Magnonen)
- Treibende Kraft
- Streumechanismus

Strom

Strom, der durch einen Blochzustand getragen wird:

$$\frac{\frac{\hbar}{2mi} \int_{\text{Einheitszelle}} \left[\psi_{\vec{k}s}^* \nabla \psi_{\vec{k}s} - \psi_{\vec{k}s} \nabla \psi_{\vec{k}s}^* \right] d\tau}{\int_{\text{Einheitszelle}} \psi^* \psi d\tau} = v_{\vec{k}s}$$

$$= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}, s) = \frac{\partial \omega}{\partial k}, \quad E = \hbar \omega$$

Vakuum:

$$E = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow v = \frac{\hbar k}{m}$$

Kristall:

$$E_k \simeq E_0 + \frac{1}{2} \hbar^2 \sum_{ij} \frac{(k_i - k_{\min,i})(k_j - k_{\min,j})}{m_{ij}^*}$$

Wenn Isotropie vorliegt, dann ist

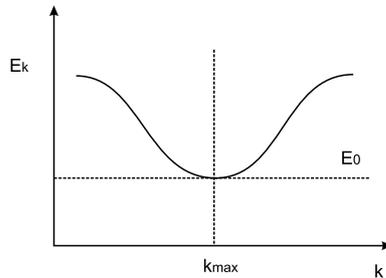


Abbildung 1.53:

$$v = \hbar \frac{k - k_{\min}}{m^*}$$

Treibende Kraft

\vec{E} sei ein elektrisches Feld, welches auf die Elektronen wirkt

$$\delta \varepsilon_{\vec{k}} = -e \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} \delta t$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \cdot \delta \vec{k} = -e \vec{E} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \delta t$$

$$\left(\frac{\partial A}{\partial \vec{k}} \equiv \nabla_{\vec{k}} \right)$$

$$\implies \frac{\delta \vec{k}}{\delta t} = -e \frac{\vec{E}}{\hbar},$$

d.h., die treibende Kraft ändert die Wellenvektoren.

Streumechanismus

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \implies \sigma = \frac{j}{E}$$

Bei der Streuung ist die Übergangsrate in einen Zustand k :

$$\int \left[\omega(\vec{k}, \vec{k}') n_{\vec{k}'} - \omega(\vec{k}', \vec{k}) n_{\vec{k}} \right] d^3 k' \quad (\text{klassisch}),$$

wobei $\omega(\vec{k}, \vec{k}')$ die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand \vec{k}' zum Zustand \vec{k} und $n_{\vec{k}}$ die Besetzungswahrscheinlichkeit vom Zustand \vec{k} ist.

$\omega(\vec{k}, \vec{k}')$ ist symmetrisch, deshalb ist der Fermi-Charakter nicht wichtig.

Boltzmann-Gleichung

Betrachten wir eine Verteilungsfunktion $n(\vec{r}, \vec{k}, t)$. \vec{E} ist ein elektrisches Feld mit $\frac{d\vec{k}}{dt} = -e \frac{\vec{E}}{\hbar}$.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} n + \frac{e\vec{E}}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} n + A$$

$A := \int \left[\omega(\vec{k}, \vec{k}') n_{\vec{k}'} - \omega(\vec{k}', \vec{k}) n_{\vec{k}} \right] d^3 k'$ Streuterm.

Theorie der *linearen Antwort*:

$$n = n_0 + n_1,$$

n_0 Verteilung im Gleichgewicht. Da es sich hier um Elektronen handelt, ist

$$n_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)} + 1}.$$

Wir nehmen eine weitere Vereinfachung durch die Annahme, dass keine räumlichen Variationen vorhanden sind:

$$\nabla_{\vec{r}} n = 0$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{e\vec{E}}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \left(n_0 + \underbrace{n_1}_{*} \right) + \int \left[\underbrace{n_0(\vec{k}')}_{**} + n_1(\vec{k}') - \underbrace{n_0(\vec{k})}_{***} - n_1(\vec{k}) \right] \omega(\vec{k}, \vec{k}') d^3 k'.$$

Terme *, ** und *** können wir in der linearen Antwort vernachlässigen.

Betrachten wir den einfachsten Fall: *S-Wellen-Streuung*

$\omega(\vec{k}, \vec{k}')$ ist als Funktion von \vec{k}' bei festem \vec{k} konstruiert.

$$\frac{\partial n_1(\vec{k})}{\partial t} = \frac{e\vec{E}}{\hbar} \hbar \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} - n_1(\vec{k}) \underbrace{\int \omega(\vec{k}, \vec{k}') d^3 k'}_{\frac{1}{\tau(\vec{k})}, \text{Relaxationszeit}}$$

$$(\nabla_{\vec{k}} n_0 = \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} = \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \hbar \vec{v}_{\vec{k}})$$

- Angenommen, das elektrische Feld wird abgeschaltet, dann ist

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = \frac{n_1(\vec{k})}{\tau(\vec{k})} \implies n_1 = n_0 e^{-t/\tau(\vec{k})}.$$

- Beim stabilen (stationären) Zustand ($\frac{\partial n_1}{\partial t}$)

$$n_1(\vec{k}) = \tau(\vec{k}) e \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}.$$

Betrachten wir nun den *elektrischen Strom*

$$\begin{aligned} \vec{j} &= - \sum_{\vec{k}, \sigma} n_{\vec{k}, \sigma} e \vec{v}_{\vec{k}} \\ &= - \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(\underbrace{n_{\vec{k}, \sigma}^0}_{*} + n_1 \right) e \vec{v}_{\vec{k}} \\ &= - \sum_{\vec{k}, \sigma} n_1 e \vec{v}_{\vec{k}} \end{aligned}$$

*: $\sum_{\vec{k}, \sigma} n_{\vec{k}, \sigma}^0 e \vec{v}_{\vec{k}} \equiv 0$, da im Gleichgewicht $\vec{j} = 0$

Angenommen, \vec{E} richtet in x -Richtung aus:

$$j_x = - \sum_{\vec{k}, \sigma} \tau e^2 v_x^2 E_x \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}$$

$$\implies \sigma_{xx} = \frac{j_x}{E_x} = - \frac{2}{(2\pi)^3} \int \tau(\vec{k}) e^2 v_x^2 \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} d^3 k$$

in Metallen $kT \gg \mu \implies \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - \mu)$

$d^3 k = d\Omega k^2 dk$, $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

$$\int d\Omega v_x^2 = 4\pi \langle v_x^2 \rangle = \frac{4\pi}{3} \langle v^2 \rangle$$

$k \rightarrow k_F$, $v = \frac{\hbar k}{m^*}$, $\implies \langle v^2 \rangle = \left(\frac{\hbar k_F}{m^*} \right)^2$

$$\sigma_{xx} = \frac{2\tau e^2}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \frac{k_F^3}{m^*}$$

Dichte der Elektronen $= \frac{N}{V} = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} k_F^3 = n$

$$\sigma_{xx} = \tau(k_F) e^2 \frac{n}{m^*}$$

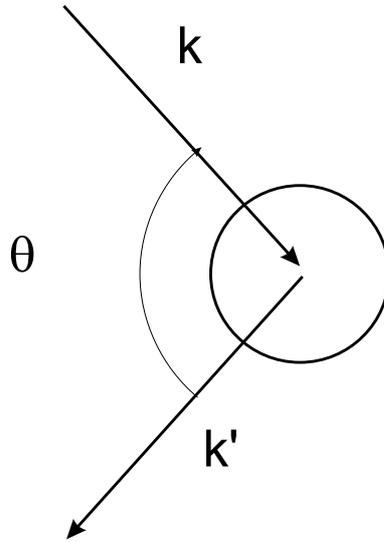


Abbildung 1.54:

Gehen wir nun über die s -Wellen-Streuung hinaus. Nehmen wir an, dass die Streuzentren kugelsymmetrisch sind und dass die Fermi-Fläche ebenfalls kugelsymmetrisch ist

$$\omega(\vec{k}, \vec{k}') = \omega(k = |\vec{k}|, \theta)$$

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = e\vec{E} \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \vec{v}_{\vec{k}} + \int \omega(k, \theta) (n_1(\vec{k}') - n_1(\vec{k})) d^3k.$$

Entwickle in *Legendre-Polynome* bzw. Kugelflächefunktionen

$$\omega(\theta) = \sum_l \omega_l P_l(\cos \theta)$$

$$n_1(\vec{k}) = \sum_{lm} n_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$P_l(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{-l}^l \underbrace{Y_{lm}^*(\theta', \varphi')}_{\vec{k}'} \underbrace{Y_{lm}(\theta, \varphi)}_{\vec{k}}$$

$$\begin{aligned} & \int d^3k \omega(\theta) (n_1(\vec{k}') - n_1(\vec{k})) \\ &= C 4\pi \int d\Omega' \sum_l \frac{\omega_l}{2l+1} \sum_{-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ & \quad \sum_{l'm'} n_{l'm'}^1 (Y_{lm}^*(\theta', \varphi') - Y_{lm}(\theta, \varphi)) \\ &= 4\pi C \sum_{lm} n_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \left(\frac{\omega_l}{2l+1} - \omega_0 \right) \end{aligned}$$

Annahme: \vec{E} sei jetzt in z -Richtung:

$$e\vec{E} \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = e |\vec{E}| |\vec{v}_{\vec{k}}| \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \cos \theta$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

Im stationären Fall ist nur n_{10} relevant, als Y_{10}

$$\begin{aligned} \implies e |\vec{E}| |\vec{v}_{\vec{k}}| \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} + 4\pi C n_{10} \left(\frac{\omega_1}{3} - \omega_0 \right) &= 0 \\ \implies n_1 = n_{10} Y_{10}(\theta, \varphi) &= - \frac{e |\vec{E}| |\vec{v}_{\vec{k}}|}{4\pi C \left(\frac{\omega_1}{3} - \omega_0 \right)} \end{aligned}$$

Schreibe:

$$\tau_{\vec{k}} := \frac{1}{4\pi C \left(\frac{\omega_1}{3} - \omega_0 \right)}$$

Magnetischer Transport

In einem magnetischen Feld \vec{B} ist die Kraft auf ein Elektron:

$$\begin{aligned} \vec{F} &= -e\vec{v} \times \vec{B} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} \\ \left(\frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial t} \right)_{mag} &= \frac{e}{\hbar} (\vec{v} \times \vec{B}) \frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \\ \frac{\partial n_0(\vec{k})}{\partial \vec{k}} &= \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \underbrace{\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}}}_{\hbar \vec{v}} \end{aligned}$$

statisch: $\frac{d}{dt} = 0$, $n = n_0 + n_1$

$$e\vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e}{\hbar} (\vec{v} \times \vec{B}) \frac{\partial n_1}{\partial \vec{k}} - \frac{n_1}{\tau} = 0$$

als Funktion von \vec{v} anstatt von \vec{k}

$$\frac{\partial n_1}{\partial \vec{k}} = \frac{\partial n_1}{\partial \vec{v}_{\vec{k}}} \frac{\partial \vec{v}_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}}, \quad \frac{\partial \vec{v}_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \vec{k} \partial \vec{k}} \quad (Tensor)$$

$$\implies e\vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e}{m^*} (\vec{v} \times \vec{B}) \frac{\partial n_1}{\partial \vec{v}} - \frac{n_1}{\tau} = 0$$

Suchen Lösung der Form:

$$n_1 = \vec{v} \vec{A},$$

wobei \vec{A} ein konstanter Vektor ist.

$$\begin{aligned} e\vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_0} + \frac{e}{m^*} \vec{v} (\vec{B} \times \vec{A}) - \frac{\vec{v} \cdot \vec{A}}{\tau} \\ = \vec{v} \cdot \left(e\vec{E} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_0} + \frac{e}{m^*} (\vec{B} \times \vec{A}) - \frac{\vec{A}}{\tau} \right) \\ = 0 \\ e\vec{E} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e}{m^*} (\vec{B} \times \vec{A}) - \frac{\vec{A}}{\tau} = 0 \end{aligned}$$

- \vec{B} :

$$\tau e \vec{E} \cdot \vec{B} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = \vec{A} \vec{B}$$

- $\vec{B} \times$:

$$\vec{B} \times \vec{A} = \tau e \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} (\vec{B} \times \vec{E}) + \tau e \underbrace{\vec{B} \times (\vec{B} \times \vec{A})}_{(\vec{B} \cdot \vec{A}) \vec{B} - B^2 \vec{A}}$$

$$\vec{A} \left(1 + \left(\frac{\vec{B} \tau e}{m^*} \right)^2 \right) = \tau e \left(\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \vec{E} + \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \frac{\tau e}{m^*} (\vec{B} \times \vec{E}) + \left(\frac{\tau e}{m^*} \right)^2 \vec{B} \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \vec{E} \cdot \vec{B} \right)$$

Definieren wir $\omega_c := \left| \frac{Be}{m^*} \right|$

$$n_1 = \vec{v} \vec{A} = \frac{\tau e \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \vec{v} \left[\vec{E} + \frac{\tau e}{m^*} (\vec{B} \times \vec{E}) + \left(\frac{\tau e}{m^*} \right)^2 (\vec{B} \cdot \vec{E}) \vec{B} \right]}{1 - \omega_c^2 \tau^2}$$

Kubo-Formalismus

$$H^F = \underbrace{T + U}_H + \overbrace{V}^{\text{Streuung}} - eEx,$$

dann ist die Bewegungsgleichung für die Dichtematrix ρ

$$i\dot{\rho} = [H^F, \rho]$$

$$\rho = \rho_0 + \rho_1, \text{ mit } \rho_0 = \frac{1}{e^{\beta(H-\mu)} + 1}$$

$$i\dot{\rho}_1 = \underbrace{[H, \rho_0]}_{=0} + [H, \rho_1] - eE[x, \rho_0] - \underbrace{eE[x, \rho_1]}_{=0, *}$$

*: in Theorie der linearen Antwort.

Sei $\rho(-\infty) = \rho_0$, $E \propto e^{\alpha t}$.

Sei $|n\rangle, |l\rangle, \dots$ eine Basis von Eigenzuständen zu H

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

Damit gilt

$$\langle n|\rho_1|l\rangle (E_l - E_n + i\alpha) = eE \langle n|x|l\rangle (\rho_0^l - \rho_0^n),$$

$$\text{wobei } \rho_0^l = \frac{1}{e^{\beta(E_l - \mu)} + 1}.$$

Wir suchen nach den Lösungen der Form $\rho_1 \sim e^{\alpha t}$

$$i \langle n|v|l\rangle = \langle n|[x, H]|l\rangle = \langle n|x|l\rangle (E_l - E_n)$$

$$\langle n|x|l\rangle = \frac{i \langle n|v|l\rangle}{E_l - E_n}$$

$$\langle n|\rho_1|l \rangle = -ieE \frac{(\rho_0^l - \rho_0^n)}{E_l - E_n} \frac{\langle n|v_x|l \rangle}{E_l - E_n + i\alpha}, \quad j_x = ev_x$$

$$\begin{aligned} \langle j_x \rangle &= \text{Tr}(\rho j_x) \\ &= \sum_{n,l} \langle n|\rho_1|l \rangle \langle l|j_x|n \rangle \\ &= iE \sum_{n,l} \frac{\rho_0(E_l) - \rho_0(E_n)}{E_l - E_n} \frac{\langle n|j_x|l \rangle \langle l|j_x|n \rangle}{E_l - E_n + i\alpha} \end{aligned}$$

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{E} \langle j_x \rangle$$

mit

$$\sigma_{xx} \stackrel{\alpha \rightarrow 0}{=} \frac{i}{2} \sum_{n,l} \underbrace{\frac{\rho_0(E_l) - \rho_0(E_n)}{E_l - E_n}}_* \langle n|j_x|l \rangle \langle l|j_x|n \rangle \underbrace{2\pi i \delta(E_l - E_n)}_{**}$$

*: $\frac{\rho_0(E_l) - \rho_0(E_n)}{E_l - E_n} = \left(\frac{\partial \rho_0(E)}{\partial E} \right)_{E=E_l} = \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E=E_l}$ mit Fermi-Funktion f

*: wegen des thermodynamischen Limes

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\pi \sum_{n,l} \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E=E_l} |\langle n|j_x|l \rangle|^2 \delta(E_l - E_n) \\ &= \int \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E=E_l} \underbrace{\sum_{n',l'} |\langle n'|j_x|l' \rangle|^2}_{F(E)} dE \\ &= \int \left(\frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E=E_l} F(E) dE \end{aligned}$$

Wegen $H = \sum_i H_i$ und $J = \sum_i j_i$ (i ist Index von Teilchen) reduziert sich die Kubo-Formel für das Vielteilchen-Problem auf das Einteilchen-Problem

$$\sigma_{\mu\nu} = \underbrace{\text{Tr}}_{\text{Einzelelektron}} \left\{ \frac{\partial f}{\partial H} \int_0^\infty \frac{1}{2} (j_\mu(t)j_\nu(0) + j_\mu(0)j_\nu(t)) e^{-\alpha t} dt \right\}.$$

Definieren wir nun $g_\mu(\alpha) := \int_0^\infty e^{-\alpha t} j_\mu dt$, dann ist

$$\sigma_{\mu\nu} = \text{Tr} \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial H} g_\mu(0^+) j_\nu(0) + j_\mu(0) g_\nu(0^+) \right]$$

$$i \frac{d}{dt} j(t) = [j(t), H]$$

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty e^{-\alpha t} \frac{d}{dt} j(t) dt \\ &= \left[e^{-\alpha t} j(t) \right]_0^\infty + \alpha \int_0^\infty e^{-\alpha t} j(t) dt \\ &= -j(0) + \alpha g(\alpha) \end{aligned}$$

$$\implies \alpha g(\alpha) - j = i[H, g(\alpha)].$$

Schreiben wir nun $H = H_0 + \lambda V$ und nehmen wir an, dass V keine Diagonalanteile in dieser Darstellung hat

$$\langle n|g|l \rangle = g_l \delta_{nl} + g_{n,l},$$

mit $g_{l,l} := 0$

$$\alpha g(\alpha) = j + i[H_0, g] + i\lambda[V, g].$$

Vom Diagonalanteil haben wir

$$\alpha g_l = j_l + i\lambda \sum_{l'} (V_{ll'} g_{l'} - g_{ll'} V_{ll'}),$$

mit $\langle l|j|l \rangle =: j_l$ und den Außerdiagonalelementen

$$(\alpha - iE_l + iE_{l'}) g_{ll'} = i\lambda (V_{ll'} g_{l'} - g_{ll'} V_{ll'}) + i \sum_{l''} (V_{ll''} g_{l''} - g_{ll''} V_{ll''})$$

$$\implies \alpha g_l = j_l + i\lambda^2 \left(\sum_{l'} \frac{V_{ll'} V_{l'l} g_{l'}}{E_l - E_{l'} - i\alpha} - \frac{V_{ll'} V_{l'l} g_{l'}}{E_l - E_{l'} - i\alpha} - \frac{V_{ll'} V_{l'l}}{E_l - E_{l'} - i\alpha} (g_{l'} - g_l) \right)$$

$$\underbrace{\alpha g_l}_{\rightarrow 0} = j_l + i\lambda^2 \sum_{l'} |V_{ll'}|^2 (g_{l'} - g_l) (-2\pi i) \delta(E_l - E_{l'}).$$

Multipliziere mit $E \frac{\partial f}{\partial E_l}$

$$\implies \sigma_{xx} \cong Tr \left(\frac{\partial f}{\partial E} g_x j_x \right) = \frac{1}{E} Tr (\rho_1 j_x),$$

mit

$$\rho_1 \sim E \frac{\partial f}{\partial E} g.$$

1.6.5 Dielektrischer Response-Formalismus

Sei V_{ext} das externe Potenzial und V_{total} das induzierte Potenzial im System

$$V_{total} := \frac{V_{ext}}{\epsilon}.$$

Wir betrachten folgendes externes Potenzial

$$V_{ext}(\vec{r}, t) = V_{ext}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

(Hier wird nur eine Fourierkomponente genommen.)

$$V_{total}(\vec{r}, t) = V_{total}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

Definieren wir die *Dielektrische Funktion* $\epsilon(\vec{k}, \omega)$, welche die Informationen über das Anregungsspektrum des Elektronensystems beinhaltet

$$V_{total}(\vec{k}, \omega) = \frac{V_{ext}(\vec{k}, \omega)}{\epsilon(\vec{k}, \omega)}.$$

Betrachten wir nun die Potenzialgleichung

$$\nabla^2 V_{ext} = -4\pi \rho_{ext},$$

wobei ρ_{ext} die Ladungen sind, die das externe Potenzial erzeugt

$$\rho_{ext}(\vec{r}, t) = \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}.$$

Speziell:

$$\rho_{ext}(\vec{r}, t) = \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} e^{\delta t}.$$

Wir behandeln den Response des Elektronensystems mit Störungstheorie.

Sei H' die Hamilton-Funktion der Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} H' &= \int \rho(\vec{r}) \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} e^{\delta t} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r d^3 r' \\ &= \int \sum_{\vec{k}'} \rho(\vec{k}') e^{i\vec{k}'\vec{r}} \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} e^{\delta t} \sum_{\vec{k}''} \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k}''(\vec{r} - \vec{r}')} d^3 r d^3 r' \\ &= \int d^3 r d^3 r' \sum_{\vec{k}'} \sum_{\vec{k}''} \rho(\vec{k}') \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) e^{\delta t} \frac{4\pi}{k^2} e^{-i\omega t} \underbrace{e^{i(\vec{k} - \vec{k}'')\vec{r}'}}_{\rightarrow \vec{k} = \vec{k}''} \underbrace{e^{i(\vec{k}' + \vec{k}'')\vec{r}}}_{\rightarrow \vec{k}' = -\vec{k}''} \\ &= \rho(-\vec{k}) \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) \frac{4\pi}{k^2} e^{-i\omega t} e^{\delta t} + c.c. \end{aligned}$$

$$\rho(\vec{r}) \text{ reell} \implies \rho(-\vec{k}) = \rho^+(\vec{k})$$

$$H' = \rho^+(\vec{k}) \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) \frac{4\pi}{k^2} e^{-i\omega t} e^{\delta t} + c.c.$$

Sei nun H die Hamilton-Funktion des wechselwirkenden Elektronensystems ohne den Anteil der Störung, und seien $|\psi_n\rangle = |n\rangle$ die Eigenzustände von H mit $H|n\rangle = E_n|n\rangle$. Angenommen, bei $t \rightarrow \infty$ sei der Zustand des Systems $|\psi_0\rangle$:

$$\Psi(t) = \sum_n \psi_n a_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}$$

einsetzen
 $\xrightarrow{\quad}$

$$\langle \rho_{\vec{k}} \rangle = \frac{4\pi}{\hbar k^2} \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) e^{-i(\omega+i\delta)t} \sum_n \left[\frac{|\langle n | \rho_{\vec{k}}^+ | 0 \rangle|^2}{\omega - \omega_{on} + i\delta} - \frac{|\langle n | \rho_{\vec{k}}^- | 0 \rangle|^2}{\omega + \omega_{on} + i\delta} \right].$$

Aus der Potenzialgleichung

$$V_{ext}(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi}{k^2} \rho_{ext}(\vec{k}, \omega)$$

$$V_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \rho_{total} = \frac{4\pi}{k^2} (\rho_{ext} + \rho_{ind})$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \omega)} &= \frac{V_{total}}{V_{ext}} \\ &= 1 + \frac{\langle \rho_{ind} \rangle}{\langle \rho_{ext} \rangle} \\ &\stackrel{s.o.}{=} 1 + \frac{4\pi}{\hbar k^2} \sum_n |\langle n | \rho_{\vec{k}}^+ | 0 \rangle|^2 \left[\frac{1}{\omega - \omega_{on} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_{on} + i\delta} \right] \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\epsilon} &= P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Re \frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \omega)} &= 1 + \frac{4\pi}{k^2} \sum_n |\langle n | \rho_{\vec{k}}^+ | 0 \rangle|^2 P \left\{ \frac{2\omega_{on}}{\omega^2 - \omega_{on}^2} \right\} \\ \Im \frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \omega)} &= -\frac{4\pi}{\hbar k^2} \sum_n |\langle n | \rho_{\vec{k}}^+ | 0 \rangle|^2 \{ \delta(\omega - \omega_{on}) + \delta(\omega + \omega_{on}) \} \end{aligned}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H + H') \Psi$$

$$\frac{\partial}{\partial t} a_n = -\frac{i}{\hbar} \langle n | H' | 0 \rangle e^{-i \overbrace{(E_0 - E_n)}^{\omega_{on}} t/\hbar}$$

$$\begin{aligned} a_n &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \langle n | H' | 0 \rangle e^{-i\omega_{on} t'} dt' \\ &\stackrel{H' s.o.}{=} \langle n | \rho^+(\vec{k}) | 0 \rangle \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) \frac{4\pi}{k^2} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^t e^{-i\omega_{on} t'} e^{-i\omega t'} e^{\delta t'} dt' \\ &= -\frac{4\pi}{\hbar k^2} \langle n | \rho^+(\vec{k}) | 0 \rangle \rho_{ext}(\vec{k}, \omega) \frac{e^{i(\omega_{on} - \omega - i\delta)t}}{i(\omega_{on} - \omega - i\delta)} \end{aligned}$$

$$\left(\int_{-\infty}^t e^{-i\omega_0 n t'} e^{-i\omega t'} e^{\delta t'} dt' = \frac{e^{i(\omega_0 n - \omega - i\delta)t}}{i(\omega_0 n - \omega - i\delta)} \right)$$

Der Erwartungswert der induzierten Ladungsdichte ist:

$$\begin{aligned} \langle \rho_{\vec{k}} \rangle &= \langle \Psi | \rho(\vec{k}) | \Psi \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle \psi_n | \rho(\vec{k}) | \psi_m \rangle a_n^* a_m e^{i\omega_{nm}t} \\ &\simeq \sum_n \left[\langle n | \rho(\vec{k}) | 0 \rangle a_n^* e^{i\omega_{0n}t} + \langle 0 | \rho(\vec{k}) | n \rangle a_n e^{-i\omega_{0n}t} \right]. \end{aligned}$$