

TKM I

Zusammenfassung

Contents

1	Einleitung und Haftungsausschluss =)	3
2	Festkörperphysik Basics	3
2.1	Ultra Basics	3
2.2	Gittertypen	3
2.3	Reziprokes Gitter	3
2.4	Born-Oppenheimer Näherung	3
3	Elektronischer Anteil	5
3.1	Freies Elektronengas	5
3.2	Bloch Theorem	6
3.3	Zustandsdichte	7
3.4	Bandstrukturen	7
3.5	Tight Binding	7
3.6	Hartree-Fock-Näherung	7
3.7	Stoner Kriterium	8
3.8	Thomas Fermi Abschirmung	10
3.9	Landausche Fermi Flüssigkeit	12
4	Ionischer Anteil	13
4.1	Phononen	14
4.2	Wärmekapazität	16
5	Transportmechanismen und Thermodynamik	17
5.1	Zusammenfassung der Größendefinitionen	18
5.2	Drude Modell	18
5.3	Boltzmann Gleichung	18
5.3.1	Elektrischer Widerstand	21
5.3.2	Wärmekapazität	23
5.3.3	Magnetische Suszeptibilität	23
5.4	Lineare Response	24

6 Elektron-Phonon-Wechselwirkung	25
6.1 Cooper-Instabilität	25
6.2 BCS Theorie	28
6.2.1 BCS Wellenfunkion	30
6.2.2 London Gleichung	32

1 Einleitung und Haftungsausschluss =)

Dies ist eine kleine Zusammenfassung die ich für die Schwerpunktsfachprüfung TKM1 + CCMT bei Prof. Schmalian geschrieben habe. Die ganzen Inhalte sind wild aus Büchern, Wikipedia, Papers, Skripten... zusammenkopiert und so ziemlich alle Rechtschreibregeln und Bestimmungen für wissenschaftliches Arbeiten wurden gebrochen.

Das ganze ist mehr als Sammlung von unterschiedlichen Quellen zu betrachten, mir hat es sehr viel geholfen für die Prüfung die auch recht gut lief =) aber trotzdem kann ich nicht garantieren dass alles stimmt.

2 Festkörperphysik Basics

2.1 Ultra Basics

Schrödinger Gleichung

$$H\Psi = E\Psi$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

Maxwell Gleichungen

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad \nabla^2 \phi + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \vec{A}) = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$
$$\vec{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad \square \vec{A} + \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \mu_0 \vec{J}$$

2.2 Gittertypen

2.3 Reziprokes Gitter

Fourier transformation ist definiert als

$$\tilde{f}(\vec{q}) = \int dr f(\vec{r}) \cdot \exp(-i\vec{q}\vec{r})$$
$$f(\vec{r}) = \int \frac{dq}{(2\pi)^d} \tilde{f}(\vec{q}) \cdot \exp(-i\vec{q}\vec{r})$$

2.4 Born-Oppenheimer Näherung

Die allgemeine Gleichung der Festkörperphysik die 'Theory of everything' die alles beschreibt was man in der Festkörperphysik so macht ist die Schrödingergleichung mit

dem Hamiltonian

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= H\psi \\
H &= T_e + T_i + V_{ee} + V_{ii} + V_{ie} \\
T_e &= - \sum_{j=1}^{N_e} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 & T_i &= - \sum_{l=1}^{N_i} \frac{\hbar^2}{2M_l} \nabla_l^2 \\
V_{ee} &= \sum_{ij}^{N_e} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} & V_{ii} &= \sum_{l'l''}^{N_i} \frac{e^2 Z_l Z_{l''}}{|\vec{R}_l - \vec{R}_{l''}|} \\
V_{ei} &= - \sum_{il}^{N_e N_i} \frac{e^2 Z_l}{|\vec{r}_i - \vec{R}_l|}
\end{aligned}$$

Nun ist die Idee dass die Freiheitsgrade der Ionen und der Elektronen entkoppeln weil die Elektronen so viel leichter sind und daher sich viel schneller bewegen als die Ionen

$$\frac{m}{M_{ion}} = \frac{10^{-3}}{Z_e} \ll 1$$

So entkoppeln die Freiheitsgrader der Elektronen und Ionen

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_i}) = \psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\})$$

Für die Elektronen bewegen sich die Ionen nicht $T_i = 0$ und V_{ie} hängt nur noch parametrisch von den Ionenpositionen ab.

$$\begin{aligned}
H_{ee} &= T_e + V_{ee} + V_{ie} & H_{ee} \psi_{el} &= E_{el} \psi_{el} \\
\psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\}) &= \sum_n \psi_{el n}(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\}) \Phi_n(\{\vec{R}_l\}) \\
(T_i + V_{i\ eff}) \Phi_n &= E \Phi_n
\end{aligned}$$

Somit entkoppelt das System in dieser Näherung in zwei Teilprobleme, das Ionische und das Elektronische, die weitestgehend getrent betrachtet werden und Wechselwirkungen über Störungstheorie eingeführt werden.

Diese Näherung ist gerechtfertigt da:

ϵ_F ist die Typische Energie der Elektronen

$\left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{3}{2}} \epsilon_F$ ist die Typische Energie der Ionen.

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{2M} \psi_n \nabla^2 \Phi_n &= \left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \epsilon_F \psi_n \Phi_n \\
\frac{\hbar}{2m} (\nabla_l \psi_n) (\nabla_l \Phi_n) &= \left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{3}{2}} \epsilon_F \psi_n \Phi_n \\
\frac{\hbar}{2M} (\nabla^2 \psi_n) \Phi_n &= \frac{m}{M} \epsilon_F \psi_n \Phi_n
\end{aligned}$$

3 Elektronischer Anteil

3.1 Freies Elektronengas

Da Elektronen Fermionen sind wir die Fermi Funktion als Verteilungsfunktion angenommen.

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1}$$
$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

Die Zustandsdichte ist dann

$$\rho(\omega) = V \frac{4\pi m}{\hbar^3} \sqrt{2m} \sqrt{\omega} = V A_0 \sqrt{\omega}$$

Allgemein gilt

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \sum_b \langle n_p \rangle$$

Bei $T = 0$ gilt

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2 \langle N \rangle}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$$
$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z_G) = \frac{3}{5} \langle N \rangle E_F$$

Bei finiten Temperaturen

$$c_V = \frac{1}{\langle N \rangle} \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \rho_0(E_F) \cdot T = \gamma \cdot T$$

Nur änderungen der Zustandsdichte im bereich $k_B T$ um die Fermikante.
Magnetisierung bei schwachem Feld B

$$M = \mu_B (\langle N_\uparrow \rangle - \langle N_\downarrow \rangle) = \mu_B \langle N \rangle \int_0^{E_F} d\omega (\rho_0(\omega + \mu_B B) - \rho_0(\omega - \mu_B B))$$
$$\approx 2\mu_B^2 \langle N \rangle B \rho_0(E_F)$$

Mit der Suszeptibilität

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = 2\mu_B^2 \langle N \rangle \rho_0(E_F)$$

3.2 Bloch Theorem

Das Bloch Theorem ist ein e wichtige Grundlage für die Berechnung von Wellenfunktionen in periodischen Potentialen. Typischerweise werden in der Festkörperphysik (im einfachsten Fall unendlich ausgedehnte) periodische Potentiale betrachtet. Diese Potentiale werden in Kristallen durch die Coulomb anziehung der Atomrümpfe auf (delokalisierte) Elektronen gebildet.

Für wechselwirkungsfreie Elektronen sieht der Hamiltonian folgendermaßen aus

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})$$

Ist nun das Potential U periodisch

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{t})$$

Dann besagt das Blochsche Theorem dass die Eigenzustände des Hamiltonian so aussehen:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

mit dem Vektor \vec{k} aus der ersten Brillouin Zone

und der Periodizität von u: $u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{t})$

So wo kommt das jetzt her?

Wir betrachten den Translationsoperator T mit den Eigenschaften:

$$\begin{aligned} T_{\vec{t}} f(\vec{r}) &= f(\vec{r} + \vec{t}) \\ T_{\vec{t}}^\dagger &= T_{-\vec{t}} = T_{\vec{t}}^{-1} \quad \text{Unitär} \\ T_{\vec{t}_1} T_{\vec{t}_2} &= T_{\vec{t}_2} T_{\vec{t}_1} = T_{\vec{t}_1 + \vec{t}_2} \\ [T_{\vec{t}}, H] &= 0 \end{aligned}$$

Da H und $T_{\vec{t}}$ kommutieren schließen wir dass die beiden gemeinsame Eigenzustände haben

$$H\psi = E\psi \qquad T_{\vec{t}}\psi = c_{\vec{t}}\psi$$

Dies gilt nur wenn der Translationsoperator nur um Vektoren \vec{t} verschiebt unter denen das Potential U invariant bleibt, dies sind daher Gittervektoren des Bravais Gitters unseres Kristalles. Da T ja unitär ist muss gelten: $|c_{\vec{t}}| = 1$

Da T mit sich selbst kommutiert (für unterschiedliche Gittervektoren $\vec{t}_{1/2}$) können die Eigenwerte allgemein dargestellt werden für jeden beliebigen Gittervektor $\vec{t} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$. Und $c_{\vec{a}_i} = e^{2\pi i x_i}$ und der Bedingung $x_i \in (0, 1)$ damit sind Alle Raumgebiete abgedeckt da wir ja mit den x_i die Einheitszelle aufspannen.

Somit lässt sich c darstellen als

$$c_{\vec{t}} = (c_{\vec{a}_1})^{n_1} (c_{\vec{a}_2})^{n_2} (c_{\vec{a}_3})^{n_3} = \exp(2\pi i(n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3)) = e^{i\vec{k}\vec{t}}$$

Wenn \vec{k} über die reziproken Gittervektoren \vec{b}_i so definiert ist:

$$\vec{k} = \sum_j x_j \vec{b}_j$$

$$\vec{b}_1 = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \vec{b}_2 = \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \dots \quad \vec{b}_1 \perp \vec{a}_1, \vec{a}_2$$

Wenn man jetzt also mit einem Gittervektor von einer Einheitszelle zu nächsten geht so erhält man nur einen Phasenfaktor der Form e^{ikt} und ansonsten genau die gleiche Funktion, somit lässt sich die wellenfunktion aufteilen in einen periodischen teil u und einen Phasenfaktor. Mit $\vec{k} \in 1.BZ.$ da ja die $x_1 \in (0, 1)$. Dies ist genau was das Blochsche Theorem sagt.

3.3 Zustandsdichte

Die Zustandsdichte beschreibt die Zahl der Zustände im Intervall $d\omega(d\epsilon)$ um $\omega(E)$.

$$n(\omega) = \frac{1}{N} \sum_j \sum_{\vec{k}} \delta(\omega - \omega_k(\vec{k}))$$

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_{n\vec{k}\sigma} \delta(E - \epsilon_n(\vec{k}))$$

3.4 Bandstrukturen

3.5 Tight Binding

Bei der Tight Binding näherung in der Festkörperphysik handelt es sich um das Gegenstück zur freien elektronen Näherung mit stark lokalisierten Wellenfunktionen an den Gitterplätzen der Ionen. (Siehe zusammenfassung CCMT)

3.6 Hartree-Fock-Näherung

Der Witz hinter der Hartree-Fock Näherung ist der, dass man ein System Wechselwirkender Teilchen so beschreiben kann, dass die einzelnen Teilchen als nicht wechselwirkend angesehen werden können und sich im mittleren Potential aller anderen Teilchen bewegt.

Dazu wird der Hamiltonian so umgeschrieben dass der Wechselwirkungsterm in zwei Terme aufgeteilt wird die reweils aus Erzeuger und Vernichter bestehen.

$$\langle AB \rangle = \underbrace{(A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle)}_{\text{Korellation in HF} = 0} + \langle A \rangle B + B \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

Wenn man nun A und B als die Erzeugungs- Vernichtungsoperatoren nimmt sieht der Term aus wie ein freies Problem. Leider hängen die Koeffizienten nun aber von den

Erwartungswerten ($\langle \rangle$) bezüglich der Eigenzustände ab. Dies führt auf ein Selbstkonsistenzproblem.

Man macht das nun mit den Feldoperatoren $\psi_\sigma(\vec{r})$.

$$\begin{aligned} \psi_\sigma^\dagger(\vec{r})\psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\psi_\sigma(\vec{r})\psi_{\sigma'}(\vec{r}') &\approx \langle \psi_\sigma^\dagger(\vec{r})\psi_\sigma(\vec{r}) \rangle \psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\psi_{\sigma'}(\vec{r}') \\ &+ \langle \psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\psi_{\sigma'}(\vec{r}') \rangle \psi_\sigma^\dagger(\vec{r})\psi_\sigma(\vec{r}) \\ &- \langle \psi_\sigma^\dagger(\vec{r})\psi_{\sigma'}(\vec{r}') \rangle \psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\psi_\sigma(\vec{r}) \\ &- \langle \psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\psi_\sigma(\vec{r}) \rangle \psi_\sigma^\dagger(\vec{r})\psi_{\sigma'}(\vec{r}') \end{aligned}$$

Jetzt in zweiter Quantisierung für Fermionen.

$$H_{HF} = \sum_{\sigma, \sigma', \alpha, \beta} h_{\alpha, \beta}^{\sigma, \sigma'} \cdot c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma'} \quad (1)$$

$$h_{\alpha, \beta}^{\sigma, \sigma'} = \left(t_{\alpha\beta} + \underbrace{\sum_{\gamma\delta\sigma''} V_{\alpha\gamma\delta\beta} \langle c_{\gamma\sigma''}^\dagger c_{\delta\sigma''} \rangle}_{\text{Hartree Term}} \right) \delta_{\sigma\sigma'} - \underbrace{\sum_{\gamma\delta} V_{\alpha\gamma\delta\beta} \langle c_{\gamma\sigma'}^\dagger c_{\delta\sigma} \rangle}_{\text{Fock Term}} \quad (2)$$

Nun hat man den Wechselwirkungsterm auf einen effektiven nicht wechselwirkenden Hamiltonian reduziert.

Der Hartree Term beschreibt das Potential das durch alle anderen Elektronen (eingefroren an ihrer Mittelwertspition) hervorgerufen wird.

Der Fock Term ist der Austausch Term

3.7 Stoner Kriterium

Um das stoner Kriterium des Ferromagnetismus herzuleiten wird vom Hubbard Modell ausgegangen. Dies ist ein erweitertes Tight binding Modell bei dem zusätzlich zu den hopping elementen zwischen den Sites auch noch eine Onsite Coulomb wechselwirkung betrachtet wird

$$H = \sum_{\sigma ij} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (3)$$

Unter Hartree Fock näherung und der Annahme dass der Spin eine gute Quantenzahl ist ($\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle \approx \delta_{\sigma\sigma'}$) ergibt sich.

$$\begin{aligned} H_{HF} &= \sum_{\sigma ij} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_{i\sigma} \langle n_\sigma \rangle n_{i\sigma} \\ &= \sum_{\sigma ij} (t_{ij} + U \langle n_\sigma \rangle \delta_{ij}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \\ &= \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_{\vec{k}} + \mu + U \langle n_\sigma \rangle) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle &= \langle c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \rangle = \left(e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}} + \mu + U\langle n_\sigma \rangle)} + 1 \right)^{-1} \\ \langle n_\sigma \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} \langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle\end{aligned}$$

Nun haben wir wieder eine Selbstkonsistenzgleichung weil ja der Erwartungswert $\langle n_\sigma \rangle$ bezüglich der Eigenvektoren ist. Wir führen nun eine Variablentransformation ein:

$$\begin{aligned}n &= \langle n_\uparrow \rangle + \langle n_\downarrow \rangle \\ m &= \langle n_\uparrow \rangle - \langle n_\downarrow \rangle \\ \langle n_\sigma \rangle &= \frac{1}{2}(n + \sigma m)\end{aligned}$$

m ist proportional zur makroskopischen Magnetisierung $M = N\mu_B \cdot m$

$$\begin{aligned}m &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} \sum_{\sigma} \frac{\sigma}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu + \frac{U}{2}(n - \sigma m))} + 1} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} \frac{\sinh\left(\frac{\beta U m}{2}\right)}{\cosh\left(\frac{\beta U m}{2}\right) + \cosh(\beta(\omega - \mu_r))}\end{aligned}$$

Mit $\mu_r = \mu - U\frac{n}{2}$.

Nun wird die Summe durch ein Integral ersetzt $\frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} \rightarrow \int d\omega \rho(\omega)$

Man sieht dass $m = 0$ eine triviale Lösung des Problems darstellt, aber das wussten wir ja auch schon davor.

Um nun eine nichttriviale Lösung zu finden muss die Kurve der rechten Seite die Ursprungsgerade (linke Seite) schneiden. Um herauszufinden wann das der Fall ist Taylorn wir die rechte Seite und erhalten

$$\begin{aligned}m &= a(T, U) \cdot m + b(T, U) \cdot m^3 + \dots \\ a &= \frac{U\beta}{2} \int d\omega \rho(\omega) \frac{1}{1 + \cosh(\beta(\omega - \mu_r))}\end{aligned}$$

Damit die Kurven sich nochmal außerhalb von 0 schneiden muss gelten $a > 1$. Man erwartet tiefe Kritische Temperaturen T_c . Betrachtet man nun den Limes $T_c \rightarrow 0$ und $\beta \rightarrow \infty$ mit $\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{a}{\cosh(ax)} = \delta(x)$.

$$a(T = 0, U) = \frac{U}{2} \rho(E_F)$$

Dies ist nun die Stoner Bedingung des Ferromagnetismus

$$\begin{aligned} \frac{U}{2}\rho(E_F) > 1 &\rightarrow \text{Ferromagnetismus} \\ \frac{U}{2}\rho(E_F) < 1 &\rightarrow \text{Paramagnetismus} \end{aligned}$$

3.8 Thomas Fermi Abschirmung

Abschirmungseffekte beschreiben den Verlauf eines extern angelegten Potentials im inneren eines Festkörpers und die Veränderung der Potentialform durch die Anpassung der Ladungsträger.

Die Thomas Fermi Abschirmung wird im Jellium Modell hergeleitet, dabei sind die positiven Ionenladungen nicht lokalisiert sondern gleichmäßig über das gesamte Volumen verschmiert. Die Elektronen sind darin frei beweglich.

Zuerst schauen wir uns nochmal die ganz normalen Maxwell Gleichungen an

$$\vec{\nabla} \vec{E} = 4\pi(\rho + \rho_{ext}) \quad (I)$$

$$\vec{\nabla} \vec{D} = 4\pi\rho_{ext} \quad (II)$$

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (III)$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi \quad (IV)$$

Wir legen nun mit einem elektrischen Feld $\vec{E} = -\nabla\Phi$ ein Potential Φ an. Dieses Φ ist das volle Potential unter Einbeziehung der Umverteilung der Elektronen durch das Potential. Es handelt sich also mal wieder um ein Selbstkonsistenzproblem.

Um rechnen zu können und sicherzustellen dass alle Größen auch definiert sind (chemisches Potential, Temperatur nur im GG definiert????) nehmen wir an dass $\Phi(\vec{r})$ räumlich langsam veränderlich ist und somit an jedem Punkt ein lokales Gleichgewicht herrscht. Dies verändert lokal das chemische Potential (oder die Fermi Energie, ist ja das gleiche (oder??)).

$$E_F \rightarrow E_F + e\Phi$$

Die Elektronenkonzentration n verhält sich zur Fermi Energie wie

$$n_e(E_F) = cE_F^{\frac{3}{2}}$$

Damit kann man die induzierte Ladung schreiben

$$\begin{aligned} \rho &= -[en_e(E_F + e\Phi) - en_e(E_F)] \\ &\approx -e^2\Phi \frac{\partial n_e}{\partial E_F} \Big|_{E_F} = -\frac{3}{2}cE_F^{\frac{1}{2}}e^2\Phi = -\frac{3}{2}n_e e \frac{e\Phi}{E_F} \end{aligned}$$

Jetzt benutzen wir die Maxwellgleichungen von Oben und setzen (IV) in (I) ein und ersetzen das Potential durch die eben gefundene Beziehung zur induzierten Ladung.

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \vec{E} &= -\vec{\nabla}^2 \Phi \\ \frac{3}{2} \frac{E_F}{n_e e^2} \vec{\nabla}^2 \rho &= 4\pi(\rho + \rho_{ext}) \\ \rightarrow \vec{\nabla}^2 \rho &= \frac{6\pi n_e e^2}{E_F} (\rho + \rho_{ext}) = k_{TF}^2 (\rho + \rho_{ext})\end{aligned}$$

Nun Fourier transformieren wir das ganze dadurch werden die Ableitungen einfacher ($\vec{\nabla}^2 \rho_e \rightarrow q^2 \rho_e$)

$$\rho_e = -\frac{k_{TF}^2}{q^2} (\rho + \rho_{ext}) = -\frac{k_{TF}^2}{q^2} (\rho + \rho_{ext})$$

Nun ignorieren wir mal die Ionenladung ($\rho = \rho_e$) und betrachten die Verschiebung D und deren Divergenz.

$$\begin{aligned}\vec{D} &= \epsilon \vec{E} \\ \vec{\nabla} \vec{D} &= 4\pi \rho_{ext} = \epsilon \vec{\nabla} \vec{E} = \epsilon 4\pi (\rho + \rho_{ext}) \\ \rightarrow \epsilon &= \frac{\rho_{ext}}{\rho + \rho_{ext}} = \frac{-\left(\frac{q^2}{k_{TF}^2} + 1\right)}{1 - \frac{q^2}{k_{TF}^2} - 1} = \frac{q^2 + k_{TF}^2}{q^2} \\ \text{mit } k_{TF}^2 &= \frac{6\pi n_e e^2}{E_F}\end{aligned}$$

Beispiel: Externe Punktladung

$$V(r) = \frac{e^2}{r} \rightarrow V_{eff}(r) = \frac{1}{\epsilon(r)} \frac{e^2}{r}$$

Nun Fourier transformieren wir das um in den q raum zu kommen (das ϵ das wir oben ausgerechnet haben hängt ja von q ab).

$$\begin{aligned}V(q) &= \frac{4\pi e^2}{q^2} \rightarrow V_{eff}(q) = \frac{1}{\epsilon(q)} \frac{4\pi e^2}{q^2} \\ &= \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2}\end{aligned}$$

Dann wieder eine Rücktransformation in den Ortsraum

$$V_{eff}(r) = \frac{e^2}{r} e^{-k_{TF} \cdot r}$$

Das Potential wird im Festkörper exponentiell abgeschwächt.

3.9 Landausche Fermi Flüssigkeit

Mit der Landauschen Fermi Flüssigkeit werden Wechselwirkende Elektronen Systeme beschrieben. Dazu wird vom nicht wechselwirkenden Fermi Gas ausgegangen ($p < p_F$) bei dem adiabatisch langsam eine Wechselwirkung angeschaltet wird. Das System geht dann über in das der Fermi Flüssigkeit, es wird davon ausgegangen dass sich die Energie Level bei diesem Prozess nicht kreuzen und dass der Grundzustand adiabatisch übergeht. Damit schafft man es (auch nicht schwach) wechselwirkende Systeme über das Model nicht wechselwirkender Quasiteilchen zu berechnen.

Als Ansatz geht man von einem Elektron außerhalb der gefüllten Fermikugel aus (E_1), welches mit einem Elektron in der Fermikugel (E_2) wechselwirkt. Nach der WW sind beide Elektronen außerhalb der Fermikugel (wegen Pauli) (E_3 und E_4). Jetzt ist die Frage, wie lange kann das äußere Elektron als WW frei betrachtet werden? (Lebensdauer $\frac{1}{\Gamma}$)

$$\Gamma = |\langle V \rangle|^2 \int dE_2 \int dE_3 \int dE_4 \rho(E_2) \rho(E_3) \rho(E_4) \cdot \underbrace{f(E_2)(1-f(E_3))(1-f(E_4))}_{\text{Goldene Regeln}} \cdot \underbrace{\delta(E_1 + E_2 - E_3 - E_4)}_{\text{Energieerhaltung}}$$

Wenn man diese Integrale unter diesen Nebenbedingungen dann ausführt kommt man auf

$$\Gamma = |\langle V \rangle|^2 \rho_F^3 \max\left(\frac{\pi}{4}(k_B T)^2; \frac{1}{2}E_1^2\right) \quad E_1 \gg T$$

Wir definieren die dimensionslose Kopplungskonstante $\lambda = \langle V \rangle \rho_F$, mit $\rho_F \sim \frac{1}{E_F}$ erhalten wir nun die Lebensdauer des freien Elektron

$$\Gamma = \lambda^2 \frac{E_1^2}{E_F} \quad \text{wenn } E_1 \approx \frac{E_F}{\lambda^2}$$

$$\Gamma \approx E_1$$

Dies gilt auch für nicht kleine WW ($1 \gtrsim \lambda$) und bedeutet dass trotz einer Wechselwirkung der Elektronen die freie Beschreibung funktioniert.

Um jedoch vernünftige Ergebnisse zu erhalten muss man die Beschreibung durch nicht WW Quasiteilchen einführen, diese haben gegenüber den Elektronen eine renormierte Masse ($m \rightarrow m^*$) mit

$$\rho_F = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \hbar^2}$$

Man hat die aus der gleichverteilten Situation angeregten Zustände $\delta n_{k\sigma}$

$$n_{k\sigma} = n_{k\sigma}^{(0)} + \delta n_{k\sigma} \quad \sum_{k\sigma} \delta n_{k\sigma} = 0$$

mit der Anregungsenergie

$$\delta E = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} \delta n_{k\sigma}$$

$$\epsilon_k = \frac{k^2}{2m^*} - \frac{k_F^2}{2m^*} \approx v(k - k_F)$$

Mit v linear in der Nähe von k_F und der effektiven Masse m^*

$$v = \frac{k_F}{m^*}$$

Wärmekapazität:

$$c = \frac{d}{dT} U = 2 \sum_k \epsilon_k \frac{dn_k}{dT} = \frac{1}{k_B T^2} \int d\epsilon \rho(\epsilon) \epsilon^2 \frac{e^{\beta\epsilon}}{(e^{\beta\epsilon} + 1)^2} = k_B^2 T \rho_F \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2}}_{\frac{\pi^2}{3}}$$

$$= \frac{\pi^2 k_B^2 \rho_F}{3} T = \gamma T$$

$$\gamma = \frac{m^*}{m} \gamma_{free}$$

Suszeptibilität:

Die Änderung der Besetzungszahlen $\delta n_{\vec{k}\sigma}$ ändert die Energie der Quasiteilchen

$$\epsilon_{k\sigma} = \epsilon_{k\sigma}^0 + \delta \epsilon_{k\sigma}$$

Der Zusammenhang zu den Besetzungszahlen kommt über den Wechselwirkungsparameter f

$$\delta \epsilon_{k\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{k'\sigma'} f_{k\sigma, k'\sigma'} \delta n_{k'\sigma'}$$

Dieser wird in symmetrischen und antisymmetrischen Teil zerlegt (das hebt die Spinabhängigkeit) und über die Dichte an der Fermikante renormiert.

$$f_{k\sigma, k'\sigma'} = f_{kk'}^s + \sigma\sigma' f_{kk'}^a$$

$$F^{s/a} = \rho_F f^{s/a}$$

Damit erhält man eine Normierung der Magnetischen (spin) Suszeptibilität zu

$$\chi_c = \frac{\rho_F}{1 + F_0^s}$$

4 Ionischer Anteil

In diesem Abschnitt wird der Ionische Teil von Festkörperanregungen besprochen, dabei wird die Bewegung der Atomrümpfe als unabhängig von den elektronischen Eigenschaften gesehen.

4.1 Phononen

Warum können Phononen durch ein klassisches Modell beschrieben werden?

An sich sind Phononen ein Quantenmechanisches phänomen, jedoch lassen sie sich durch klassische Annahmen sehr gut beschreiben. Warum ist das so? Systemgröße sehr groß -> diskretes Spektrum kann gut durch kontinuierliches angenähert werden (Summen -> integrale)

Die Dispersion bleibt durch Quantisierung unverändert! (<- Zitat aus Protokoll)

Einatomige lineare Kette.

Wir betrachten eine Kette aus Atomen der Masse M die mit der Federkonstanten k aneinander gekoppelt sind. Der Abstand zwischen den Atomen beträgt a und es werden Periodische Randbedingungen angenommen. Die Position der einzelnen Atome mit der Auslenkung u aus der Ruhelage ist:

$$R_l(t) = R_l^0 + u_l(t) = l \cdot a + u_l(t)$$
$$u_{l+N} = u_l$$

Die klassische Bewegungsgleichung wird aufgestellt indem die kinetische Energie des Atoms l mit der in den umgebenden 'Federn' gespeicherten Energie gleichgesetzt wird. Dabei wird davon ausgegangen dass die Energie der Federn in den Ruhelagen null ist.

$$M \frac{d^2}{dt^2} u_l(t) = k(u_{l+1} - u_l) + k(u_{l-1} - u_l) = -2k \cdot u_l + k(u_{l+1} + u_{l-1})$$

Diese Differentialgleichung kann gelöst werden mit dem Ansatz:

$$u_l = A e^{i\omega t} e^{-i\frac{2\pi n l}{N}} = A e^{i\omega t} e^{-iR_l^0 q_n}$$
$$q_n = \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N}$$
$$\rightarrow u_{l\pm 1} = e^{\mp i q_n a} u_l$$

Eingesetzt in die DGL und dann aufgelöst nach $\omega(q)$ ergibt die Dispersionsrelation:

$$-M\omega^2 u_l = -2k u_l (1 - e^{-i q_n a} - e^{i q_n a})$$
$$\omega(q) = \sqrt{\frac{2k}{M}} \sqrt{1 - \cos(qa)}$$

Diese hat eindeutige Werte nur für $-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$, dies entspricht der ersten Brillouin Zone.

Im limes kleiner Impulse $q \ll 1$ kann der Kosinus entwickelt werden $\cos(qa) \approx 1 - \frac{(qa)^2}{2}$, damit vereinfacht sich die Dispersionsrelation zu

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{k}{M}} a |q| = c_s \cdot |q|$$

Man erhält also einen linearen Zusammenhang zwischen Impuls q und der Energie ω . Die Proportionalitätskonstante ist die Schallgeschwindigkeit c_s im Medium.

Zweiatomige lineare Kette.

Betrachtet man nun eine zweiatomige Basis, mit einheitszellenlänge a . Die Atome haben unterschiedliche Massen $M_{1/2}$ die Atompositionen sind gegeben durch

$$\begin{aligned} R_l^1(t) &= R_l^0 + u_l^1(t) = l \cdot a + u_l^1(t) \\ R_l^2(t) &= R_l^0 + b + u_l^1(t) \\ u_{l+N} &= u_l \end{aligned}$$

Somit ist das erste Atom am Anfang der Einheitszelle und das zweite ist um b hinein verschoben. Die Federkonstanten zwischen den Atomen sind $k_{1/2}$.

Damit ergeben sich nun zwei gekoppelte DGLs für die zwei Atomsorten weil die potentielle Energie ja von den Positionen des jeweils anderen Atoms abhängt.

$$\begin{aligned} M_1 \frac{d^2}{dt^2} u_l^1 &= -k_1(u_l^1 - u_l^2) - k_2(u_l^1 - u_{l-1}^2) \\ M_2 \frac{d^2}{dt^2} u_l^2 &= -k_1(u_l^2 - u_l^1) - k_2(u_l^2 - u_{l+1}^1) \end{aligned}$$

Wir wählen einen ähnlichen Ansatz mit unterschiedlicher Konstante A

$$u_l^k = A^k e^{i\omega t} e^{-i\frac{2\pi n l}{N}} = A e^{i\omega t} e^{-iR_l^0 q_n}$$

Setzt man diesen Ansatz in die DGLs ein vereinfacht sich das Problem zu einer Matrixgleichung der Form $M \cdot (A^1 \ A^2)^T = 0$, welche nichttriviale Lösungen hat für die Bedingung $\det(M) = 0$. Diese Determinante ergibt uns die Dispersionsrelation:

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2 &= \frac{1}{2} \omega_0^2 \left(1 \pm \sqrt{1 - \gamma \sin^2 \left(\frac{qa}{2} \right)} \right) \\ &\quad \omega_0^2 \frac{k_1 + k_2}{M_1 + M_2} (M_1 + M_2) \\ \gamma &= \frac{16M_1 M_2 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2 (M_1 + M_2)^2} \end{aligned}$$

Betrachtet man nun wieder kleine $q \ll 1$ erhält man nun wieder einen linearen Zweig proportional zu q , aber auch einen für $q \rightarrow 0$ nichtverschwindenden Zweig.

$$\begin{aligned} \omega_- &\approx \sqrt{\gamma} \frac{\omega_0 a}{4} \cdot q \\ \omega_+ &\approx \omega_0 \left(1 - \frac{\gamma}{32} (qa)^2 \right) \end{aligned}$$

Hierbei wird ω_- der akustische Zweig genannt da sich diese Wellen wie Schallwellen verhalten und sich mit Schallgeschwindigkeit ausbreiten. Die Lösung ω_+ ist der optische Zweig, da die zwei Atome in der Einheitszelle dann entgegengesetzt schwingen und es möglich ist bei Ionischen Kristallen diese optisch anzuregen.

Lineare Kette in d Dimensionen:

4.2 Wärmekapazität

$$c_V = \frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial T}$$

Debye Model:

Das Debye beschreibt Akustische Phononen bei kleinen Energien und geht daher von einer linearen dispersionsrelation aus

$$\omega(q) = c_s \cdot q$$

$$E - E_0 = \sum_{sq} \hbar\omega(q) \underbrace{f(q)}_{\text{Bose Funktion(Phononen)}} = \sum_{sq} \frac{\hbar c_s q}{\exp(\beta c_s q \hbar) - 1}$$

c_s ist isotrop bei 3D wird daher die Summe über s einfach zum Faktor 3 $\sum_s \rightarrow 3$. Wir ersetzen die Summe über q durch ein Integral über die Impulse kleiner der Debye Frequenz.

$$\sum_q \rightarrow V \int_{|q| < q_D} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}$$

$$\int_{|q| < q_D} d^3 q \rightarrow 4\pi \int_0^{q_D} q^2 dq$$

Nun wird die Energie zu

$$E - E_0 = \frac{3V}{(2\pi)^3} \int_0^{q_D} dq \frac{\hbar c_s q^3}{\exp(\beta c_s q \hbar) - 1}$$

Nun substituieren wir

$$x = \beta c_s q \hbar \qquad \frac{dx}{dq} = \beta c_s \hbar$$

Und erhalten damit

$$\begin{aligned}
 E - E_0 &= \frac{3V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta^3 \hbar^2 c_s^2} \frac{1}{\hbar \beta c_s} \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \\
 &= \frac{6V}{(2\pi)^2} \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3 c_s^3} \underbrace{\int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{\frac{\pi^4}{15} \text{ für } \Theta_D \gg T, \frac{\Theta_D}{T} \rightarrow \infty}
 \end{aligned}$$

Damit erhalten wir für tiefe Temperaturen $\Theta_D \gg T$ die Temperaturabhängigkeit

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T}(E - E_0) = \frac{6V\pi^2}{15} \frac{k_B^4}{\hbar^3 c_s^3} T^3 = \alpha T^3$$

Einstein Model:

Das Einstein Model ist ein super einfaches Model für optische Phononen bei der die Dispersionsrelation als konstante angenommen wird

$$\omega(q) = \omega_E$$

Damit kann man auch die spezifische wärmekapazität berechnen (mit $k_B \Theta_E = \hbar \omega_E$).

$$c_V = d \frac{N}{V} r k_B \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{-\frac{\Theta_E}{T}}}{\left(e^{-\frac{\Theta_E}{T}} - 1 \right)^2}$$

Betrachten wir nun den Limes hoher Temperaturen ($T \gg \Theta_E$) erhalten wir das Dulong Petit Gesetz, dieses beschreibt eine wärmekapazität welche konstant mit der Temperatur ist.

$$c_V = 3 \frac{N}{V} r k_B$$

Bei kleinen Temperaturen erhält man eine Exponentielle Abhängigkeit

$$c_V = \frac{N}{V} r k_B \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{\Theta_E}{T}}$$

5 Transportmechanismen und Thermodynamik

Kubo-Formel:

Lineare Response: Wir wollen wissen wie sich der Erwartungswert eines Operators $A(t)$ verändert wenn wir dem Hamiltonian ab t_0 eine kleine zeitabhängige Störung hinzufügenen.

$$\begin{aligned}
 H(t) &= H_0 + H'(t)\Theta(t - t_0) \\
 \langle A(t) \rangle &= \langle A(t) \rangle - \langle A \rangle_0 = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{AH'}^R(t, t') \\
 C_{AH'}^R(t, t') &= -i\theta(t - t') \langle [A(t), H'(t')] \rangle_0
 \end{aligned}$$

5.1 Zusammenfassung der Größendefinitionen

Elektrische Leitfähigkeit
Suszeptibilität
Spezifische Wärmekapazität
Wärmeleitfähigkeit
Innere Energie
Chemisches Potential

5.2 Drude Modell

5.3 Boltzmann Gleichung

In der Boltzmann-Gleichung werden nicht direkt die Wellenfunktionen betrachtet, sondern die Verteilungsfunktion eines Wellenpakets $f_n(\vec{k}, \vec{r}, t)$. Mit dem Bandindex n . Aus dieser Funktion kann man die Elektronendichte n

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}n} f_n(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

und die Stromdichte j berechnen.

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{k}n} \vec{v}_{\vec{k}n} f_n(\vec{k}, \vec{r}, t)$$
$$\vec{v}_{\vec{k}n} = \frac{\partial E_{\vec{k}n}}{\partial \vec{k}}$$

Die Bewegungsgleichungen sind

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}_{\vec{k}} \qquad \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{E} + \frac{e}{c}(\vec{v} \times \vec{B})$$

Schreibt man dann die totale Zeitliche Ableitung der Verteilungsfunktion erhält man die Boltzmann-Gleichung

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Kollision}} = I[f]$$

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \left(-e\vec{E} + \frac{e}{c}(\vec{v} \times \vec{B}) \right) \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = I[f]}$$

Dabei ist $I[f]$ das Stoßintegral und beschreibt die Streuung in und aus Zuständen \vec{k} .

$$\begin{aligned} I[f] &= I_{in} + I_{out} \\ I_{in} &= \sum_{\vec{k}_1} W(\vec{k}_1, \vec{k}) f(\vec{k}_1, \vec{r}, t) \left(1 - f(\vec{k}, \vec{r}, t)\right) \\ I_{out} &= - \sum_{\vec{k}_1} W(\vec{k}, \vec{k}_1) f(\vec{k}, \vec{r}, t) \left(1 - f(\vec{k}_1, \vec{r}, t)\right) \end{aligned}$$

Dabei ist $W(\vec{k}_1, \vec{k})$ die Übergangsrate von \vec{k}_1 nach \vec{k} . Im Gleichgewicht müssen die beiden Terme gleich sein damit sich die Verteilungsfunktion Zeitlich nicht ändert $I[f] = 0$. Nehmen wir nun eine Verteilungsfunktion wie beim freien Fermi Gas an $f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f^0(\vec{k}, \vec{r}, t) = [e^{\beta(E_k - \mu)} + 1]^{-1}$ erhalten wir im Gleichgewicht das detaillierte Gleichgewicht.

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}) e^{\beta(E_k - \mu)} = W(\vec{k}, \vec{k}_1) e^{\beta(E_{k_1} - \mu)}$$

Nun entwickeln wir die Verteilungsfunktion um die Verteilungsfunktion des freien Fermi Gases f^0 .

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f^0(\vec{k}, \vec{r}, t) + \delta f(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

Elektrische Leitfähigkeit:

Wir wollen nun die elektrische Leitfähigkeit mithilfe der Boltzman gleichung berechnen. Dazu nehmen wir an dass $\vec{B} = 0$. Der Strom kann geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}, t) &= -\frac{e}{V} \sum_{\vec{k}} \vec{v}_{\vec{k}} \left(f^0(\vec{k}, \vec{r}, t) + \delta f(\vec{k}, \vec{r}, t) \right) \\ \vec{v}_{\vec{k}} &= -\vec{v}_{-\vec{k}} & E(\vec{k}) &= E(-\vec{k}) \\ \vec{j}(\vec{r}, t) &= -\frac{e}{V} \sum_{\vec{k}} \vec{v}_{\vec{k}} \delta f(\vec{k}, \vec{r}, t) \end{aligned}$$

Betrachtet man Störstellen ohne innere Freiheitsgrade (es gibt also keine gebundenen Zustände und sie können keine Energie aufnehmen) so ergibt sich $E_k = E_{k_1}$ und damit $W(k_1, k) = W(k, k_1)$. Damit vereinfacht sich das Stoßintegral zu

$$I[f] = \sum_{\vec{k}_1} W(\vec{k}_1, \vec{k}) \left(\delta f(\vec{k}_1) - \delta f(\vec{k}) \right)$$

Nehmen wir noch Strukturlose Störstellen an so Erhalten wir $W(\vec{k}_1, \vec{k}) = W_0 \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}_1})$, damit wird das Stoßintegral zu

$$I[f] = - \sum_{\vec{k}_1} W(\vec{k}, \vec{k}_1) \delta f(\vec{k}) = -\frac{1}{\tau(\vec{k})} \delta f(\vec{k})$$

τ ist die Streuzeit.

Damit ist die Boltzman gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{e}{\hbar} \vec{E} \frac{\partial f^0(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = -\frac{1}{\tau(\vec{k})} \delta f(\vec{k})$$

Wir machen den Ansatz harmonischer Zeitabhängigkeit vom Externen Feld und der Verteilungsfunktion $\vec{E}(t) = \vec{E} \cdot e^{-i\omega t}$ und $\delta f(t) = \delta f \cdot e^{-i\omega t}$, damit wir die obige Gleichung zu

$$\begin{aligned} \left(-i\omega + \frac{1}{\tau(\vec{k})} \right) \delta f(\vec{k}) &= \frac{e}{\hbar} \vec{E} \frac{\partial f^0}{\partial \vec{k}} \\ \text{NR: } \frac{\partial f^0}{\partial k_\alpha} &= \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_\alpha} = v_\alpha(\vec{k}) \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} \\ \delta f(\vec{k}) &= -\frac{e}{\hbar} \frac{\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k}}{i\omega - \frac{1}{\tau(\vec{k})}} \vec{E} \vec{v}_k \end{aligned}$$

Damit erhält man die korrektur zur Verteilungsfunktion und dann das oben in die Formel für den Strom einsetzen. Dies ist nun der Zusammenhang zwischen angelegtem elektrischem Feld und elektrischem Stromfluss. Das ganze kann tensorsriell dargestellt werden, damit erhält man die Leitfähigkeit.

$$j_\alpha = \frac{e^2}{\hbar} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \frac{V_{k\alpha} V_{k\beta}}{\tau^{-1} - i\omega} E_\beta = \sigma_{\alpha\beta} E_\beta$$

Berechnet man das integral erhält man das gleiche Ergebnis wie mit der Drude Theorie, die ja eine rein Phänomenologische Theorie war.

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma \delta_{\alpha\beta} \quad \sigma = \frac{e^2}{\hbar} \frac{\tau v_F^2}{3} \rho_0 = \frac{ne^2}{m} \tau$$

Thermische Leitfähigkeit:

Betrachten wir nun den Fall dass wir einen Temperaturgradienten an den Festkörper anlegen ($\vec{E} = \vec{B} = 0$), wir betrachten den entstehenden Wärmestrom

$$j_k^Q = \kappa_{\alpha\beta} \partial_\beta T$$

In dem Term mit der Ortsableitung fügen wir noch die Ableitung nach der Temperatur ein $\vec{v}_k \frac{\partial f}{\partial r} = \vec{v}_k \frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial r}$, damit kriegen wir die Boltzmangleichung für das Problem

$$\frac{\partial f^0}{\partial T} \vec{v}_k \nabla T = -\frac{1}{\tau_k} \delta f$$

Wir nehmen im ersten Part nur f^0 und nicht f da wir nur die linearen Terme in der Störung betrachten.

Wir gehen wieder aus von $f^0 = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/T} + 1}$ und damit $\frac{\partial f^0}{\partial T} = \left(-\frac{\epsilon_k - \mu}{T} \right) \frac{\partial f}{\partial \epsilon}$.

$$\delta f = -\tau \left(\frac{\epsilon_k - \mu}{T} \right) \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} \vec{v}_k \nabla T$$

Dann können wir das ganze einsetzen in den Zusammenhang von Wärmestrom und Verteilungsfunktion

$$j^Q = \frac{1}{V} \sum_k (\epsilon_k - \mu) \vec{v}_k f(k)$$

$$j_\alpha^Q = \tau \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{(\epsilon_k - \mu)^2}{T} \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} \right) v_\alpha v_\beta \partial_\beta T$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{\kappa_{\alpha\beta} = \kappa \cdot \delta_{\alpha\beta}}$$

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{\tau \rho V_F^2}{3} T$$

Dieses Ergebnis produziert auch das Wiedeman Franz Gesetz.

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3}{\pi^2}$$

hier haben wir nur den Elektrischen Anteil der Wärmeleitfähigkeit betrachtet, insgesamt tragen auch Phononen dazu bei also $\kappa_{tot} = \kappa_{el} + \kappa_{phon}$.

Onsager Beziehungen:

Die Onsager beziehungen setzen den Wärmestrom mit dem Elektrischen Strom in Beziehung, somit ist es möglich Peltierelemente und Thermozellen zu bauen.

$$j^E = k_{11} \cdot \vec{E} + k_{12} \cdot \frac{\nabla T}{T}$$

$$j^Q = k_{21} \cdot \vec{E} + k_{22} \cdot \frac{\nabla T}{T}$$

Dabei ist $\sigma = k_{11}$ die elektrische Leitfähigkeit und $\kappa = \frac{k_{22}}{T}$ die Wärmeleitfähigkeit. Der Peltiereffekt tritt nun auf wenn $\vec{E} \neq 0$ und $\vec{\nabla}T = 0$ dann ist

$$j^Q = \beta_E j^E$$

mit der Peltierkonstante $\beta_E = \frac{k_{21}}{k_{11}}$
Der Seebeck Effekt tritt auf bei $j^E = 0$.

$$\vec{E} = S \nabla T$$

mit $S = -\frac{k_{12}}{T k_{11}}$

5.3.1 Elektrischer Widerstand

Der elektrische Widerstand ρ und die leitfähigkeit σ hängen zusammen über:

$$\rho = \frac{1}{\sigma}$$

Bloch-Grüneisen

Die Bloch Grüneisen Formel beschreibt den Widerstand in Metallen der durch die Streuung von Elektronen mit Phononen hervorgerufen wird.

$$\rho(T) = C \frac{T^5}{\Theta_D^6} \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})}$$

Dabei ist Θ_D die Debye Temperatur. Im Limit hoher und niedriger Temperaturen ergibt sich:

$$\begin{aligned} \rho(T) &\sim T & T > \frac{\Theta_D}{2} \\ \rho(T) &\sim T^5 & T < \frac{\Theta_D}{10} \end{aligned}$$

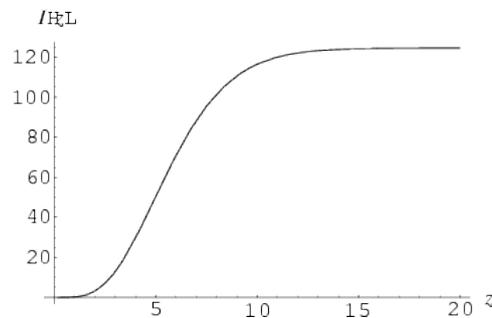


Figure 1: Verlauf des spezifischen Elektrischen Widerstands mit der Temperatur (Bloch Grüneisen)

Kondo Effekt

Sind nun noch magnetische Störstellen im Metall so tritt der Kondo effekt auf wenn die Leitungselektronen an diesen Störstellen gestreut werden, dies gibt einen Beitrag zum Widerstand. Diese Streuung unterscheidet sich von normalen Störstellen dadurch dass Spin Flip streuung auftritt die das Magnetische Moment der Elektronen und der Störstelle ändert. Für kleine Temperaturen gilt dann

$$\rho(T) = \underbrace{\rho_0}_{\text{Restwiderstand}} + \underbrace{aT^2}_{\text{Fermi Flüssigkeit}} + \underbrace{c_m \ln\left(\frac{\mu}{T}\right)}_{\text{Kondo}} + \underbrace{bT^5}_{\text{Phononen}}$$

Der Kondo effekt kann dazu führen dass bei kleinen Temperaturen der Widerstand mit sinkender Temperatur wieder steigt.

Der T^2 part kommt durch Elektron-Elektron Wechselwirkung zustande. Wir wissen aus der Fermi Flüssigkeitstheorie, dass die Lebensdauer eines Zustandes außerhalb der Fermikugel $\tau \sim \frac{1}{T^2}$ ist.

5.3.2 Wärmekapazität

Tiefe Temperaturen

$$c_V(T) = \underbrace{\gamma T}_{\text{elektronischer Anteil}} + \underbrace{\alpha T^3}_{\text{Phononischer Anteil}}$$

Der elektronische Anteil kommt aus dem freien Elektronen gas mit $\gamma = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \rho_0(E_F)$.

Der Phononische Anteil kommt aus dem Debye Model mit $\alpha = \frac{3}{2\pi^2} \left\langle \frac{1}{c_s^2} \right\rangle \frac{4k_B^4 \pi^4}{15\hbar^2}$.

Dulong-Petit Gesetz:

Für große Temperaturen wird die Wärmekapazität konstant (in der Formel die molare Wärmekapazität

$$c_{Vm} = 3k_B N_A$$

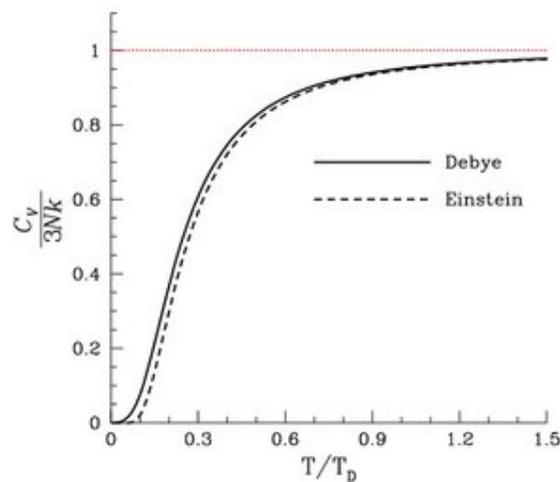


Figure 2: Verlauf der Wärmekapazität mit der Temperatur (Nur der Phononische Anteil)

5.3.3 Magnetische Suszeptibilität

Aus dem Freien Elektronengas kommt eine (außer vielleicht $\langle N \rangle$) temperaturunabhängige Suszeptibilität heraus

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = 2\mu_B^2 \langle N \rangle \rho_0(E_F)$$

Curie-Gesetz:

Bei Idealem Spin Paramagnetismus gilt das Curie gesetz der Suszeptibilität

$$\chi_m = \frac{C}{T}$$

$$C = \mu_0 n \frac{\mu^2}{3k_B}$$

C ist die Curie-Konstante und μ ist der Betrag des permanenten magnetischen Dipolmoments.

Curie-Weiß-Gesetz:

Dieses beschreibt die Suszeptibilität eines Ferromagneten oberhalb der Curie Temperatur.

$$\chi = \frac{C}{T - T_C}$$

Hier ist T_C die Curie Temperatur und C die Curie Weiß Konstante

Supraleiter:

Supraleiter sind Perfekte Diamagneten mit der Suszeptibilität -1 (oder -4π)

5.4 Lineare Response

Beschreibt wie die Boltzmann Gleichung auch den Transport in Festkörpern.

$$H(t) = H_0 + H_1(t) = H_0 - A \cdot F(t)$$

Dabei wird der Gleichgewichtshamiltonian H_0 von der zeitabhängigen Störung $H_1(t)$ gestört. Dabei ist A ein Operator und F(t) eine zeitabhängige Funktion. Bei $t = -\infty$ ist das System in Gleichgewicht ($H_1 = 0$) und die Dichte und deren Bewegungsgleichung sind gegeben durch

$$\rho(t = -\infty) = \rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H_0}$$

$$i\hbar \dot{\rho}(t) = [H(t), \rho(t)]$$

Der Erwartungswert eines Operators B ist gegeben durch

$$\langle B \rangle(t) = \langle B \rangle_{\rho(t)} = Sp(B\rho(t))$$

Wir gehen ins Wechselwirkungsbild in dem Operatoren so definiert sind

$$O_W(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} O e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$$

Der Erwartungswert von B geht immernoch genauso aber wir erhalten unterschiedliche Bewegungsgleichungen

$$\langle B \rangle(t) = Sp(B_W(t)\rho_W(t))$$

$$\frac{d}{dt}\rho_W(t) = \frac{i}{\hbar}[A_W(t), \rho_W(t)]F(t)$$

$$\underline{\rho_W(t)} = \rho_0 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [A_W(t'), \underline{\rho_W(t')}]F(t')$$

Jetzt haben wir das ρ_W auf beiden Seiten der Gleichung und wir lösen das wieder Iterativ. Da wir hier die lineare response betrachten entwickeln wir nur bis zu ersten Ordnung

$$\rho_W(t) = \rho_0 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [A_W(t'), \rho_0] F(t')$$

Und erhalten damit für den erwartungswert des Operators B für den Vollen Hamiltonian

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_{\rho(t)} - \langle B \rangle_{\rho_0} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \chi_{BA}(t, t') \\ \chi_{BA}(t, t') &= \frac{i}{\hbar} \langle [B_W(t), A_W(t')] \rangle_{\rho_0} \Theta(t - t') \end{aligned}$$

Mit χ der allgemeinen retardierten Suszeptibilität oder Responsefunktion.

Setzt man für die Störung eine harmonische Zeitabhängigkeit an $F(t) = F_0 \exp(-i(\omega + i\delta)t)$, mit dem adiabatischen Einschaltterm $i\delta$ der sicherstellt dass die Störung bei $-\infty$ verschwindet.

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_{\rho(t)} - \langle B \rangle_{\rho_0} &= \chi_{BA}(\omega - i0) F_0 e^{-i(\omega + i\delta)t} \\ \chi_{BA}(t, t') &= \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt \langle [B_W(t), A] \rangle_{\rho_0} e^{i(\omega + i\delta)t} \end{aligned}$$

Der Imaginärteil der Suszeptibilität ist der absorptive Teil.

Der Realteil der Suszeptibilität ist der Reaktive Teil.

Diese sind durch Kramers Kronig Relationen verknüpft:

Kramers-Kronig:

Die retardierte Suszeptibilität oder response beschreibt den Operator B wenn H linear in A gestört ist. Kramers-Kronig Relationen stellen einen Zusammenhang zwischen dem Real und dem Imaginärteil einer Funktion her, bsp die Suszeptibilität

$$\begin{aligned} \chi_{BA}(\omega + i0) &= \chi'_{BA}(\omega) + i\chi''_{BA}(\omega) \\ \chi'_{BA}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{\chi''_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega} \\ \chi''_{BA}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{\chi'_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega} \\ \mathcal{P} \int d\omega' f(\omega') &= \int_{-\infty}^{\omega-0} d\omega' f(\omega') + \int_{\omega+0}^{+\infty} d\omega' \end{aligned}$$

6 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

6.1 Cooper-Instabilität

Die Cooper Instabilität beschreibt das Gedankenexperiment wenn zwei Elektronen in ein System mit gefülltem Fermisee gebracht werden. Nur zwischen diesen beiden Elektronen

existiert ein anziehendes Potential welches über Phononen vermittelt wird. Die beiden Teilchen an den orten $r_{1/2}$ werden beschrieben durch den Hamiltonian

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_2}^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Das System sieht ja recht Wasserstoff mäßig aus, nur dass die beiden Teilchen eben die gleichen Massen haben, analog dazu führt man nun Relativkoordinaten ein

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 & \vec{R} &= \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) & m^* &= 2m & \mu &= \frac{m}{2} \\ \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \psi(\vec{r}) \exp(i\vec{K}\vec{R}) \end{aligned}$$

Damit vereinfacht sich nach substitution von $\tilde{E} = E + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}$ die Schrödingergleichung zu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = \tilde{E} \psi(\vec{r})$$

und ist damit nurnoch abhängig von der relativkoordinate \vec{r} zwischen den Elektronen und nicht mehr von der Schwerpunktskoordinate. Um nun die kleinstmögliche Energie zu betrachten um einen evtl gebundenen Zustand zu finden wählen wir den kleinsten Wert $\tilde{E} = E$ dies ist der Fall falls $\vec{K} = 0$. Dabei ist der Impulsübertrag zwischen den Elektronen gleich Null und die Elektronen bewegen sich in entgegengesetzte Richtungen $\vec{k}_1 = -\vec{k}_2$.

Nun wird eine Fouriertransformation auf die Schrödingergleichung angewandt, dabei vereinfacht sich die Ableitung und die multiplikation mit dem Potential wird zu einer Faltung

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} V(\vec{k} - \vec{k}') \psi(\vec{k}) = (E - 2\epsilon_{\vec{k}}) \psi(\vec{k})$$

mit $\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$.

Nun substituieren wir noch $\Delta(\vec{k}) = (E - \epsilon_{\vec{k}}) \psi(\vec{k})$ und erhalten die Schrödingergleichung für diese Deltas

$$\Delta(\vec{k}) = - \int \frac{d^d k'}{(2\pi)^d} \frac{V(\vec{k} - \vec{k}')}{2\epsilon_{\vec{k}} - E} \Delta(\vec{k}')$$

Nun müssen wir eine Annahme für das Potential machen, es soll anziehend sein und von Phononen vermittelt werden. Phononen gibt es nur bis zu einer typischen Energie ω_D der Debye Frequenz. Der einfachheit halber wird das Potential als konstant bis zu diesem Wert angenommen

$$V(\vec{k} - \vec{k}') = \begin{cases} V_0 & \text{für } \epsilon_{\vec{k}/\vec{k}'} < \omega_D \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Nun ersetzen wir die Integration über \vec{k} durch eine Integration über ϵ .

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \rightarrow \int d\epsilon \rho(\epsilon) \approx \rho(\epsilon_F) \int d\epsilon$$

Die Zustandsdichte ρ wird als konstant angenommen da wir uns ja an der Fermikante befinden, dadurch vereinfacht sich das Integral.

Es wird Singulett Paarung der Elektronen angenommen (antiparallel S=0) (WARUM WIRD DAS ANGENOMMEN??). Die Gesamtwellenfunktion muss antisymmetrisch sein da wir Fermionen betrachten, wenn nun der Spin Anteil antisymmetrisch ist muss der Ortsanteil symmetrisch sein. Daher gilt $\Delta(-k) = \Delta(k) = \Delta$ und das Δ kann als konstant angenommen werden und aus dem Integral gezogen werden.

$$\Delta = \Delta V_0 \rho_F \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \omega_D} \frac{d\epsilon'}{2\epsilon' - E} = \frac{\Delta V_0 \rho_F}{2} \log \left(\frac{2\epsilon_F - E}{2(\epsilon_F + \omega_D) - E} \right)$$

Die Integrationsgrenzen sind um die Fermikante mit der ausdehnung ω_D der Debye Frequenz da ja nur Elektronen an der Fermifläche an der WW teilnehmen können und die WW durch Phononen (mit Energie bis ω_D) bewirkt wird.

Mit $\lambda = \rho_F V_0$ ergibt sich für die Energie

$$E = 2\epsilon_F \underbrace{-2\omega_D e^{-\frac{2}{\lambda}}}_{\epsilon_B \text{ Energie unterhalb des Fermi Niveaus}}$$

$$\epsilon_B = 2\omega_D e^{-\frac{2}{\lambda}}$$

Und man erhält damit einen gebundenen Zustand mit der Energie unterhalb des Fermi Niveaus, auch bei infinitesimaler anziehender WW. Hier haben wir ja nur zwei Elektronen mit anziehender WW betrachtet, in realität wechselwirken ja alle Elektronen und daher wird die Fermi kugel Instabil da immer mehr Paare einen zustand kleinerer Energie annehmen können. Das ist die Cooper instabilität.

Geht man nun davon aus keinen Fermi See mehr zu haben ($\epsilon_F \rightarrow 0$) kann man nicht mehr von einer konstanten Zustandsdichte ausgehen

$$\rho(\epsilon) = A\sqrt{\epsilon}$$

$$\Delta = \Delta V_0 A \int_0^{\omega_D} \frac{\sqrt{\epsilon}}{2\epsilon + \epsilon_B} d\epsilon$$

Jetzt führt ein infinitesimales Potential nicht mehr zu einer Bindung, sondern man braucht ein mindestens so starkes Potential wie

$$V_0^c = \frac{1}{A\sqrt{\omega_D}}$$

6.2 BCS Theorie

Der BCS Hamiltonian

$$H = \underbrace{\sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}}_{\text{Freie Elektronen}} - V \underbrace{\sum_{\vec{k}\vec{k}'} c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}}_{\text{Attraktive El.-El.-Wechselwirkung}}$$

Nur elektronen mit $|\epsilon_{\vec{k}}| < \hbar\omega_D$ spüren die attraktive Wechselwirkung, da diese durch Phononen ermöglicht wird und näherungsweise nur Phononenenergien bis $\hbar\omega_D$ auftreten. Nun machen wir eine Hartree-Fock-Approximation des Wechselwirkungsterms (mean field approximation). An jetzt lasse ich die Vektorpfeile über k weg, sind aber immernoch Vektoren!

$$H \rightarrow H_{eff} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - V \sum_{kk'} \left[\langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger \rangle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger - \langle c_{-k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger \rangle \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle \right]$$

$$H_{eff} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \Delta^* \sum_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \Delta \sum_{k'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger + \frac{|\Delta|^2}{V}$$

$$\Delta = V \sum_k \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle \quad \Delta^* = V \sum_k \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger \rangle$$

H_{eff} vertauscht nicht mit $n = c^\dagger c$, was bedeutet dass die Teilchenzahl nicht erhalten ist. Man definiert sich nun die Nambu Spinoren

$$c_k = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad c_k^\dagger = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^\dagger \\ c_{-k\downarrow} \end{pmatrix}$$

Und drückt den Hamilton in der Matrixdarstellung aus

$$H = \sum_k c_k^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_k & -\Delta_k^* \\ -\Delta_k & -\epsilon_k \end{pmatrix} c_k + \frac{|\Delta|^2}{V} N + \sum_k \epsilon_k$$

Unser Ziel ist ja auf einen Effektiven Einteilchenhamilton zu kommen daher Diagonalisieren wir die Matrix und erhalten die Eigenwerte mit zugehörigen Eigenvektoren

$$E_+ = \sqrt{\epsilon_k^2 + |\Delta_k|^2} \rightarrow \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$$

$$E_- = -\sqrt{\epsilon_k^2 + |\Delta_k|^2} \rightarrow \begin{pmatrix} -v_k^* \\ u_k^* \end{pmatrix}$$

Nun machen wir eine Operatortransformation der Basis von c nach a : $a_k = U_k^{-1} c_k$, in dieser Basis ist der Hamilton dann Diagonal. Wir wollen den Hamilton jetzt auf einen effektiven Einteilchen Hamilton bringen und erhalten die Bogoliubov Transformation

$$a_k = U_k^{-1} c_k = \begin{pmatrix} u_k^* & v_k^* \\ -v_k & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

$$a_{k\uparrow} = u_k^* c_{k\uparrow} + v_k^* c_{-k\downarrow}^\dagger$$

$$a_{-k\downarrow}^\dagger = -v_k c_{k\uparrow} + u_k c_{-k\downarrow}^\dagger$$

Diese Operationen erfüllen die Antikommutatorrelationen

$$[a_{k\uparrow}, a_{k'\downarrow}]_+ = [a_{k\uparrow}^\dagger, a_{k'\downarrow}^\dagger]_+ = [a_{k\uparrow}, a_{k'\downarrow}^\dagger]_+ = 0$$

$$[a_{k\uparrow}, a_{k'\uparrow}^\dagger]_+ = [a_{k\downarrow}, a_{k'\downarrow}^\dagger]_+ = (|u_k|^2 + |v_k|^2) \delta_{kk'}$$

Damit handelt es sich bei den Bogoliubov Operatoren um fermionische Quasiteilchen, falls $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$.

Aus der Eigenwertgleichung für die Vektoren erhalten wir die Bedingung

$$\begin{pmatrix} \epsilon_k & -\Delta_k^* \\ -\Delta_k & -\epsilon_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$$

$$u_k v_k^* = -\frac{\Delta_k}{\epsilon_k}$$

Damit wird der Hamilton nun diagonal in dem neuen Besetzungszahloperator

$$H_{eff} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \sum_k (\epsilon_k - E_k) + \frac{|\Delta|^2}{V}$$

Aber wie wir oben definiert haben ist in dem Δ ein $\langle \rangle$ Erwartungswert bezüglich den Eigenzuständen von H_{eff} drinnen. Dies führt auf ein Selbstkonsistenzproblem wie auch schon bei der Cooper Instabilität.

Jetzt schauen wir uns das Δ das wir vorher bei der Hartree Fock Näherung eingeführt haben noch einmal an und schreiben es in den neuen Variablen

$$\Delta = -V \sum_k \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle$$

$$= -V \sum_k \langle (v_k^* a_{k\uparrow}^\dagger + u_k^* a_{-k\downarrow}) (u_k a_{k\uparrow} - v_k^* a_{-k\downarrow}^\dagger) \rangle_{H_{eff}}$$

$$= -V \sum_k (v_k^* u_k \underbrace{\langle a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} \rangle}_{\text{Fermiverteilung } f(k)} - u_k^* v_k^* \underbrace{\langle a_{-k\downarrow} a_{-k\downarrow}^\dagger \rangle}_{1-f(k)})$$

$$= V \sum_k \frac{\Delta}{\sqrt{\epsilon_k^2 - |\Delta|^2}} \underbrace{\left[2f \left(\sqrt{\epsilon_k^2 - |\Delta|^2} \right) - 1 \right]}_{\tanh \left(\frac{\beta \sqrt{\epsilon_k^2 - |\Delta|^2}}{2} \right)}$$

Die Triviale Lösung $\Delta = 0$ betrachten wir nicht da sie den normalleitenden Zustand beschreibt. so erhalten wir eine nichttriviale Lösung mittels der **BCS-Selbstkonsistenzgleichung**:

$$1 = \frac{V}{2} \sum_k \frac{1}{\sqrt{\epsilon_k^2 + |\Delta|^2}} \tanh \left(\frac{\beta \sqrt{\epsilon_k^2 + |\Delta|^2}}{2} \right)$$

Ersetze die Summe über die K zustände durch ein Integral über die energie $\sum_k \rightarrow \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\epsilon \rho_0(\epsilon)$.
Für $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) geht $\tanh(\beta \dots) \rightarrow 1$, in diesem Limes vereinfacht sich die Selbstkonsistenzgleichung zu

$$1 = V \rho_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta_0^2}} = V \rho_0 \operatorname{arcsinh} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right)$$

$$\Delta(T=0) = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh \left(\frac{1}{V\rho_0} \right)} \approx 2\hbar\omega_D \exp \left(-\frac{1}{V\rho_0} \right)$$

Dies ist nun die Bedingung für Supraleitung, beim Vorliegen von Supraleitung ergibt sich eine Bandlücke in Energie Spektrum von 2Δ .

Die kritische Temperatur für die es gerade noch eine nichttriviale Lösung für Δ gibt ist die Sprungtemperatur T_c

$$k_B T_c = 1,136 \hbar\omega_D \exp \left(-\frac{1}{V\rho_0} \right)$$

Isotopen Effekt:

Die Sprungtemperaturen isotonenreiner Supraleiter unterscheidet sich je nach Isotop, trotz dem gleichen Element. Dies ist ein Hinweis darauf dass Supraleitung durch Phononen erzeugt wird.

6.2.1 BCS Wellenfunktion

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_k \left(\Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow} + h.c. \right) + N \frac{\Delta^2}{V_0}$$

Bogoliubov-Transformation

$$\begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} a_{k\uparrow} \\ a_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & -v_k \\ v_k^* & u_k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

$$H = \sum_{k\sigma} E_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + E_{GZ} \qquad E_{GZ} = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}$$

$$\Delta_k = -\frac{V}{N} \sum_{k'} \gamma_{kk'} \langle c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \rangle$$

Der BCS Grundzustand ist $|\Phi_{BCS}\rangle$ mit der Eigenschaft

$$a_{k\sigma}|\Phi_{BCS}\rangle = 0 \quad \forall k, \sigma$$

Im Grundzustand sind also keine Bogoliubov Quasiteilchen vorhanden.
Ansatz

$$|\Phi_{BCS}\rangle = C \exp\left(\sum_k \Phi_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle$$

Es werden also Elektronpaare aus dem Leeren Zustand erzeugt. Aus Bogoliubov folgt

$$u_k c_{k\uparrow} |\Phi_{BCS}\rangle = v_k c_{-k\downarrow}^\dagger |\Phi_{BCS}\rangle$$

$$\Phi_k = \frac{v_k}{u_k}$$

Damit ist die BCS Wellenfunktion

$$|\Phi_{BCS}\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle$$

Tief in der Fermikugel ist $u_k = 0$ und $v_k \neq 0$, es werden also die Zustände aufgefüllt. Oberhalb des Fermineveaus ist $v_k = 0$ und es werden keine Paare erzeugt. $|\Phi_{BCS}\rangle$ hat keine fixe Teilchenzahl

$$|\Phi_{BCS}\rangle = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_k \frac{v_k}{u_k} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \right)^n |0\rangle$$

mit n der Anzahl der Cooper paare.

Deshalb führen wir nun eine neue Wellenfunktion mit einer definierten Teilchenzahl (N Anzahl der Elektronen) ein

$$|\Phi_{BCS}(N)\rangle = \tilde{C} \left(\sum_k \frac{v_k}{u_k} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \right)^{\frac{N}{2}} |0\rangle$$

$$u_k v_k^* = \frac{\Delta_k}{2E_k}$$

Bisher haben wir immer nur den Betrag $|\Delta_k|$ betrachtet, aber es kann auch eine Phase haben. $\Delta_k = |\Delta_k| e^{i\varphi}$ wir nehmen an u_k ist reell und $v_k = |v_k| e^{-i\varphi}$. Angenommen φ hängt nicht von k ab

$$|\Phi_{BCS}(N)\rangle = \tilde{C} e^{i\frac{N}{2}\varphi} \left(\sum_k \frac{v_k}{u_k} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \right)^{\frac{N}{2}} |0\rangle$$

$$i \frac{\partial}{\partial \varphi} |\Phi_{BCS}(N)\rangle = \frac{N}{2} |\Phi_{BCS}(N)\rangle$$

$$\hat{N} = 2 \underbrace{i \frac{\partial}{\partial \varphi}}_{\text{Zahl der Cooperpaare}}$$

Damit haben wir den Teilchenzahloperator gefunden.

φ ist an sich kein gültiger Operator sondern nur $e^{i\varphi}$, da physikalisch nur eine relative Phase Sinn macht.

6.2.2 London Gleichung

Die London Gleichungen sind das 'ohmsche Gesetz' bei Supraleitern, da Supraleiter ja keinen Widerstand an sich haben ist der Stromfluss und die angelegten Felder (bzw das Vektorpotential) gekoppelt über die London Gleichungen.

$$\begin{aligned} \vec{j} &= -\frac{n_s e^3}{m} \vec{A} & \vec{B} &= \nabla \times \vec{A} \\ \frac{\partial \vec{j}}{\partial t} &= \frac{n_s e^2}{m} \vec{E} & \nabla \times \vec{j} &= -\frac{n_s e^2}{m} \vec{B} \end{aligned}$$

Die erste Gleichung ist die London Gleichung, die unteren zwei nur zwei alternative Formulierungen der oberen Gleichung.

Man erhält aus diesen Gleichungen mit $\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j}$ die Londonsche Eindringtiefe von Feldern in Supraleiter und damit auch den Meißner Ochsensfeld Effekt

$$\begin{aligned} \nabla^2 \vec{B} &= \frac{1}{\lambda^2} \vec{B} & \lambda &\equiv \sqrt{\frac{m}{\mu_0 n_s e^2}} \\ \rightarrow B(x) &= B_0 \cdot e^{-x/\lambda} \end{aligned}$$

Herleitung aus der BCS Theorie:

Betrachte einen BCS Zustand beim Anschalten eines schwachen Vektorpotentials \vec{A}
Das System ist im Grundzustand, damit ist der Korrekturterm in 1. Ordnung Störungsrechnung

$$|\Phi_1\rangle = \sum_{l \neq 0} |l\rangle \frac{\langle l | H_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_l}$$

Bei der kanonischen ersetzung vom Impuls (das Vektorpotential kommt mit rein)

$$H_{kin} = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m}$$

In 2. Quantisierung

$$\begin{aligned} H_{kin} &= \sum_{\sigma} \int d^3r \Psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} \Psi_{\sigma}(r) \\ &= \underbrace{\sum_{\sigma} \int d^3r \Psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \frac{\vec{p}^2}{2m} \Psi_{\sigma}(r)}_{H_{0kin}} - \underbrace{\sum_{\sigma} \int d^3r \Psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \frac{e \vec{A} \vec{p}}{cm} \Psi_{\sigma}(r)}_{H_1} + \mathcal{O}(\vec{A}^2) \end{aligned}$$

$\vec{p} = -i\hbar\nabla$ daher ist die Reihenfolge von \vec{p} und \vec{A} egal da $\nabla\vec{A} = 0$.
Stromgeschwindigkeit

$$\vec{v} = \frac{\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}}{m}$$

Stromdichte

$$\begin{aligned} \vec{j} &= e \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \frac{\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}}{m} \Psi_{\sigma}(r) \\ &= \underbrace{\sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \frac{\vec{p}}{m} \Psi_{\sigma}(r)}_{\vec{j}_p} - \underbrace{\frac{e^2}{cm} \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \Psi_{\sigma}(r)}_{\vec{j}_d} \vec{A} \end{aligned}$$

Nun wird die Stromdichte in einen paramagnetischen (\vec{j}_p) und einen diamagnetischen (\vec{j}_d) Teil aufteilen. Betrachtet man nur den diamagnetischen Teil so hat man schon die London Gleichung

$$\vec{j}_d = -\frac{e^2 n}{cm} \vec{A}$$

Um nun zu schauen ob \vec{j}_p einen Einfluss hat auf die Stromdichte, müssen wir schauen ob \vec{j}_p einen Term linear in \vec{A} hat. Dazu betrachten wir den Erwartungswert

$$\langle \vec{j}_p \rangle = \langle \Phi_1 | \vec{j}_p | 0 \rangle + \langle 0 | \vec{j}_p | \Phi_1 \rangle$$

Setzen wir nun eine Fourier reihe für die Zustände Ψ an so erhalten wir

$$\begin{aligned} \Psi_{\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_k c_k e^{ikr} \\ H_1 &= -\frac{\hbar e}{mc} \sum_{kq\sigma} c_{k+q\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \vec{k} \cdot \vec{A}_q \end{aligned}$$

Daraus lesen wir irgendwie dass die $|\Phi_1\rangle = 0$ sind in erster Ordnung? Keine Ahnung

$$\langle \vec{j}_p \rangle = 0$$

References

- [1] Skript Prof. Jörg Schmalian 2011
- [2] Vorlesungsmitschrieb von TKM1 bei Prof. Jörg Schmalian 2012, Iris Conradi
- [3] Wikipedia =)
- [4] Czocholl Theoretische Festkörperphysik