

Theorie der kondensierten Materie I

0. Einleitung;

Separation von Ionen- und Elektronen-Dynamik in einem Festkörper

1. Kristallgitter;

Elektronen in einem periodischen Potential (Bloch-Theorem), Dynamik von Bloch-Elektronen

2. Elektronische Transporteigenschaften von Festkörpern, Boltzmann-Gleichung

3. Festkörper im äußeren Magnetfeld:

Pauli-Paramagnetismus, Landau-Diamagnetismus, de Haas-van Alphen-Effekt

4. Elektron-Elektron-Wechselwirkung:

Hartree-Fock-Näherung, Stoner-Theorie des Ferromagnetismus, Abschirmung, Plasma-Oszillationen, Landau-Theorie der Fermi-Flüssigkeit

5. Gitterschwingungen = Phononen

6. Elektron-Phonon-Wechselwirkung

7. Supraleitung: BCS-Theorie, Elektrodynamik von Supraleitern, Ginzburg-Landau-Theorie

Literatur

- ① G. Czocholl, Theoretische Festkörperphysik
 2. C. Kittel, Quantum Theory of Solids
 3. N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid State Physics
 4. Ziman, Principles of the Theory of Solids
 5. A.A. Abrikosov, Fundamentals of the Theory of Metals
-

Supraleitung:

6. J.C. Schrieffer, Theory of Superconductivity
Chapters 1-4
7. M. Tinkham, Introduction to Superconductivity

0. Einführung

0.1. Physik der kondensierten Materie:

- * Festkörper und Flüssigkeiten
- * sehr viele ($\sim 10^{23}$) Atome $\rightarrow$ Methoden der statistischen Physik
- * Wir werden in dieser Vorlesung kristallinen Festkörpern besondere Aufmerksamkeit schenken:
 - Dynamik von Elektronen
 - Gitterschwingungen usw.

$\rightarrow$ Quantenmechanische Beschreibung

[Es gibt auch "soft" ($\hbar=0$) condensed matter" — ^{klassische} statistische Physik von Polymeren, Biomolekülen, Hydrodynamik usw.]

- * "Theory of everything": Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi$$

für die Wellenfunktion von N_e Elektronen und N_i Kerne

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_e}; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i}) \equiv \Psi(\{\mathbf{r}_j\}, \{\mathbf{R}_k\})$$

$$H = T_e + T_i + V_{ee} + V_{ii} + V_{ei}$$

$$T_e = - \sum_{j=1}^{N_e} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_j}^2, \quad T_i = - \sum_{k=1}^{N_i} \frac{\hbar^2}{2M_k} \nabla_{\mathbf{R}_k}^2$$

- 4 -

$$V_{ee} = \sum_{j,j'=1}^{N_e} \frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}|} \quad , \quad V_{ii} = \sum_{k,k'=1}^{N_i} \frac{e^2 Z_k Z_{k'}}{|\vec{R}_k - \vec{R}_{k'}|}$$

$$V_{ei} = \sum_{j=1}^{N_e} \sum_{k=1}^{N_i} \frac{-e^2 Z_k}{|\vec{r}_j - \vec{R}_k|}$$

Ladungen: Elektron: $-e$ Kerne: $Z_k e$

$\hat{H}$ bekannt aber extrem kompliziertes Problem ($\sim 10^{23}$ Teilchen)
 → Theoretische Konzepte, Modelle, Näherungen (Hierarchie von Zeit- und Längenskalen) nötig! Vielfalt von Phänomenen

* Man kann anstatt Kerne hier über Ionen (Kern + innere Schalen) denken.

* Hier fehlen noch Spin und Spin-Bahn-Kopplung (relativistischer Effekt)

→ entsprechende Verallgemeinerung

* Natürliche Einheiten:

Länge: $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.5 \text{ \AA} = 0.5 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ (Bohrscher Radius)

Energie: $E_0 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_0} \equiv 1 \text{ Ry} \approx 0.2 \cdot 10^{-10} \text{ erg} = 13.6 \text{ eV}$

Reskalieren $\frac{\vec{r}}{a_0} \rightarrow \vec{r}$, $\frac{\vec{R}_k}{a_0} \rightarrow \vec{R}_k \Rightarrow$ (Rydberg)

$$\frac{H}{2E_0} = -\frac{1}{2} \sum \nabla_{\vec{r}_j}^2 - \frac{1}{2} \sum \frac{m}{M_k} \nabla_{\vec{R}_k}^2 + \sum \frac{1}{|\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}|} + \sum \frac{Z_k Z_{k'}}{|\vec{R}_k - \vec{R}_{k'}|} - \sum \frac{Z_k}{|\vec{r}_j - \vec{R}_k|}$$

$\Rightarrow \frac{m}{M_k} \approx 10^{-4} \div 10^{-5}$ — kleiner Parameter

0.2. Adiabatische Näherung (Born-Oppenheimer-Näherung)

$$H = H_e + V_{ii}(\{R_e\}) + T_i$$

$$H_e = T_e + V_{ee}(\{r\}) + V_{ei}(\{r\}, \{R_e\})$$

$$H_e \psi_\alpha(\{r\}; \{R_e\}) = E_\alpha(\{R_e\}) \psi_\alpha(\{r\}, \{R_e\})$$

rein elektronische Schrödinger-Gleichung

$\{R_e\}$ - Parameter

Für jedes $\{R_e\}$ bilden ψ_α ein vollständiges System $\rightarrow$

die gesuchte Lösung $\Psi(\{r\}, \{R_e\})$ der Schr.-Gl. $H\Psi = E\Psi$ kann für jedes $\{R_e\}$ entwickelt werden:

$$\Psi(\{r\}, \{R_e\}) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(\{R_e\}) \psi_{\alpha}(\{r\}, \{R_e\})$$

$\uparrow$ Koeffiziente

Einsetzen in $H\Psi = E\Psi \rightarrow$

$$0 = (H - E)\Psi = \sum_{\alpha} (H_e + V_{ii}(\{R_e\}) + T_i - E) \phi_{\alpha}(\{R_e\}) \psi_{\alpha}(\{r\}, \{R_e\})$$

$$= \sum_{\alpha} [\epsilon_{\alpha}(\{R_e\}) + V_{ii}(\{R_e\}) + T_i - E] \phi_{\alpha}(\{R_e\}) \psi_{\alpha}(\{r\}, \{R_e\})$$

Multiplizieren von links mit $\psi_{\beta}^*(\{r\}, \{R_e\})$; $\int \Pi d\tau \rightarrow$

$$[T_i + \epsilon_{\beta}(\{R_e\}) + V_{ii}(\{R_e\})] \phi_{\beta}(\{R_e\}) + \sum_{\alpha} A_{\beta, \alpha}(\{R_e\}) \phi_{\alpha}(\{R_e\}) = E \phi_{\beta}(\{R_e\})$$

$$A_{\beta\alpha}(\{R_k\}) = - \sum_k \frac{\hbar^2}{2M_k} \int d\tau \Psi_{\beta}^*(\tau, R) \left[\nabla_{R_k}^2 \Psi_{\alpha}(\tau, R) + 2 (\nabla_{R_k} \Psi_{\alpha}(\tau, R)) \nabla_{R_k} \right]$$

$\tau \equiv \{\tau_j\}, R \equiv \{R_k\}$

Nehmen wir an (Beweis unten), dass $A_{\beta\alpha}$ vernachlässigt werden können $\rightarrow$

$$\left[T_i + E_{\beta}(R) + V_{ii}(R) \right] \Phi_{\beta}(R) = E \Phi_{\beta}(R)$$

— Schrödinger - Gleichung für $\Phi_{\beta}(R)$!
 Verschiedene Φ_{β} entkoppelt $\rightarrow$ die volle Wellenfunktion sind $\Psi = \Phi_{\alpha}(R) \Psi_{\alpha}(\tau, R)$ (keine Gemmierung mehr)

Das ist die adiabatische (Born-Oppenheimer) Näherung: elektronische und ionische

Dynamik separiert:

① Elektronen - Schr. - Gl. $H_e \Psi(\tau, R) = E \Psi(\tau, R)$

für vorgegebene $R \rightarrow$ elektronische Wellenfunktionen Ψ_{α} ; Energien E_{α}

Elektronen folgen adiabatisch die Ionen

② Für jede α die Ionen - Schr. - Gl.

$$\left[T_i + E_{\alpha}(R) + V_{ii}(R) \right] \Phi_{\alpha}(R) = E \Phi_{\alpha}(R)$$

Grund: Separation von Zeit - Skalen:

Elektronen bewegen sich viel schneller als Ionen $\rightarrow$ sehen das Potential von Ionen als statisch (fast)

Beweis: Abschätzung von Beiträgen in der Schr. - Gl.:

* elektronische Energie (pro Teilchen)

$$\frac{E_e}{N_e} \sim E_{el} \sim \frac{p_i^2}{2m} \sim E_0$$

* ionische kinetische Energie

$$E_i \sim \frac{\hbar^2}{2M} \langle \Phi_\alpha | \nabla_R^2 | \Phi_\alpha \rangle \sim \frac{P^2}{2M}$$

• Abschätzung von E_i, P : harmonischer Oszillator mit Masse M und Federkonstante $K \sim \frac{E_0}{a_0^2}$

$$\Rightarrow \text{Grundzustandsenergie} \left[\begin{array}{l} E_i \sim \sqrt{\frac{K}{M}} \hbar \sim E_0 \sqrt{\frac{m}{M}} \\ \sim \frac{E_0^2 m}{\hbar^2} \end{array} \right]$$

$$\Rightarrow \text{Impuls } P \sim \sqrt{M E_i} \sim \left(\frac{M}{m} \right)^{1/4} P$$

$\begin{array}{l} \uparrow \\ \sim \sqrt{m E_0} \\ \sim \hbar / a_0 \end{array}$

$$E_i \sim \left(\frac{m}{M} \right)^{1/2} E_0$$

berücksichtigt in der Born-Oppenheimer-Näherung

• Abschätzung von A_{p2} :

Abhängigkeit der Wellenfunktion $\Psi_\alpha(r, R)$ von R wegen der W_n , die von $|r_j - R|$ abhängt

$$\Rightarrow \hbar \nabla_R \Psi_\alpha(r, R) \sim \hbar \nabla_{r_j} \Psi_\alpha(r, R) \sim p_j \Psi_\alpha(r, R)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2M_k} \int d\tau \psi_\beta^*(\tau, R) \nabla_R^2 \psi_\alpha(\tau, R) \sim \frac{P^2}{2M} \sim \frac{m}{M} E_0$$

$$\frac{\hbar^2}{2M_k} \int d\tau \psi_\beta^*(\tau, R) [\nabla_R \psi_\alpha(\tau, R)] \nabla_R \sim \frac{P P}{M} \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{3/4} E_0$$

Die Terme in $A_{\beta\alpha}$ sind also noch kleiner als $E_i \rightarrow$ die Näherung ist gerechtfertigt.

Entsprechend der B.-O.-Näherung können wir die Dynamik von Elektronen und Ionen zunächst separat betrachten. Wir machen das in nächsten Kapiteln. Am Ende der Vorlesung: E-ph-Wechselwirkung

1. Elektronen in Kristallgittern

1.1. Kristallgitter

Schr.-Gl. für Ionen:

$$[T_i + E_\alpha(R) + V_{ii}(R)] \Phi_\alpha(R) = E \Phi_\alpha(R) \quad R \equiv \{R_k\}$$

Für die Mehrheit der Materialien hat der Grundzustand die Kristall-Struktur (periodische Anordnung von Ionen)

[Ausnahmen: He, ...]

Fluktuationen von Ionen sind viel kleiner als der Abstand [Faktor $(m/M)^{1/4}$]

$\Rightarrow$ in der führenden Ordnung kann man annehmen, dass die Ionen eine exakt periodische Anordnung haben und die Dynamik von Ionen vernachlässigen

$\rightarrow$ Problem von Elektronen in einem statischen periodischen Potential: $\text{He} \psi(\{\mathbf{r}_j\}) = E \psi(\{\mathbf{r}_j\})$

$$\text{He} = - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \nabla_j^2 + \sum_j U(\mathbf{r}_j) + \sum_{j < j'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}|}$$

E-E-Wechselwirkung: wird zunächst vernachlässigt. Dafür gibt es keinen naheliegenden Grund: die ist von gleicher Grossenordnung als die andere Terme! Später werden wir sehen, dass ein wechselwirkendes System im wesentlichen auf ein nicht-wechselwirkendes mit renormierten Parametern abgebildet werden kann.

Das Potential $U(\mathbf{r})$ hat die Periodizität und die Symmetrie des Gitters.

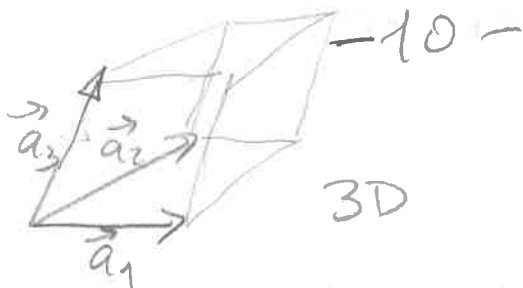
Periodische Struktur: $\Phi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r} + \vec{R}_n)$
 $\vec{R}_n$ - lineare Kombinationen von d (d.h., 3 in 3D)

unabhängigen Gittervektoren:

$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad \{\vec{R}_n\} = \underline{\text{Bravais-Gitter}}$$

$n_i \in \mathbb{Z}$

Primitive Einheitszelle: die kleinste Einheitszelle, deren periodische Wiederholung den Raum ausfüllt

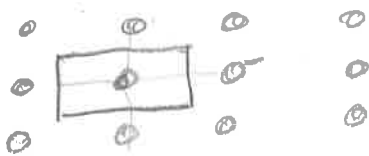


Eine mögliche Wahl der primitiven Einheitszelle - Parallelepiped $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$

Das Volumen $V_{ez} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ in 3D

$|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$ in 2D

Wigner-Seitz-Zelle: Menge aller Punkte $\vec{r}$, deren Abstand zu einem gegebenen Punkt des Bravais-Gitters kleiner ist als zu jedem anderen Bravais-Gitterpunkt: $|\vec{r} - \vec{R}_0| \leq |\vec{r} - \vec{R}_n|$ für alle $\vec{R}_n$



Wigner-Seitz-Zelle ist eine sehr nützliche Wahl der primitiven Einheitszelle.

1. 2. Klassifizierung von Kristallstrukturen

Symmetrien des Bravais-Gitters:

- Punkt-Gruppe**
- * Rotationen: Winkel $\frac{2\pi}{n}$, $n=1, 2, 3, 4, 6$
(nur 2-, 3-, 4-, 6-zählige Drehsymmetrien erlaubt!) (Beweis: Seite 10a)
 - * Spiegelungen, Inversion
 - * Translationen um einen Bravais-Gitter-Vektor
- **Raumgruppe des Bravais-Gitters**

-10a-

erlaubte
Dreh-symmetrie
eines Bravais-Gitters



nächste Nachbarn

$$|R_2' - R_1'| = a |1 - 2 \cos \varphi|, \quad \varphi = \frac{2\pi}{h}$$

Es muss gelten $|R_2' - R_1'| = |m/a|, \quad m \in \mathbb{Z}$
 $\rightarrow 1 - 2 \cos \varphi = m$

$\Rightarrow$

m	-1	0	1	2	3
h	1	6	4	3	2

Punktgruppen des Bravais-Gitters $\rightarrow$ Kristallsysteme
 Zu einem Kristall-System können eventuell
 mehrere Bravais-Gitter gehören, die verschiedene
 Raumgruppen haben.

2D:

4 Kristall-Systeme, 5 Bravais-Gitter

- quadratisch  $|\vec{a}| = |\vec{b}|, \alpha = 90^\circ$

Symmetrie:

4 mm
 $\uparrow$ Drehachse (4-zählig)
 Spiegelungen an 2 Achsen

- rechtwinklig

Symmetrie: 2 mm

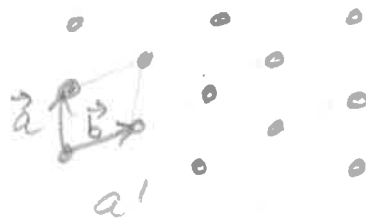
2 Bravais-Gitter

einfach rechtwinklig

zentriert rechtwinklig



$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$
 $\alpha = 90^\circ$



$a \neq a'$
 Basisvektoren
 z. B. $\vec{a}, \vec{b}$
 (primitive Translationen)

- hexagonal

Symmetrie: 6 mm



$|\vec{a}| = |\vec{b}|, \alpha = 120^\circ$

- schiefwinklig

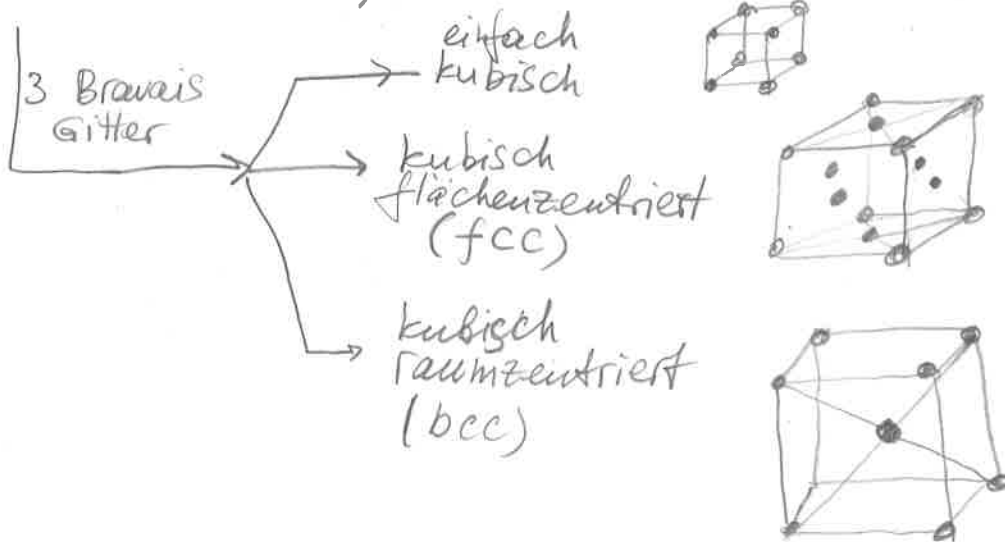
Symmetrie: 2



$a \neq b, \alpha \neq 90^\circ$

3D: 7 Kristall-Systeme, 14 Bravais-Gitter

z.B. das kubische System



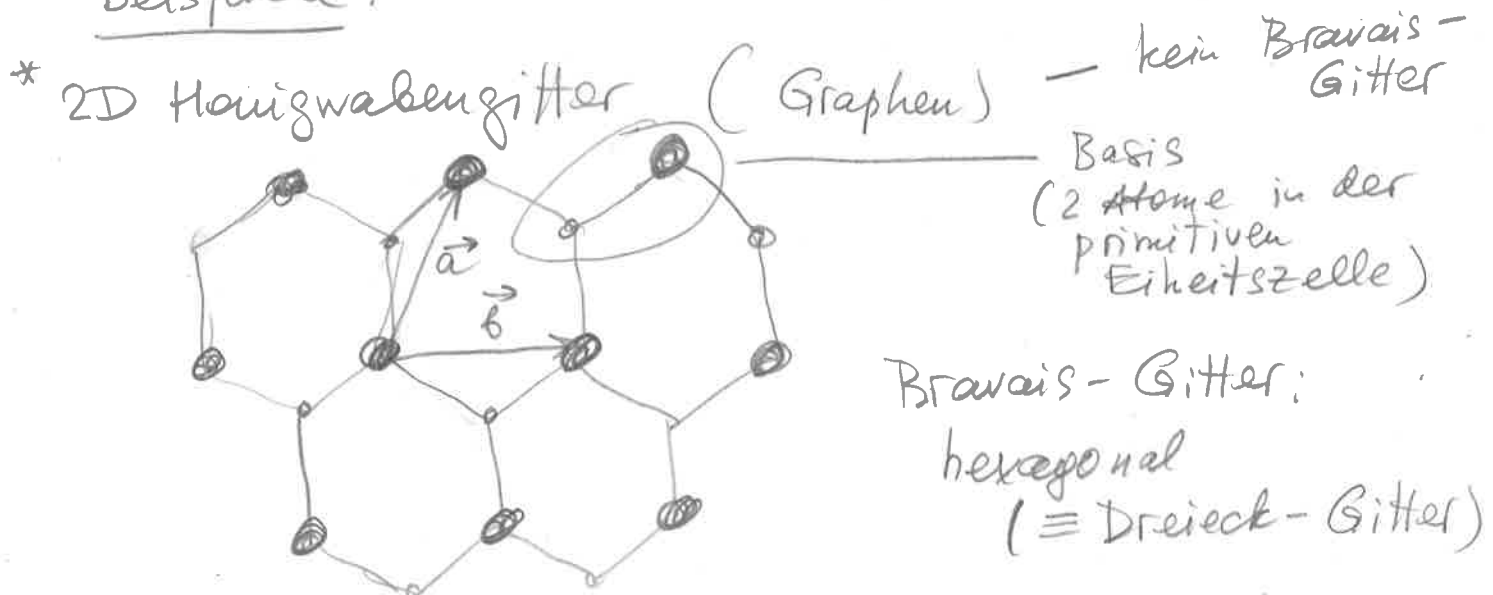
u.s.w.

Symmetrie des Kristalls kann sich im allgemeinen von der Symmetrie des Bravais-Gitter unterscheiden, wegen der Symmetrie der Einheitszelle

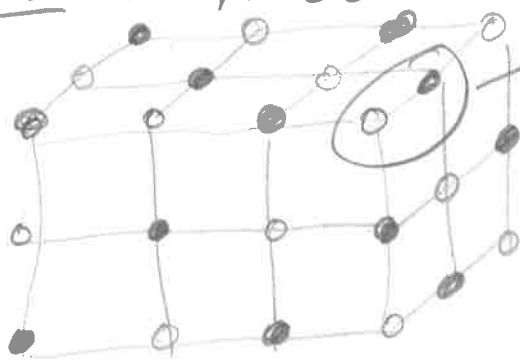
→ 32 Kristallklassen (Punktgruppen des Kristalls);

230 Raumgruppen

Beispiele:



3D : NaCl



2 Atome (Na + Cl)
pro elementare Einheitszelle
fcc
(flächenzentriertes
kubisches)
Bravais - Gitter

1.3. Reziprokes Gitter

Wir betrachten ein Bravais - Gitter und eine ebene Welle $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. Wir suchen solche $\vec{k}$, für die die Welle die Periodizität des Gitters hat:

$$e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R})} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad \text{für alle Bravais-Gitter-Punkte } \vec{R}$$

$$\Rightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = 1$$

{ solchen $\vec{k}$ } $\equiv$ reziprokes Gitter

* Reziprokes Gitter ist auch ein Bravais - Gitter
Beweis: $\vec{k}_1, \vec{k}_2$ erfüllen $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = 1 \Rightarrow \vec{k}_1 \pm \vec{k}_2$ erfüllt

Die primitiven Translationen dieses Gitters

können so gewählt werden:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_{EZ}} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_{EZ}} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_{EZ}} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2$$

$$V_{EZ} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$$

Volumen der primitiven
Einheitszelle

Beweis: $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

$$\vec{K} = \sum_j m_j \vec{b}_j, \quad \vec{R} = \sum_j n_j \vec{a}_j \quad n_j \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{K} \cdot \vec{R} = 2\pi \sum_j m_j n_j$$

$$\frac{1}{2\pi} \vec{K} \cdot \vec{R} \in \mathbb{Z} \text{ für beliebige } n_j \in \mathbb{Z} \Leftrightarrow m_j \in \mathbb{Z}$$

* Volumen der primitiven Elementarzelle des reziproken Gitters:

$$V_{\text{rG}} = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{EZ}}}$$

* Das reziproke Gitter des reziproken Gitters ist wieder das direkte Gitter

* Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters $\equiv$ erste Brillouin-Zone

Beispiele:

einfach kubisch $\leftrightarrow$ einfach kubisch

fcc (flächenzentriertes kubisches) $\leftrightarrow$ bcc (raumzentriertes kubisches)

1.4. Periodische Funktionen

Viele für einen Kristall physikalisch relevante Funktionen (z.B. Dichte $\rho(\vec{r})$ usw.) haben die Translationsinvarianz des Gitters:

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}) \quad \text{für jeden } \vec{R} \in \text{Bravais-Gitter}$$

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad -15-$$

Fourier-Entwicklung

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}) \Rightarrow e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1 \quad \text{für alle Gittervektoren}$$

$\Rightarrow \sum_{\vec{G}}$ läuft über die reziproken Gittervektoren

Koeffizienten $f_{\vec{G}}$: multipliziere mit $e^{-i\vec{G}\vec{r}}$, $\int d^3r$

$$\rightarrow \int d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} = \sum_{\vec{G}'} f_{\vec{G}'} \underbrace{\int d^3r e^{i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}}}_{V \delta_{\vec{G}\vec{G}'}}$$

$$\rightarrow f_{\vec{G}} = \frac{1}{V} \int d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} \\ = \frac{1}{V_{EZ}} \int_{EZ} d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} \quad \vec{G} \in \text{reziprokes Gitter}$$

Die Funktionen $\left\{ \frac{1}{\sqrt{V_{EZ}}} e^{i\vec{G}\vec{r}} \right\}$ bilden ein vollständiges orthonormiertes System auf der Einheitszelle des direkten Gitters

$$\frac{1}{V_{EZ}} \int_{EZ} d^3r e^{i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}} = \delta_{\vec{G}\vec{G}'}$$

$$\sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}} = V_{EZ} \sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r} - \vec{R})$$

Beweis der letzten Formel: betrachte $f(\vec{r}) = V_{EZ} \sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r} - \vec{R})$

$$\Rightarrow f_{\vec{G}} = \frac{1}{V_{EZ}} \int d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} = 1 \Rightarrow \sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}} = f(\vec{r}) \quad \square$$

1.5. Bloch-Theorem

Schrödinger-Gleichung für ein Elektron im periodischen Potential

$$H\psi = E\psi; \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}); \quad U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$$

für jeden $\vec{R} \in$ Bravais-Gitter

Bloch-Theorem:

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

$\vec{k} \in 1. \text{ Brillouin-Zone}, \quad n \in \mathbb{Z},$

$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) \quad - \text{periodisch}$

Beweis:

Translationsoperatoren $T_{\vec{R}}$:

$$T_{\vec{R}} f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$$

Eigenschaften:

* $T_{\vec{R}}^{-1} = T_{-\vec{R}}$

* $T_{\vec{R}}^{\dagger} = T_{-\vec{R}}$

Beweis: $\langle \Phi_1 | T_{\vec{R}} | \Phi_2 \rangle = \int d^3r \Phi_1^*(r) \Phi_2(r + \vec{R})$
 $= \int d^3r \Phi_1^*(r - \vec{R}) \Phi_2(r) = \int d^3r (T_{-\vec{R}} \Phi_1(r))^* \Phi_2(r)$

$\Rightarrow T_{\vec{R}}^{-1} = T_{\vec{R}}^{\dagger} \quad \text{unitarität}$

* $T_{\vec{R}}$ kommutiert mit H

Beweis:

$$T_{\vec{R}} H \psi = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \underbrace{U(\vec{r} + \vec{R})}_{"U(\vec{r})"} \right] \underbrace{\psi(\vec{r} + \vec{R})}_{"T_{\vec{R}} \psi"} = H T_{\vec{R}} \psi$$

* alle $T_{\vec{R}}$ kommutieren miteinander:

$$T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} = T_{\vec{R} + \vec{R}'} \rightarrow [T_{\vec{R}}, T_{\vec{R}'}] = 0$$

(abelsche Gruppe)

$\Rightarrow$ H und alle $T_{\vec{R}}$ können gleichzeitig diagonalisiert werden

$$H \psi = E \psi ; T_{\vec{R}} \psi = c(\vec{R}) \psi$$

$$\text{Unitarität} \Rightarrow |c(\vec{R})| = 1$$

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad \vec{a}_i - \text{elementare Vektoren des Bravais-Gitters, } n_i \in \mathbb{Z}$$

$$c(\vec{R}) = c^{n_1}(\vec{a}_1) c^{n_2}(\vec{a}_2) c^{n_3}(\vec{a}_3)$$

$$c(\vec{a}_j) \equiv e^{i\alpha_j}, \quad \alpha_j \in \mathbb{R} \quad (\text{weil } |c(\vec{a}_j)| = 1)$$

$$\Rightarrow c(\vec{R}) = e^{i(n_1 \alpha_1 + n_2 \alpha_2 + n_3 \alpha_3)}$$

Wir definieren $\vec{k} = \sum \alpha_j \vec{b}_j / 2\pi$, $\vec{b}_j$ - elementare Vektoren des reziproken Gitters

$$\vec{k} \cdot \vec{R} = \frac{1}{2\pi} \sum_j \alpha_j \vec{b}_j \cdot \sum_i n_i \vec{a}_i = \sum_j \alpha_j n_j$$

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$$\Rightarrow c(\vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$$

$$\Rightarrow T_{\vec{R}} \psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}}$$

jede Wellenfunktion ist durch einen Vektor $\vec{k}$ charakterisiert

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \equiv e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) ; u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})}$$

Alle Eigenfunktionen können zur Form $e^{i\vec{k}\vec{r}} u(\vec{r})$ mit $\vec{k} \in 1. \text{ Brillouinzone}$ gebracht werden

Beweis: $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u(\vec{r})$. Falls $\vec{k} \notin 1. \text{ Bz}$, es gibt $\vec{G} \in \text{rezipr. Gitter}$: $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{G}$, $\vec{k}' \in 1. \text{ Bz}$
 $\Rightarrow \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}'\vec{r}} \underbrace{e^{i\vec{G}\vec{r}} u(\vec{r})}_{\tilde{u}(\vec{r})}$ — Gitter-periodisch
 $\tilde{u}(\vec{r}) = \tilde{u}(\vec{r} + \vec{R})$ ■

* Für jedes $\vec{k} \in 1. \text{ Bz}$ gibt es abzählbar unendlich Eigenfunktionen:

$$\psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k},n}(\vec{r}), \quad n=1,2,3,\dots$$

Beweis: Schrödinger-Gleichung für u :
 $H\psi = E\psi, \quad \psi = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$

$$\Rightarrow \left[\frac{\hbar^2}{2m} (-i\vec{\nabla} + \vec{k})^2 + U(\vec{r}) \right] u_{\vec{k}}(\vec{r}) = E u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

+ periodische Randbedingungen $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$

Für gegebenes $\vec{k}$ ein hermitesches Eigenwertproblem $\rightarrow$ Eigenfunktionen $u_{\vec{k},n}(\vec{r})$,
 Eigenwerte $E_{\vec{k},n}$ $n=1,2,3,\dots$

* Für ein endliches System (Volumen V) werden die erlaubte Werte von $\vec{k}$ diskret. Es ist bequem periodische (Born-von-Karman) Randbedingungen zu wählen.

$$\psi(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) = \psi(\vec{r}) \quad j=1,2,3$$

$N = N_1 N_2 N_3$ — Zahl der Elementarzellen

Erlaubte $\vec{k}$: $e^{i\vec{k} N_j \vec{a}_j} = 1$

$$\vec{k} = \sum_i \alpha_i \vec{b}_i / 2\pi \quad ; \quad \vec{k} \vec{a}_j = \alpha_j$$

$$\Rightarrow \alpha_j N_j = 2\pi m_j \quad m_j \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow \vec{k} = \sum_j \frac{m_j}{N_j} \vec{b}_j \quad m_j = 0, 1, \dots, N_j - 1$$

N_j nicht-äquivalente Werte
(in der Elementarzelle des reziproken Gitters)

$$\Rightarrow N = N_1 N_2 N_3 \text{ erlaubte } \vec{k} \text{-Werte}$$

Volumen des reziproken Gitters pro $\vec{k}$ -Wert:

$$|\Delta^3 k| = |\Delta \vec{k}_1 \cdot (\Delta \vec{k}_2 \times \Delta \vec{k}_3)| = \left| \frac{\vec{b}_1}{N_1} \cdot \left(\frac{\vec{b}_2}{N_2} \times \frac{\vec{b}_3}{N_3} \right) \right| =$$

$$= \frac{1}{N} V_{\text{EZ}} = \frac{1}{N} \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{EZ}}} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Damit lässt sich eine Summe im Limes eines grossen Systems, $V \rightarrow \infty$, in ein Integral umschreiben:

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int \frac{d^3 k}{|\Delta^3 k|} \dots = V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \dots$$

* Orthogonalität, Normierung, Vollständigkeit

Für jedes feste $\vec{k}$ bilden die Funktionen $u_{n\vec{k}}$ ein VONS auf der Einheitszelle des direkten Gitters

$$\frac{1}{V_{EZ}} \int_{EZ} d^3r u_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{n'\vec{k}}(\vec{r}) = \delta_{nn'} ;$$

Normierung so gewählt $\sum_n u_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{n\vec{k}}(\vec{r}') = V_{EZ} \delta(\vec{r}-\vec{r}')$

$\Rightarrow$ Blochfunktionen $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$,
 $\vec{k} \in 1. \text{BZ}; n=1,2,\dots$

bilden ein VONS für den gesamten Kristall!

$$\int_V d^3r \psi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{n'\vec{k}'}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \int_{V_{EZ}} d^3r e^{-i\vec{k}(\vec{R}+\vec{r})} u_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}'(\vec{R}+\vec{r})} u_{n'\vec{k}'}(\vec{r})$$

$$= \underbrace{\sum_{\vec{R}} e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{R}}}_N \underbrace{\int_{V_{EZ}} d^3r u_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) u_{n'\vec{k}'}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}}}_{V_{EZ} \delta_{nn'}} = N \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \Rightarrow \vec{k}=\vec{k}' \Rightarrow V_{EZ} \delta_{nn'}$$

$$= V \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{nn'}$$

Im Limes $V \rightarrow \infty$

$$V \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \rightarrow (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

$$\frac{1}{V} \sum_n \sum_{\vec{k} \in 1. \text{BZ}} \psi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

* Interpretation von Quantenzahlen n und $\vec{k}$:

• $\hbar \vec{k}$ - "Kristallimpuls", Quasiimpuls

- nicht der übliche Impuls:

$$\hat{p} \psi_{n,k} = -i\hbar \vec{\nabla} \psi_{n,k} = \hbar \vec{k} \psi_{n,k} = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,k}(\vec{r})$$

Quasiimpuls $\hbar \vec{k}$
Impulse $\hbar(\vec{k} + \vec{G}_n)$
Erhaltungssatz
 $\sum \vec{k}_i = \sum \vec{k}_i' + \vec{G}_n$
 $n=1, 2, \dots$

• $n \rightarrow$ Energie-Bänder $E_n, \vec{k}$

Man kann zeigen, dass $E_n, \vec{k}$ stetige Funktionen von $\vec{k}$ sind

1.6. Näherung fast freier Elektronen

Periodisches Potential als Störung

Fourier-Entwicklung:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}}, \quad \vec{k} \in 1. \text{ BZ}$$

$\vec{G} \leftarrow$ läuft über reziprokes Gitter

$$\left[\Leftrightarrow \psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}); \quad u_{\vec{k}}(\vec{r}) - \text{periodisch}; \right]$$

$$u_{\vec{k}} = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}+\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}; \quad U_0 = 0$$

Schrödinger-Gl. $\rightarrow$

$$\sum_{\vec{G}} \left[-E_{\vec{k}} + \frac{\hbar^2 (\vec{k}+\vec{G})^2}{2m} \right] c_{\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} + \sum_{\vec{G}''} U_{\vec{G}''} e^{i\vec{G}''\vec{r}} \sum_{\vec{G}'} c_{\vec{k}+\vec{G}'} e^{i(\vec{k}+\vec{G}')\vec{r}} = 0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{\vec{G}, \vec{G}'} U_{\vec{G}-\vec{G}'} c_{\vec{k}+\vec{G}'} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}}$$

$$\boxed{\vec{G} = \vec{G}' + \vec{G}''}$$

$$\Rightarrow \left[-E_{\vec{k}} + \frac{\hbar^2 (\vec{k}+\vec{G})^2}{2m} \right] c_{\vec{k}+\vec{G}} + \sum_{\vec{G}'} U_{\vec{G}-\vec{G}'} c_{\vec{k}+\vec{G}'} = 0$$

* $U=0$ (freie Elektronen)

Lösungen
$$E_k = \frac{\hbar^2(k + G_n)^2}{2m} \equiv E_{n,k}^{(0)} \equiv \varepsilon_{k+G_n}^{(0)}$$

$$C_{k+G}^{(0)} = \delta_{G,G_n}$$

* $U \neq 0 \rightarrow$ zwei Möglichkeiten:

a) für gegebene $\vec{k}$ und G_n gibt es keine Entartung, d.h. für alle G_l ($l \neq n$) gilt $|\varepsilon^{(0)}(k+G_l) - \varepsilon^{(0)}(k+G_n)| \gg |U|$.

[Für schwaches Potential U wird das fast überall gelten]

$\rightarrow$ übliche (nicht-entartete) Störungstheorie

1. Ordnung $\rightarrow$ keine Korrektur zur Energie ($U_0=0$)

2. Ordnung $\rightarrow$

$$E_{n,k} = \varepsilon_{k+G_n}^{(0)} + \sum_{l \neq n} \frac{|U_{G_l - G_n}|^2}{\varepsilon_{k+G_n}^{(0)} - \varepsilon_{k+G_l}^{(0)}} + O(U^3)$$

$$C_{n,k+G_l} = \frac{U_{G_l - G_n}}{\varepsilon_{k+G_n}^{(0)} - \varepsilon_{k+G_l}^{(0)}} + O(U^2) \quad (l \neq n)$$

$$\Delta E_{n,k} \gtrless 0 \quad \text{für} \quad \varepsilon_{k+G_n}^{(0)} \gtrless \varepsilon_{k+G_l}^{(0)}$$

verursacht
durch das
Band l

$\Rightarrow$ Energie - Bänder
stoßen sich ab

b) Entartung:
zusätzlich zu G_n gibt es mindestens einen weiteren G , der die Gleichung

$$\varepsilon_{k+G_n}^{(0)} \approx \varepsilon_{k+G}^{(0)} \quad [\text{d.h., } |\varepsilon_{k+G_n}^{(0)} - \varepsilon_{k+G}^{(0)}| \lesssim U]$$

erfüllt. Nehmen wir an, es gibt insgesamt (einschließlich G_n) m solchen Vektoren $G_1, \dots, G_m$ ($m \geq 2$)

→ entartete Störungstheorie

$$\left(\frac{\hbar^2 (k + G_j)^2}{2m} - E_k \right) C_{k+G_j} + \sum_{i=1}^m U_{G_j - G_i} C_{k+G_i} = 0$$

$j=1, \dots, m$

homogenes System;

Determinante der Koeffizientenmatrix = 0

→ Energieeigenwerte

Wichtigste Situation: zweifache Entartung:

$$G_1, G_2; \quad \varepsilon_{k+G_1}^{(0)} \approx \varepsilon_{k+G_2}^{(0)} \Leftrightarrow |k+G_1| \approx |k+G_2|$$

$$k+G_1 \equiv q, \quad G_1 - G_2 \equiv G \rightarrow k+G_2 = q - G$$

$$\varepsilon_q^{(0)} \approx \varepsilon_{q-G}^{(0)} \Leftrightarrow \vec{q} \cdot \vec{G} \approx \frac{G^2}{2} \quad (\vec{q} \in \text{"Bragg-Ebene"})$$

$$\det \begin{bmatrix} E - \varepsilon_q^{(0)} & -U_G \\ -U_G^* & E - \varepsilon_{q-G}^{(0)} \end{bmatrix} = 0$$

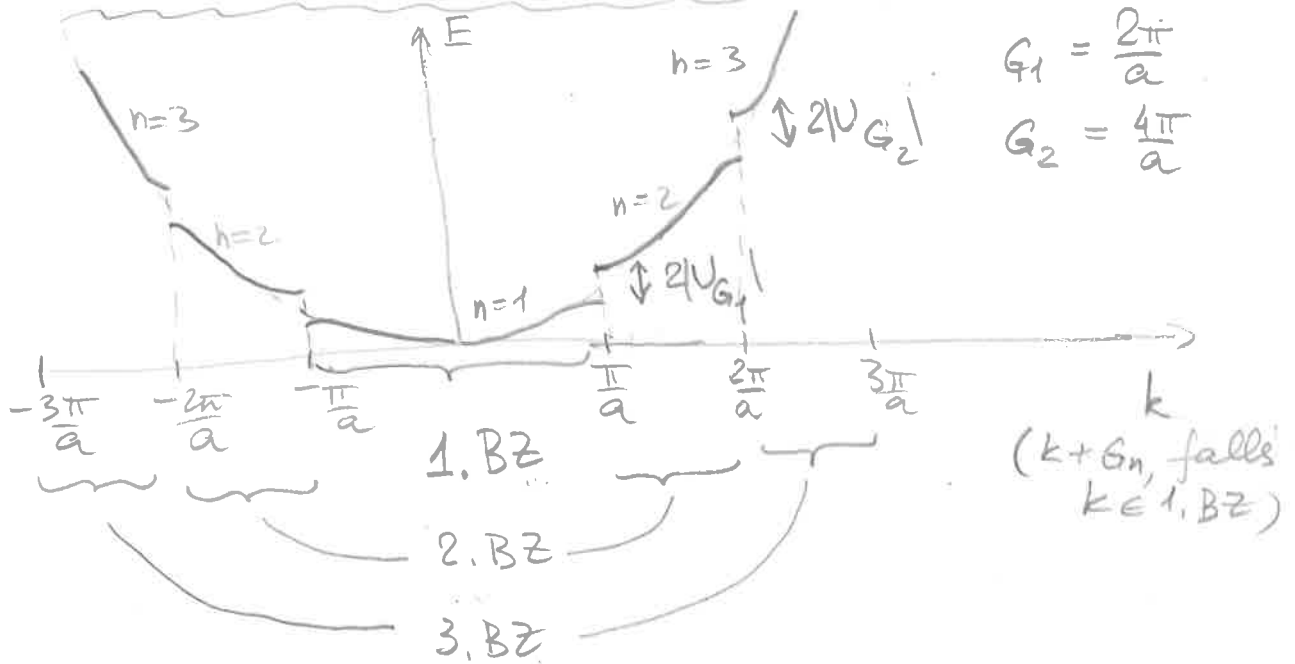
$$E = \frac{\varepsilon_q^{(0)} + \varepsilon_{q-G}^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_q^{(0)} - \varepsilon_{q-G}^{(0)}}{2} \right)^2 + |U_G|^2}$$

Exakt in der "Bragg-Ebene", $\varepsilon_q^{(0)} = \varepsilon_{q-G}^{(0)}$, haben wir
($|q| = |q-G|$)

$$\rightarrow E = \varepsilon_q^{(0)} \pm |U_G| \rightarrow \text{Energiespalte } 2|U_G|$$

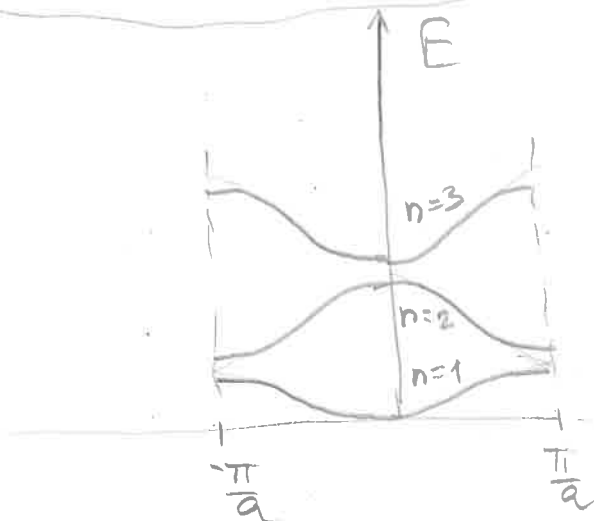
Zonenschema in 1D

a) erweitertes Zonenschema



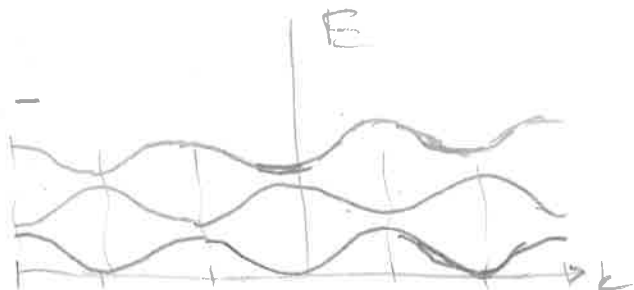
n-te B.Z.: Bereich aller Punkte, die vom Ursprung durch Überqueren von $(n-1)$ Bragg-Ebenen erreicht werden. Hat gleiches Volumen wie die 1. B.Z. [in 1D Bragg-Ebene = Punkt $n\pi/a$]

b) reduziertes Zonenschema



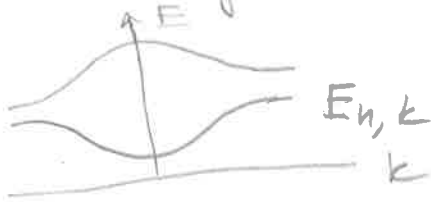
Alle Äste der Dispersionskurve (- Fläche) in die 1. BZ zurückgefalld

c) Periodisches Zonenschema - das reduzierte Schema periodisch im Raum fortgesetzt



1.7. Bandstruktur des Spektrums, Metalle und Isolatoren

Energie-Eigenwerte der Blochzustände sind in Energiebänder angeordnet



$n=1, 2, \dots$



In $d > 1$ können die Bänder überlappen.
Anzahl von Zuständen in jedem Band =

$2 \times$ Anzahl von $\vec{k}$ Vektoren in der 1. BZ $\equiv 2N$.
 $\uparrow$ Spin $\rightarrow$ jede primitive Elementarzelle trägt genau 2 (Spin) Zustände zu jedem Energieband bei.

Grundzustand von Ne Elektronen:

Ne Zustände mit niedrigsten Energien besetzt
 - bis zur Fermi-Energie E_F

$$|\psi_0\rangle = \prod_{\substack{n, \vec{k}, \sigma; \\ E_{\vec{k}n} \leq E_F}} c_{n\vec{k}\sigma}^\dagger |\text{vacuum}\rangle$$

(d.h. die niedrigsten $\frac{Ne}{2} E_{\vec{k}n}$ -Werte
 doppelt besetzt -
 mit Spin $\uparrow$ und $\downarrow$)

$\rightarrow$ zwei qualitativ verschiedene Fälle

- 1) vollständig gefüllte Energiebänder, die durch eine Lücke ΔE vom niedrigsten unbesetzten Band getrennt sind
 $\rightarrow$ Isolator / Halbleiter
- 2) Teilweise gefüllte(s) Band / Bänder
 $\rightarrow$ Metall



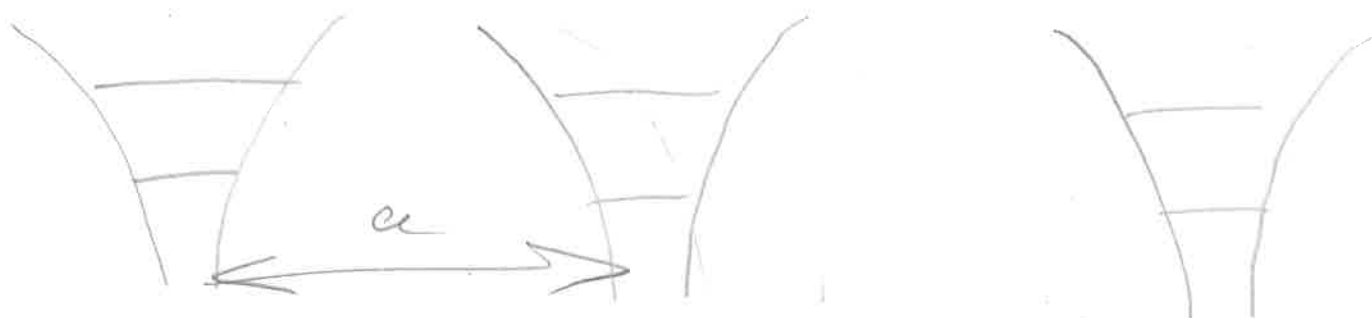
Fermifläche $E_{\vec{k}n} = E_F$ in einem oder mehreren Bändern

1.8. Stark gebundene Elektronen:

"Tight binding" - Modell

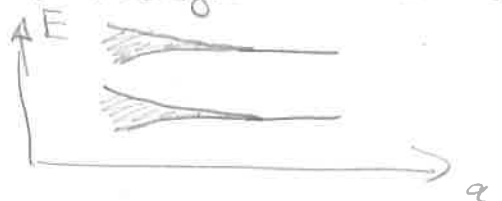
Näherung fest freier Elektronen: Grenzfall freier Elektronen, periodisches Potential als Störung

Jetzt der umgekehrte Grenzfall: atomar gebundene, lokalisierte Elektronen



Großer Abstand: $(a \rightarrow \infty)$: Energie-Niveaus wie in einzelnen Atomen (vielfach entartet)

Annäherung $\rightarrow$ Wellenfunktionen beginnen zu überlappen
 $\rightarrow$ Aufspaltung der Energie-Niveaus
 $\rightarrow$ Bänder



Formalismus der Wannier-Funktionen

Bloch-Zustände lassen sich exakt in der folgenden Form darstellen:

$$\psi_{n,k}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} w_n(\vec{r}-\vec{R}),$$

wobei $w_n(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{k \in 1.BZ} \psi_{n,k}(\vec{r}) = V_{EZ} \int_{1.BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{n,k}(\vec{r})$

Beweis: $w_n(\vec{r}-\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{k \in 1.BZ} \psi_{n,k}(\vec{r}-\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{k \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \psi_{n,k}(\vec{r})$

$\Rightarrow$

$$\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} w_n(\vec{r}-\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{k}' \in 1.BZ} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}} \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r}) =$$

$$= \sum_{\vec{k}' \in 1.BZ} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \psi_{n,\vec{k}'}(\vec{r}) = \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad \blacksquare$$

Es ist einfach zu überprüfen, dass die Wannier-Funktionen ein VONS bilden, $\{w_n(\vec{r}-\vec{R}), \vec{R} \in BG, n=1,2,3,\dots\}$

$$\int d^3r w_n^*(\vec{r}-\vec{R}) w_{n'}(\vec{r}-\vec{R}') = V_{EZ} \delta_{nn'} \delta_{\vec{R}\vec{R}'}$$

$$\sum_{n,\vec{R}} w_n^*(\vec{r}-\vec{R}) w_n(\vec{r}'-\vec{R}) = V_{EZ} \delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad \rightarrow \text{Übung}$$

Schrödinger - Gleichung für Wannier-Funktionen (exakt)

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} U_a(\vec{r}-\vec{R}) \quad U_a(\vec{r}) - \text{Potential eines Atoms (einer Atomgruppe)}$$

$$\sum_{\vec{R}} \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_a(\vec{r}-\vec{R}) + \Delta U(\vec{r}, \vec{R}) \right) e^{i\vec{k}\vec{R}} w_n(\vec{r}-\vec{R}) = E_{n,\vec{k}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} w_n(\vec{r}-\vec{R});$$

$$\Delta U(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{\vec{R}' \neq \vec{R}} U_a(\vec{r}-\vec{R}') \equiv U(\vec{r}) - U_a(\vec{r}-\vec{R}) \quad \text{wird als Störung betrachtet}$$

Starke Bindung $\rightarrow$ Näherung für Wannier-Funktionen als Linearkombinationen von atomaren Orbitalen (LCAO):

$$w_{(r)} \approx \sum_m b_m \phi_m^{(r)}; \quad \phi_m - \text{atomare Orbitale; (z.B. ein s-Zustand bei Alkali-Metallen oder 1+3=4 2s und 2p Zuständen beim Kohlenstoff oder 5 3d-Zuständen beim Kupfer usw.)}$$

$$H_a \phi_m = E_{a,m} \phi_m$$

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

$$\rightarrow \sum_m b_m (E_{\vec{k}} - E_{a,m}) \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \phi_m(\vec{r}-\vec{R}) \approx$$

$$\approx \sum_m b_m \sum_{\vec{R}} \Delta U(\vec{r}, \vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}} \phi_m(\vec{r}-\vec{R})$$

nicht exakt im gesamten Hilbertraum. Wir können aber verlangen, dass die Gleichung in der Sinne der Projektion auf das LCAO-Hilbertraum gilt ($\leftrightarrow$ Variationsmethode). Projektion auf $\phi_e(\vec{r})$, d.h. $\int d\vec{r} \phi_e^*(\vec{r}) \dots \rightarrow$

$$(E_{\vec{k}} - E_{a,e}) b_e + \sum_m b_m (E_{\vec{k}} - E_{a,m}) \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \underbrace{\int d^3r \phi_e^*(\vec{r}) \phi_m(\vec{r}-\vec{R})}_{I_{e,m}(\vec{R})}$$

$$= \sum_m b_m \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \underbrace{\int d^3r \phi_e^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}, \vec{R}) \phi_m(\vec{r}-\vec{R})}_{h_{e,m}(\vec{R})}$$

$$(E_{\vec{k}} - E_{a,e}) b_e + \sum_m b_m (E_{\vec{k}} - E_{a,m}) \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} I_{e,m}(\vec{R})$$

$$= \sum_m b_m \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} h_{e,m}(\vec{R})$$

$\rightarrow$ ein homogenes lineares Gleichungssystem für $\{b_m\}$. Nichttriviale Lösung $\leftrightarrow \det(\dots) = 0$

$\rightarrow$ Energien $E_{n,\vec{k}}$, $n=1, 2, \dots, N_b$

Anzahl der Bänder = Anzahl der AO $\phi_m^{(r)}$
 (N_b) $[m=1 \dots N_b]$

Beispiel: $N_b = 1$ ein s-Zustand $\phi(\vec{r}) = \phi(|\vec{r}|)$

$$E_{\vec{k}} = E_a + \frac{\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} h(\vec{R})}{1 + \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} I(\vec{R})}$$

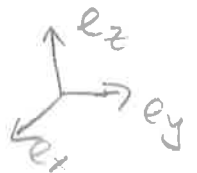
weitere Näherung: (a) Beschränkung der Summe auf nächste Nachbarn;

(b) $I(\vec{R}) \ll 1$

$$\rightarrow E_{\vec{k}} = E_a + h(0) + \sum_{\vec{R} \in \{n.n.\}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} (h(\vec{R}) - h(0)I(\vec{R}))$$

z.B. für ein einfaches kubisches Gitter

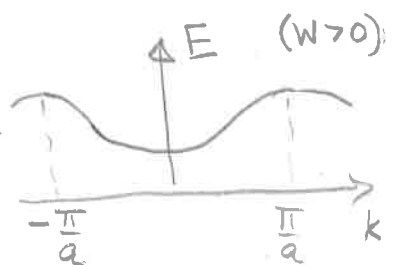
$$\{n.n.\} = \{\pm a\vec{e}_x, \pm a\vec{e}_y, \pm a\vec{e}_z\}$$



$$E_{\vec{k}} = E_a + h(0) - 2W [\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a]$$

$$W = h(0)I(a) - h(a)$$

In 1D: $E_k = E_a + h(0) - 2W \cos ka$



Alternative Formulierung:

$|\vec{R}, m\rangle$ - Zustände in jeder primitiven EZ
 $m = 1, \dots, N_b$

$$\langle \vec{R}_1, m_1 | \vec{R}_2, m_2 \rangle = \delta_{\vec{R}_1, \vec{R}_2} \delta_{m_1, m_2}$$

Man postuliert einen Tunnel-Hamilton-Operator:

$$H = \sum_{\vec{R}_1, m_1} \sum_{\vec{R}_2, m_2} t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) |\vec{R}_2, m_2\rangle \langle \vec{R}_1, m_1|$$

$$H = H^\dagger \Leftrightarrow t_{m_1 m_2}(\vec{R}) = t_{m_2 m_1}^*(-\vec{R})$$

Im Formalismus der zweiten Quantisierung

$$H = \sum_{\vec{R}_1, m_1} \sum_{\vec{R}_2, m_2} t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) a_{\vec{R}_2, m_2}^\dagger a_{\vec{R}_1, m_1}$$

Blochzustände:

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \underbrace{\sum_m b_m |\vec{R}, m\rangle}_{\approx \text{Wannier-Funktion } |w_{\vec{R}}\rangle}$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gl. $\rightarrow$

$$\sum_{\vec{R}_1, m_1} \sum_{\vec{R}_2, m_2} t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) e^{i\vec{k}\vec{R}_1} b_{m_1} |\vec{R}_2, m_2\rangle = E_{\vec{k}} \sum_{\vec{R}, m} e^{i\vec{k}\vec{R}} b_m |\vec{R}, m\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{\vec{R}_1, m_1} t_{m_1 m_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) e^{i\vec{k}\vec{R}_1} b_{m_1} = E_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}_2} b_{m_2}$$

$\rightarrow$ wieder ein homogenes lineares System für
 $\vec{b} = \{b_m, m=1 \dots N_b\}$

$$\hat{T}(\vec{k}) \vec{b} = E_{\vec{k}} \vec{b} \quad ; \quad T(\vec{k}) = \sum_{m_2 m_1} \sum_{\vec{R}} t_{m_1 m_2}(\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}}$$

$\det(\hat{T}(\vec{k}) - E_{\vec{k}}) = 0 \rightarrow N_b$ Eigenwerte $E_n, \vec{k}$;
 Eigenvektoren $\vec{b}_n \rightarrow$ Bloch-Funktionen $\psi_{n, \vec{k}}$

$$\underline{N_b=1}: \quad E_{\vec{k}} = \sum_{\vec{R}} t(\vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{R}}$$

1D, $t(\vec{R}) = t$ für die nächsten Nachbarn (und sonst $t(\vec{R})=0$)
 $\rightarrow$

-31-

$$E_k = 2t \cos ka$$

3D, einfaches kubisches Gitter, isotropes
Nächster-Nachbarn-Tunneln

$$\rightarrow E_{\vec{k}} = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

usw.

2. Quasiklassische Dynamik von Bloch-Elektronen

2.1. Effektiver Hamilton-Operator

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi \quad ; \quad H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r)}_{H_0} + U_{\text{ext}}(\vec{r})$$

↑ period. Pot ↑ äußeres Feld

Wir werden annehmen, dass das äußere Feld $U_{\text{ext}}(\vec{r})$ räumlich langsam variiert: $\lambda \gg a$

charakt. Länge für U_{ext} ↑ Gitterkonstante

Dann lässt sich die Dynamik von Blochelektronen quasiklassisch beschreiben. Betrachten wir einen Wellenpaket:

$$\lambda \gg \Delta x \gg a$$

Unschärfe: ↑ Ausdehnung des Wellenpaketes

$\Delta x \ll \lambda$ — Koordinate gut definiert

$\Delta p \sim \frac{2\pi\hbar}{\Delta x} \ll \frac{2\pi\hbar}{a}$ — Impuls gut definiert } → quasikl. Beschreibung sinnvoll

↑ Charakteristische Werte des Impulses

Ableitung des effektiven Hamilton-Operators:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{n, \vec{R}} a_{n, \vec{R}}(t) w_n(\vec{r} - \vec{R})$$

Darstellung in Wannier-Funktionen

Bloch-Funktionen $\psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} w_n(\vec{r} - \vec{R})$;

$$w_n(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) \quad ; \quad w_n(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$$

Wir bestimmen erst die Wirkung von H_0 auf die Wannier-Funktionen

$$\begin{aligned} H_0 w_n(\vec{r} - \vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\vec{R}} H_0 \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{-i\vec{k}\vec{R}} E_{n, \vec{k}} \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} E_{n, \vec{k}} \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{k}(\vec{R}' - \vec{R})} w_n(\vec{r} - \vec{R}') = \sum_{\vec{R}'} E_n(\vec{R}' - \vec{R}) w_n(\vec{r} - \vec{R}') \end{aligned}$$

wobei
$$E_n(\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{i\vec{k}\vec{R}} E_{n,\vec{k}}$$

Schrödinger - Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_0 + U_{\text{ext}}(\vec{r})) \Psi$$

$$\rightarrow = i\hbar \sum_{n, \vec{R}} \frac{\partial a_{n, \vec{R}}(t)}{\partial t} \psi_n(\vec{r} - \vec{R})$$

$$\rightarrow = \sum_{n_2, \vec{R}_2} a_{n_2, \vec{R}_2}(t) (H_0 + U_{\text{ext}}(\vec{r})) \psi_{n_2}(\vec{r} - \vec{R}_2) =$$

$$= \sum_{n_2, \vec{R}_2} a_{n_2, \vec{R}_2}(t) \sum_{\vec{R}_1} E_{n_2}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \psi_{n_2}(\vec{r} - \vec{R}_1) + \sum_{n_2, \vec{R}_2} a_{n_2, \vec{R}_2}(t) U_{\text{ext}}(\vec{r}) \psi_{n_2}(\vec{r} - \vec{R}_2)$$

Wannier - Funktionen bilden ein VONS $\rightarrow$
 $\int d^3r \psi_n^*(\vec{r} - \vec{R}) \dots \rightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_{n, \vec{R}}(t) = \sum_{\vec{R}_2} E_n(\vec{R} - \vec{R}_2) a_{n, \vec{R}_2}(t) + \sum_{n_2, \vec{R}_2} U_{n, \vec{R}, n_2, \vec{R}_2}^{\text{ext}} a_{n_2, \vec{R}_2}(t);$$

$$U_{n, \vec{R}, n_2, \vec{R}_2}^{\text{ext}} = \int d^3r \psi_n^*(\vec{r} - \vec{R}) U_{\text{ext}}(\vec{r}) \psi_{n_2}(\vec{r} - \vec{R}_2)$$

Bis jetzt war alles exakt. Jetzt kommen Näherungen: (Quasiklassik)

$$1) \sum_{\vec{R}_2} E_n(\vec{R} - \vec{R}_2) a_{n, \vec{R}_2} = \sum_{\vec{R}_1} E_n(\vec{R}_1) a_{n, \vec{R} - \vec{R}_1} \simeq \sum_{\vec{R}_1} E_n(\vec{R}_1) e^{-i\vec{R}_1(-i\vec{\nabla})} a_{n, \vec{R}}$$

$$= E_n \vec{k} \Big|_{\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla}} a_{n, \vec{R}}$$

Wir betrachten hier $a_{n, \vec{R}}$ als eine Funktion im gesamten Raum, obwohl $a_{n, \vec{R}}$ nur in diskreten Punkten (Bravais-Gitter) definiert wurde. Rechtfertigung:
 $\lambda \gg a$

$$2) U_{n, \vec{R}, n_2, \vec{R}_2}^{\text{ext}} \simeq U_{\text{ext}}(\vec{R}) \delta_{nn_2} \delta_{\vec{R}\vec{R}_2}$$

Rechtfertigung: wieder $\lambda \gg a \rightarrow U_{\text{ext}}(\vec{r})$ ändert sich langsam innerhalb der Reichweite der Wannier-Funktionen
 $\rightarrow$ kann mit einer konstante $U_{\text{ext}}(\vec{R})$ ersetzt werden.

$$\rightarrow i\hbar \partial_t a_{n,R}(t) = \left[E_n(-i\vec{\nabla}) + U_{\text{ext}}(\vec{R}) \right] a_{n,R}(t)$$

$\uparrow$
 $E_n \vec{k} \big|_{\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla}}$

$$a_{n,R}(t) \rightarrow a_n(r,t)$$

$$i\hbar \partial_t a_n(r,t) = H_{\text{eff},n} a_n(r,t)$$

Effektiver
Hamilton-
Operator

$$H_{\text{eff},n} = E_n(-i\vec{\nabla}) + U_{\text{ext}}(\vec{r})$$

Falls auch externes Magnetfeld ($\leftrightarrow$ Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r})$)

vorhanden (soll auch nur langsam variieren)

$$\rightarrow H_{\text{eff},n} = E_n(-i\vec{\nabla} + \frac{e}{\hbar c} \vec{A}) - e\phi(\vec{r})$$

$= U_{\text{ext}}(\vec{r});$
 Elektron-Ladung $-e$

Wir sehen, dass $E_n(-i\vec{\nabla})$ die Rolle der kinetischen Energie spielt, anstatt $E_{\text{free}}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$.

Wir definieren den Tensor $\overset{m^*}{m^*}$ der effektiven Masse:

$$\left(m^{*-1} \right)_{ij}(\vec{k}_0) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \bigg|_{\vec{k} = \vec{k}_0}$$

Beispiel: einfaches kubisches Gitter, Näherung stark gebundener Elektronen mit einem Zustand pro EZ

$$E(\vec{k}) = \text{const} - 2W [\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a];$$

wir nehmen an $W > 0$



-35-

→ in der Nähe des Punktes $\vec{k} = 0$ (Minimum von $E(\vec{k})$)
 $E(\vec{k}) \simeq \text{const} + \hbar^2 k^2$

→ $(m^{*-1})_{ij} = m^{*-1} \cdot \delta_{ij}$ isotrop ;
 $\uparrow$ Skalar

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\omega a^2}$$

kann sich von m sehr stark unterscheiden!

Das beeinflusst entsprechend die Dynamik

Beispiel: Eine Coulomb-Störstelle im

Halbleiter: $U_{\text{ext}} = -\frac{e^2}{\epsilon r}$ ϵ - Dielektrizitätskonstante

$$E_L(\vec{k}) \simeq E_{L0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

in der Nähe der unteren Leitungsbandkante

$$\rightarrow H_{\text{eff}} \simeq E_{L0} - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r}$$



→ gebundene Zustände

$$E_n - E_{L0} = -\frac{m^* e^4}{2\epsilon^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Für $n=1$ $|E_1 - E_{L0}| = \frac{m^*}{m} \frac{1}{\epsilon^2} R_y \approx 13.6 \text{ eV}$

effektiver Bohr'scher Radius:

$$r_0 = \frac{\epsilon \hbar^2}{e^2 m^*} = \epsilon \frac{m}{m^*} a_0$$

z.B. für $\epsilon=10$, $\frac{m^*}{m} = 0.1 \rightarrow |E_1 - E_{L0}| \sim 10^{-3} R_y$
 $r_0 \sim 10^2 a_0$

2.2. Klassische Bewegungsgleichungen

Klassische Beschreibung: $-i\hbar \vec{\nabla} \rightarrow \vec{p}$ Klassische Variable

$$H = E_n \left(\frac{\vec{p}}{\hbar} + \frac{e}{c\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \right) - e\phi(\vec{r})$$

$\vec{r}, \vec{p}$ - Orts- und Impulsvariable eines klassischen Teilchens

Bewegungsgleichungen:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \vec{r} = \vec{\nabla}_p H \quad (1) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \vec{p} = -\vec{\nabla}_r H \quad (2) \end{array} \right.$$

$$(1) \Rightarrow v_j \equiv \frac{d}{dt} r_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_j} \quad \left| \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} + \frac{e}{c\hbar} \vec{A} \right.$$

Geschwindigkeit

$$\begin{aligned} (2) \Rightarrow \frac{d}{dt} p_j &= -\frac{e}{c} \sum_i v_i \frac{\partial A_i}{\partial r_j} + e \nabla_j \phi \\ &= -\frac{e}{c} \sum_i v_i \left(\frac{\partial A_i}{\partial r_j} - \frac{\partial A_j}{\partial r_i} + \frac{\partial A_j}{\partial r_i} \right) + e \nabla_j \phi \\ &= -\frac{e}{c} (\vec{v} \times \vec{B})_j - \frac{e}{c} \sum_i v_i \frac{\partial A_j}{\partial r_i} + e \nabla_j \phi \end{aligned}$$

Wir addieren das mit $\frac{d}{dt} A_j = \frac{\partial A_j}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial A_j}{\partial r_i} v_i$ (mal $\frac{e}{c}$)

$$\rightarrow \frac{d}{dt} \left(p_j + \frac{e}{c} A_j \right) = -\frac{e}{c} (\vec{v} \times \vec{B})_j + \underbrace{\frac{e}{c} \frac{\partial A_j}{\partial t} + e \nabla_j \phi}_{= -e E_j}$$

$$\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \equiv \vec{p}_{\text{kin}} \quad \text{kinetischer Impuls}$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \vec{p}_{\text{kin}} = -e \vec{E} - \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B}}$$

2.3. Bloch-Elektronen im elektrischen Feld

$\vec{B}=0$, $v_j = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_j} \Big|_{\vec{k} = \vec{p}/\hbar}$ Geschwindigkeit

$$\frac{d}{dt} \vec{p} = -e\vec{E}$$

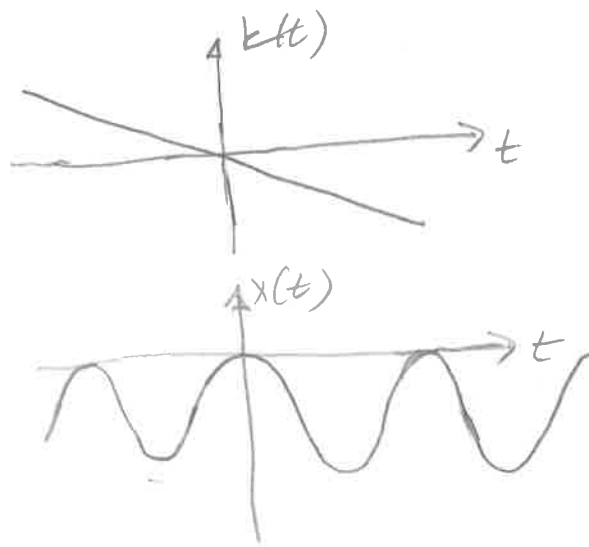
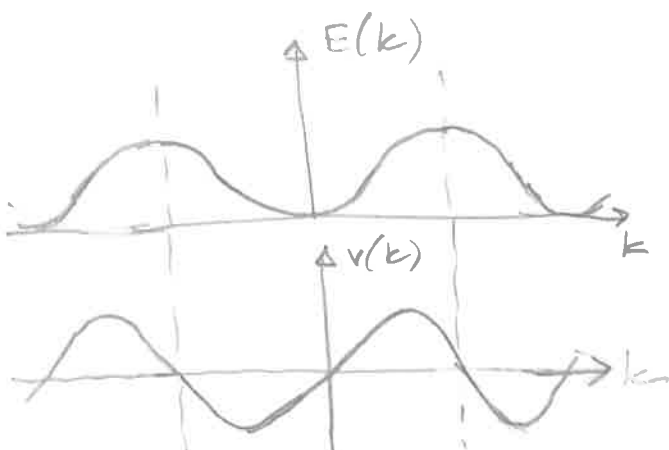
$\vec{E} = \text{const}$ (t und r-unabhängig) $\rightarrow \vec{p}(t) = \vec{p}(0) - e\vec{E}t$
 $\vec{k}(t) = \vec{k}(0) - e\vec{E}t/\hbar$

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(0) + \int_0^t dt' \vec{v}(\vec{k}(t'))$$

Beispiel: $d=1$, tight-binding

$E_n(k) = -2W \cos ak \rightarrow v(k) = \frac{1}{\hbar} 2Wa \sin ak$

$\rightarrow x(t) = \int_0^t dt' \frac{2Wa}{\hbar} \sin\left(-\frac{aeEt'}{\hbar}\right) = \frac{2W}{eE} \left[\cos \frac{aeEt}{\hbar} - 1 \right] + x(0)$
 [t=0 ist so gewählt, dass $\vec{k}(0)=0$]



Periodisches Zonenschema

Bloch-Oszillationen: Blochelektronen oszillieren unter dem Einfluss eines homogenes elektrischen Feldes.

Folgt auch aus der Energie-Erhaltung!

$$\mathcal{E} = E_n(\vec{k}) + eEx = \text{const}$$

$\rightarrow$ Bild der geneigten Energie-Bänder



Schwierig zu beobachten (Relaxationszeiten ^{in Metallen} viel kürzer als die Periode der Oszillationen).
Wurden aber in Halbleiter-Übergittern beobachtet.

Bloch-Oszillationen ist ein Beispiel dafür, daß die Beschleunigung von Bloch-Elektronen der Kraft gerichtet werden kann. auch gegen

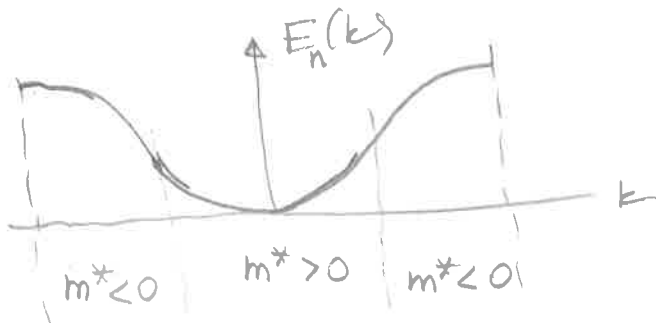
$$\frac{d\vec{v}_j}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_j} = \frac{1}{\hbar} \sum_i \frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial k_j \partial k_i} \frac{dk_i}{dt} = \sum_i (m^{*-1})_{ji} (-eE_i)$$

Zusammenhang mit der effektiven Masse!

$$\sum_j m^*_{ij} \frac{dv_j}{dt} = -eE_i \equiv F_i \text{ (Kraft)}$$

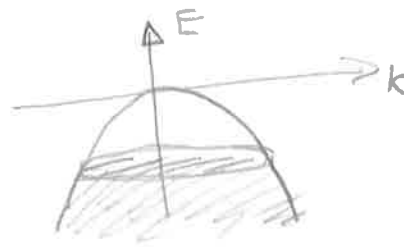
$m^{*-1} \rightarrow m^*$ Tensor-Inversion

m^* kann negative Eigenwerte haben!



Löcherkonzept

Fast gefülltes Band



$$E_n(k) = \text{const} + 2W(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad W > 0$$

$$\simeq \text{const} - Wa^2 \vec{k}^2$$

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2Wa^2} < 0$$

Vollständig gefülltes Band trägt nicht zum Transport (sowie zur thermodynamischen Größen) bei.

Beispiel: elektrische Stromdichte:

$$\vec{j} = -\frac{e}{V} 2 \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} \vec{v}(\vec{k}) = -2e \int_{1.BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) = 0,$$

Spin Band-Index

weil $E_n(\vec{k})$ eine periodische Funktion ist,
 $E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$ für alle $\vec{G} \in RG$

Ebenso ist der Energiestrom null:

$$\vec{j}_E = 2 \int_{1.BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} E_n(\vec{k}) \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) = \int_{1.BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{\nabla}_{\vec{k}} (E_n^2(\vec{k})) = 0$$

Damit ist es sinnvoll für ein fast gefülltes Band
das Konzept der Löcher einzuführen. Ein Loch =
= Fehlen eines Elektrons in einem gefüllten Band.

$$\vec{j} = -e \sum_s \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) = -e \underbrace{\sum_s \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k})}_{\text{gefülltes Band}} + e \sum_s \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k})_{\text{fehlende Elektronen}}$$

= 0

$$= +e \sum_{\text{Löcher}} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k})$$

→ Ein Loch hat die Ladung $e_h = +e$
Genauso: $\vec{k}_h = -\vec{k}$, $s_h = -s$, $E_{n,h}(\vec{k}_h) = \text{const} - E_n(\vec{k})$

$$\vec{v}_h = \vec{\nabla}_{\vec{k}_h} E_{n,h}(\vec{k}_h) = \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) = \vec{v}$$

[muss so sein: das Loch bewegt sich mit derselben Geschwindigkeit, als das entsprechende Elektron]

Effektive Masse:

$$(m_h^{*-1})_{ij} = \frac{\partial}{\partial k_{h,i}} \frac{\partial}{\partial k_{h,i}} E_{n,h}(\vec{k}_h) = -\frac{\partial}{\partial k_i} \frac{\partial}{\partial k_j} E_n(\vec{k}) = -(m^{*-1})_{ij}$$

$m_h^* = -m^*$. Das folgt auch aus der

Bewegungsgleichung:

$$\left. \begin{aligned} \sum_j (m^*)_{ij} \frac{dv_j}{dt} &= -eE_i && \text{Elektron} \\ \sum_j (m_h^*)_{ij} \frac{dv_j}{dt} &= +eE_i && \text{Loch} \end{aligned} \right\} \Rightarrow m_h^* = -m^*$$

← wir haben benutzt $v_h = v$

$\uparrow e_h$

2.4. Bloch-Elektronen im Magnetfeld

$$\frac{d}{dt} \vec{p}_{\text{kin}} = -e\vec{E} - \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B} \quad \vec{p}_{\text{kin}} = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}$$

$$H = E_n \left(\frac{\vec{p}}{\hbar} + \frac{e}{c\hbar} \vec{A} \right) - e\phi(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) - e\phi(\vec{r})$$

Wir betrachten die Bewegung in einem statischen homogenen $\vec{B}$ -Feld.

$$\vec{E} = 0: \quad \left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{k} &= -\frac{e}{\hbar c} \vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B} \\ \frac{d}{dt} \vec{r} &= \vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_j} \end{aligned} \right.$$

* Die Energie bleibt erhalten:

$$\frac{d}{dt} E_n = \underbrace{\vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k})}_{\hbar \vec{v}(\vec{k})} \cdot \underbrace{\frac{d\vec{k}}{dt}}_{-\frac{e}{\hbar c} \vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}} = 0 \quad \Rightarrow$$

* $\frac{d\vec{k}}{dt} \perp \vec{B} \Rightarrow \vec{k}(t)$ bleibt in der Ebene $\perp \vec{B}$
 $\vec{k} \cdot \vec{b} = \text{const}$, $\vec{b} = \vec{B}/|\vec{B}|$ - Einheitsvektor
 (z.B., falls $\vec{B} \parallel z$, dann die Ebenen sind $k_z = \text{const}$)

$\Rightarrow$ Die Bahnkurven $\vec{k}(t)$ sind Schnittkurven von Ebenen $\perp \vec{B}$ mit Energieflächen

Bahnkurve im Ortsraum $\vec{r}(t)$:

$$\vec{B} \times \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar c} \vec{B} \times (\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}) = -\frac{e}{\hbar c} [\vec{v}(\vec{k}) \vec{B}^2 - \vec{B}(\vec{B} \cdot \vec{v}(\vec{k}))]$$

$$= -\frac{eB^2}{\hbar c} \vec{v}_\perp$$

$$\vec{v}_\perp = \vec{v} - \vec{b}(\vec{v} \cdot \vec{b})$$

$\perp$ -Komponente der $\vec{v}$ bezüglich $\vec{B}$

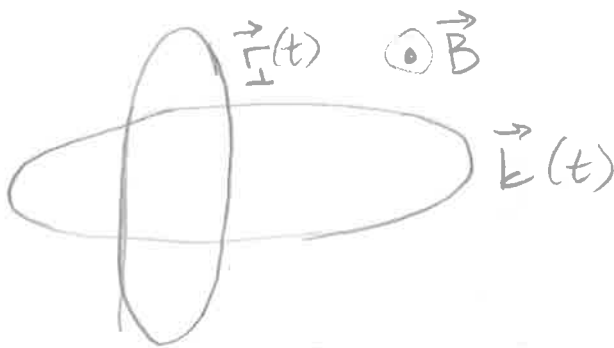
$$\rightarrow \vec{b} \times \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{eB}{\hbar c} \vec{v}_\perp$$

Integration $\int_0^t d\tilde{t} \rightarrow$

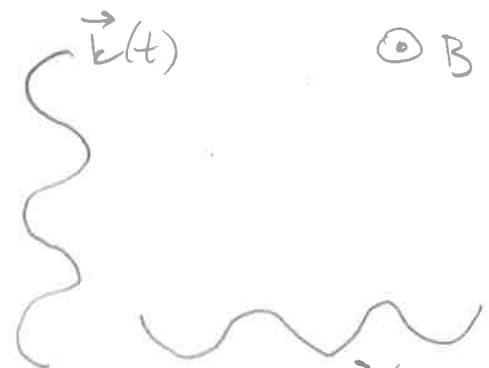
$$\rightarrow \vec{b} \times (\underbrace{\vec{k}(t) - \vec{k}(0)}_{= \vec{k}_\perp(t) - \vec{k}(0)}) = -\frac{eB}{\hbar c} (\vec{r}_\perp(t) - \vec{r}_\perp(0))$$

$\rightarrow$ Die Projektion der Bahnkurve $\vec{r}(t)$ auf eine Ebene $\perp \vec{B}$ ist gegeben durch die Bahnkurve im $\vec{k}$ -Raum skaliert mit $\frac{\hbar c}{eB}$ und gedreht um $\frac{\pi}{2}$ um Achse $\vec{B}$

* Bahnkurven im $\vec{k}$ -Raum (und damit auch im $\vec{r}_\perp$ -Raum) können geschlossen und offen sein



geschlossen



offen $\vec{r}_\perp(t)$

Zyklotronfrequenz

Geschlossene Bahnen $\rightarrow$ periodische Bewegung im $\vec{r}_\perp$ -Raum

Berechnung der Periode:

$$T = \oint dt$$

$$= \oint \frac{dk_e}{dk_e/dt} = \oint \frac{dk_e}{|\dot{\vec{k}}|} =$$

$$= \frac{\hbar c}{eB} \oint \frac{dk_e}{|\vec{V}_\perp|} = \frac{\hbar^2 c}{eB} \oint \frac{dk_e}{|(\vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k}))_\perp|}$$

$$= \frac{\hbar^2 c}{eB} \oint \frac{dk_e}{|\partial E / \partial k_\perp|_{k_z = \text{const}}} = \frac{\hbar^2 c}{eB} \oint dk_e \left| \frac{\partial k_\perp}{\partial E} \right|_{k_z = \text{const}}$$

$$= \frac{\hbar^2 c}{eB} \frac{\partial}{\partial E} S(E, k_z);$$

$$S(E, k_z) = \int_{\substack{E(\vec{k}) \leq E \\ k_z = \text{const}}} dk_e dk_\perp = \int dk_e \frac{dk_\perp}{dE} dE$$

Eingeschlossene Fläche im k-Raum

$$\Rightarrow T(E, k_z) = \frac{\hbar^2 c}{eB} \frac{\partial S(E, k_z)}{\partial E}$$

$$\omega_c(E, k_z) = \frac{2\pi}{T(E, k_z)} = \frac{eB}{m_c^*(E, k_z) c}$$

Zyklotronfrequenz

$$m_c^*(E, k_z) = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S(E, k_z)}{\partial E}$$

Effektive Zyklotronmasse

In einer allgemeinen Situation unterscheidet sich m_c^* von m^* :

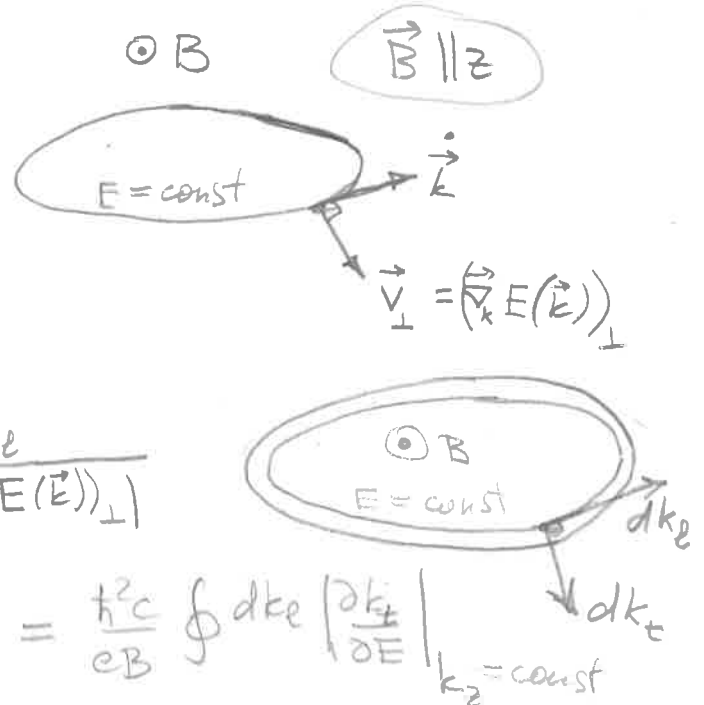
$m_{ij}^*(\vec{k})$ - Tensor ; $m_c^*(E, k_z)$ - keine Tensorstruktur

Für eine parabolische Dispersion

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} ; m_{ij}^* = m^* \delta_{ij} ;$$

$$m_c^* = m^*$$

Zyklotronresonanz - eine Methode, die Fermi-Fläche experimentell zu untersuchen. Eine bessere Methode: dHvA-Effekt ($\leftrightarrow$ Landau-Quantisierung)



Quasiklassische (Bohr-Sommerfeld-) Quantisierung

$$\vec{B} \parallel \vec{z}$$

$$I = \oint \vec{p}_\perp d\vec{r}_\perp = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$n=0,1,2,\dots$$

quasiklassische Quantisierungsbedingung
(Bohr-Sommerfeld)

$$\oint \vec{p}_\perp d\vec{r}_\perp = \oint \left(\hbar \vec{k}_\perp - \frac{e}{c} \vec{A}\right) d\vec{r}_\perp =$$

$$\hbar \vec{k}_\perp = -\frac{e}{c} \vec{r}_\perp \times \vec{B} + \text{const}$$

$$= -\frac{e}{c} \oint (\vec{r}_\perp \times \vec{B} + \vec{A}) d\vec{r}_\perp = \frac{e}{c} \underbrace{\vec{B} \oint \vec{r}_\perp \times d\vec{r}_\perp}_{B \oint (x dy - y dx)} - \frac{e}{c} \oint \vec{A} d\vec{r}_\perp$$

$$= \frac{e}{c} (2\Phi - \Phi) = \frac{e}{c} \Phi, \quad \Phi = BA - \text{eingeschlossener magnetischer Fluss}$$

↑
Fläche im $\vec{r}$ -Raum

B.-S.-Quantisierung: $I \equiv \frac{e}{c} \Phi = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)$

$$\rightarrow \Phi = \frac{hc}{e} \left(n + \frac{1}{2}\right) = \Phi_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \left[\Phi_0 = \frac{hc}{e} - \text{Flussquant} \right]$$

$n=0,1,\dots$

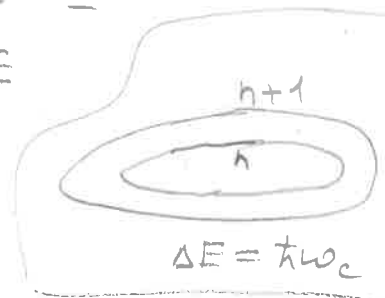
$$\rightarrow \text{Fläche } A^{(n)} = \frac{\Phi_0}{B} \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (\text{im } \vec{r}\text{-Raum})$$

$$\rightarrow \text{Fläche im } k\text{-Raum:}$$

$$S^{(n)} = \left(\frac{Be}{\hbar c}\right)^2 A^{(n)} = \frac{2\pi Be}{\hbar c} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$E^{(n+1)}(k_z) - E^{(n)}(k_z) \approx \frac{S^{(n+1)} - S^{(n)}}{\partial S(E, k_z) / \partial E} =$$

$$= \frac{2\pi Be / \hbar c}{2\pi m_c^* / \hbar^2} = \frac{\hbar e B}{m_c^* c} = \hbar \omega_c$$



→ Landau-Niveaus

Für ein parabolisches Band die quasiklassische Näherung ist exakt. Landau-Niveau-Quantisierung

→ Diamagnetismus, (werden später diskutiert).
dHvA-Effekt und weitere Magnetooszillationseffekte

3. Quantenstatistik und Thermodynamik des Elektronengases

3.1. Fermi-Dirac-Verteilung

Nicht-wechselwirkende Elektronen,
Energie-Niveaus $\epsilon_l(\vec{k})$, Bloch-Zustände $|\vec{k}\sigma\rangle$
↑
Band-Index

Vielteilchenzustände $|\{n_{\vec{k}\sigma}\}\rangle$; $n_{\vec{k}\sigma} = 0$ oder 1
 $H|\{n_{\vec{k}\sigma}\}\rangle = \underbrace{\sum_{\vec{k}\sigma} n_{\vec{k}\sigma} \epsilon_l(\vec{k})}_{E} |\{n_{\vec{k}\sigma}\}\rangle$ (Pauli-Prinzip)

Großkanonische Zustandssumme

$$Z_{GK} = \underbrace{\text{tr}}_{\text{Spur}(S_P)} e^{-\beta(H - \mu N)} =$$

N -Teilchenzahl $= \sum_{\vec{k}\sigma} n_{\vec{k}\sigma}$
 μ - chemisches Potential
 $\beta = 1/k_B T$

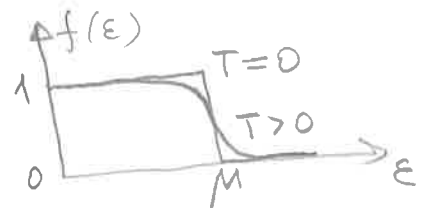
$$= \sum_{\{n_{\vec{k}\sigma}\}} e^{-\beta \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_l(\vec{k}) - \mu) n_{\vec{k}\sigma}} =$$

$$= \sum_{\{n_{\vec{k}\sigma}\}} \prod_{\vec{k}\sigma} e^{-\beta (\epsilon_l(\vec{k}) - \mu) n_{\vec{k}\sigma}} = \prod_{\vec{k}\sigma} (1 + e^{-\beta (\epsilon_l(\vec{k}) - \mu)})$$

Mittlere Besetzungszahl

$$\langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle = Z_{GK}^{-1} \sum_{\{n_{\vec{k}'\sigma'}\}} e^{-\beta [\epsilon_{l'}(\vec{k}') - \mu] n_{\vec{k}'\sigma'}} n_{\vec{k}\sigma} =$$

$$= \frac{e^{-\beta (\epsilon_l(\vec{k}) - \mu)}}{1 + e^{-\beta (\epsilon_l(\vec{k}) - \mu)}} = f(\epsilon_l(\vec{k})) ;$$



$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

Fermi-Dirac-Verteilung
 $\mu(T=0) = E_F$ (Fermi-Energie)

$$\Omega = -k_B T \ln Z_{GK} = -k_B T \sum_{\vec{k}\sigma} \ln \left[1 + e^{-\frac{\epsilon_{\vec{k}} - \mu}{k_B T}} \right]$$

- großes Potential ; $\Omega = \Omega(T, V, \mu)$

Gesamte Teilchenzahl

$$\langle N \rangle = \sum_{\vec{k}\sigma} \langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle = \sum_{\vec{k}\sigma} f(\epsilon_{\vec{k}}) = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$$

— definiert (implizit) μ , falls N vorgegeben ist

3.2. Zustandsdichte

Für thermodynamische Größen wichtig ist nicht die volle Dispersionsrelation $\epsilon_{\vec{k}}$, sondern nur die elektronische Zustandsdichte (Anzahl der Zustände in einem Energie-Intervall)

$$\gamma(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}})$$

$$= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_{\sigma} \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}})$$

V - Volumen des Systems

Damit lassen sich Summen in ϵ -Integralen transformieren:

$$\sum_{\vec{k}\sigma} F(\epsilon_{\vec{k}}) = \sum_{\vec{k}\sigma} \int d\epsilon F(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{k}}) =$$

(F -beliebige Funktion)

$$= V \int d\epsilon \gamma(\epsilon) F(\epsilon)$$

Zustandsdichte für freie Fermionen $\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (oder allgemeiner für ein parabolisches Band, $m \rightarrow m^*$):

3D:

- 46 -

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(\epsilon) &= 2 \int_{\uparrow \text{Spin}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \delta(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) = \\ &= 2 \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty dk k^2 \delta(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) = \frac{1}{\pi^2} \frac{m}{\hbar^2} k_\epsilon = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m\epsilon} \end{aligned}$$

$\mathcal{V}(\epsilon) \propto \sqrt{\epsilon}$ an der Bandkante - charakteristisch für 3D
(Wurzelsingularität)

$$\underline{2D}: \quad \mathcal{V}(\epsilon) = 2 \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \delta(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \Theta(\epsilon)$$

Sprung

$$\underline{1D}: \quad \mathcal{V}(\epsilon) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \delta(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) = \frac{2}{\pi} \frac{m}{\hbar^2 |k_\epsilon|} =$$

$$= \frac{2}{\pi} \frac{m}{\hbar \sqrt{2m\epsilon}} = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{\epsilon}}$$

$\epsilon^{-1/2}$ - Singularität

Zurück zu 3D.

Allgemein lässt sich die Zustandsdichte als ein Oberflächenintegral über eine Fläche konstanter Energie ausdrücken:

$$\mathcal{V}(\epsilon) = \sum_{\ell} \mathcal{V}_{\ell}(\epsilon) ;$$

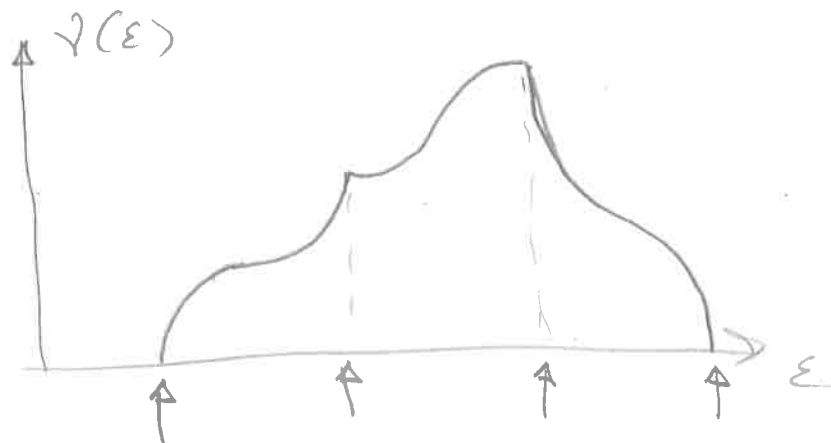
$$\mathcal{V}_{\ell}(\epsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{ds}{|\nabla \epsilon_{\ell}(\vec{k})|} = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \int \frac{ds}{|\vec{v}_{\ell}(\vec{k})|}$$

$S_{\ell}(\epsilon)$ ↑ Geschwindigkeit

→ Verallgemeinerung der Bandkanten-Singularitäten:

Singularitäten bei Energien ϵ , für die $\vec{k}$ -Werte gibt mit $\epsilon_{\ell}(\vec{k}) = \epsilon$ und $\nabla \epsilon_{\ell}(\vec{k}) = 0$

- van-Hove-Singularitäten



van-Hove -
Singularitäten
in 3D

→ Anomalien im Verhalten der thermodynamischen Größen bei tiefen Temperaturen

3.3. Spezifische Wärme

$$\text{Innere Energie } U = \sum_{\vec{k}, \sigma} \langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle \varepsilon_{\vec{k}} =$$

$$= \sum_{\vec{k}, \sigma} f(\varepsilon_{\vec{k}}) \varepsilon_{\vec{k}} = V \int d\varepsilon g(\varepsilon) f(\varepsilon) \varepsilon$$

$$k_B T \ll E_F$$

→ Sommerfeld-Entwicklung: wir wollen berechnen

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) H(\varepsilon),$$

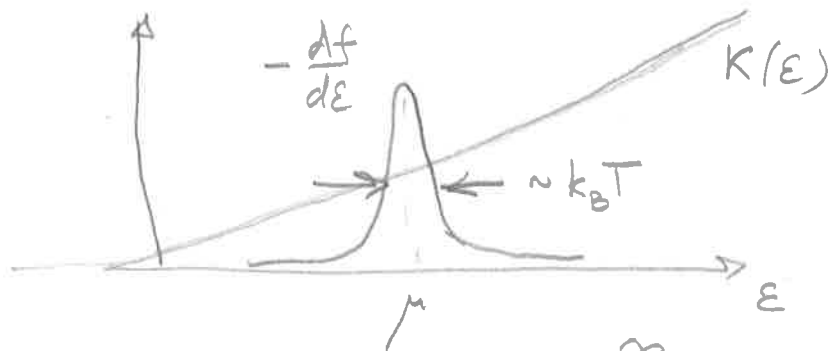
wobei $H(\varepsilon)$ eine analytische Funktion, langsam variierende (im Vergleich mit $f(\varepsilon)$) in der Nähe von $\varepsilon = \mu$, $H(\varepsilon \rightarrow -\infty) = 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) H(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{df}{d\varepsilon} \right) K(\varepsilon);$$

$$K(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon} d\tilde{\varepsilon} H(\tilde{\varepsilon}) \quad (\text{Stammfunktion zu } H(\varepsilon))$$

$$-\frac{df}{d\varepsilon} = \beta \frac{1}{[e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1][e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + 1]}$$

$$= f(1-f)$$



$$-\frac{df}{d\varepsilon} \rightarrow \delta(\varepsilon - \mu) \quad \text{im Limes } T \rightarrow 0$$

$$K(\varepsilon) = K(\mu) + \sum_{h=1}^{\infty} \frac{1}{h!} (\varepsilon - \mu)^h \left. \frac{d^h K(\varepsilon)}{d\varepsilon^h} \right|_{\varepsilon=\mu}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) H(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon H(\varepsilon) + \sum_{h=1}^{\infty} \frac{d^{h-1} H(\varepsilon)}{d\varepsilon^{h-1}} \bigg|_{\varepsilon=\mu} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{(\varepsilon - \mu)^h}{h!} \left(-\frac{df}{d\varepsilon}\right) =$$

$$\int d\varepsilon \frac{(\varepsilon - \mu)^h}{h!} \left(-\frac{df}{d\varepsilon}\right) = \begin{cases} 0, & h - \text{ungerade Zahl} \\ a_m (k_B T)^{2m}, & h = 2m - \text{gerade Zahl} \end{cases}$$

$$a_m = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^{2m}}{(2m)!} \frac{1}{(e^x + 1)(e^{-x} + 1)} = \left[2 - \frac{1}{2^{2(m-1)}} \right] \mathcal{J}(2m)$$

$$a_1 = \mathcal{J}(2) = \frac{\pi^2}{6} \quad ; \quad a_2 = \frac{7}{4} \mathcal{J}(4) = \frac{7\pi^4}{360}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon H(\varepsilon) + \sum_{h=1}^{\infty} a_h (k_B T)^{2h} \left. \frac{d^{2h-1} H(\varepsilon)}{d\varepsilon^{2h-1}} \right|_{\varepsilon=\mu}$$

Sommerfeld - Entwicklung
(in Potenzen von $(k_B T / \varepsilon_F)^2$)

Innere Energie:

$$u = \frac{U}{V} = \int d\varepsilon f(\varepsilon) \nu(\varepsilon) \varepsilon \quad \rightarrow \quad H(\varepsilon) = \varepsilon \nu(\varepsilon)$$

$$u = \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon \varepsilon \nu(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \underbrace{\left. \frac{d}{d\varepsilon} [\varepsilon \nu(\varepsilon)] \right|_{\varepsilon=\mu}}_{= \nu(\mu) + \mu \nu'(\mu)} + O(T^4)$$

$$\mu - \epsilon_F \propto (k_B T)^2 \rightarrow \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon \epsilon \nu(\epsilon) \simeq \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon \nu(\epsilon) + (\mu - \epsilon_F) \epsilon_F \nu(\epsilon_F)$$

$$\rightarrow u \simeq \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon \nu(\epsilon) + (\mu - \epsilon_F) \epsilon_F \nu(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 [\nu(\epsilon_F) + \epsilon_F \nu'(\epsilon_F)]$$

Analog für Elektronendichte $n_e = \int d\epsilon \nu(\epsilon) f(\epsilon)$:

$$n_e \simeq \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon \nu(\epsilon) + (\mu - \epsilon_F) \nu(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \nu'(\epsilon_F)$$

Wir wollen C_V bestimmen $\rightarrow n_e$ fest
(T -unabhängig)

$$\rightarrow (\mu - \epsilon_F) \nu(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \nu'(\epsilon_F) = 0$$

$$\rightarrow \boxed{\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\nu'(\epsilon_F)}{\nu(\epsilon_F)}}$$

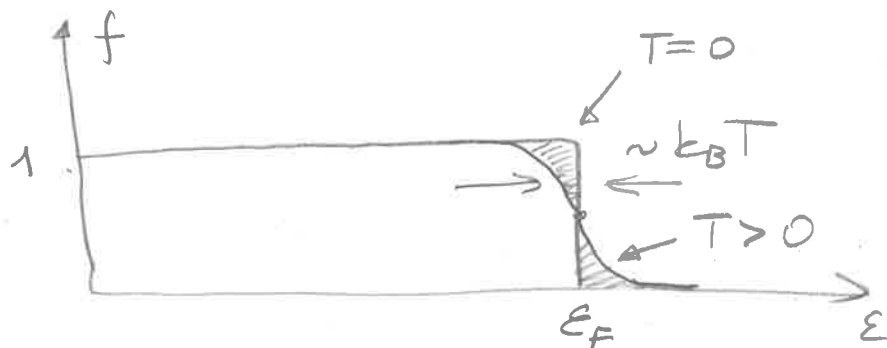
$$\rightarrow u = u_0 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \nu(\epsilon_F)$$

($n_e = \text{const}$)
 $u_0 = u(T=0)$
 $= \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon \nu(\epsilon)$

$$\rightarrow \boxed{C_V = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_{n_e} = \frac{\pi^2}{3} \nu(\epsilon_F) k_B^2 T}$$

$\Rightarrow$ für ein Metall ($\nu(\epsilon_F) \neq 0$) $C_V \propto T$
bei tiefen Temperaturen

Man kann dieses Resultat qualitativ (ohne numerischen Koeffizienten) schnell bekommen:



$$k_B T \ll \epsilon_F$$

$u = U/V$; U - innere Energie

$$U - U_0 \sim \underbrace{\gamma(\epsilon_F) k_B T}_{\text{Dichte der Elektronen, die angeregt werden}} \cdot \underbrace{k_B T}_{\text{typische Anregungsenergie}} = \gamma(\epsilon_F) (k_B T)^2$$

$C_V = \partial U / \partial T$ - spezifische Wärme

$$\rightarrow C_V \sim \gamma(\epsilon_F) k_B^2 T$$

Für ein parabolisches Band

$$\gamma(\epsilon) = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m^* \epsilon}$$

$$n_e = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \gamma(\epsilon) = \frac{2}{3} \epsilon_F \gamma(\epsilon_F)$$

$$\Rightarrow \gamma(\epsilon_F) = \frac{3}{2} \frac{n_e}{\epsilon_F}$$

$$\rightarrow C_V = \frac{\pi^2}{2} \cdot \frac{k_B T}{\epsilon_F} \cdot n_e k_B$$

Vergleichen mit dem Ergebnis für ein klassisches ideales Gas : $C_{V,cl} = \frac{3}{2} n_e k_B$

$$\rightarrow \frac{C_V}{C_{V,cl}} = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k_B T}{\epsilon_F}$$

Typische Werte von $T_F \equiv \frac{\epsilon_F}{k_B}$ in Metallen: $T_F \sim 2 \cdot 10^4 \div 10^5 \text{ K}$
 $(\Leftrightarrow \epsilon_F \sim 2 \div 10 \text{ eV} \sim 1 \text{ Ry})$

$\Rightarrow k_B T / \epsilon_F \sim \frac{1}{70} \div \frac{1}{300} \ll 1$ für Raumtemperaturen
 (und noch kleiner für tiefe Temperaturen)

$$\frac{C_V}{C_{V,cl}} \sim \frac{k_B T}{\epsilon_F} \ll 1 \quad \text{wegen der Entartung (nur } k_B T / \epsilon_F \text{ von Elektronen nehmen teil)}$$

Experimentelle Bestimmung von $\gamma(E_F)$:

$$C_V = \gamma T + AT^3$$

$$\frac{C_V}{T} = \gamma + AT^2, \quad \gamma = \frac{\pi^2}{3} \gamma(E_F) k_B^2$$



Messung von $\gamma \rightarrow \gamma(E_F)$

Für ein parabolisches Band $\gamma(E_F) = \left(\frac{3ne}{\pi^4} \right)^{1/3} \frac{m^*}{\hbar^2}$

Man definiert oft in der allgemeinen Situation (beliebiges Spektrum) eine effektive Masse für die spezifische Wärme m_{sh}^* :

$$\gamma(E_F) \equiv \left(\frac{3ne}{\pi^4} \right)^{1/3} \frac{m_{sh}^*}{\hbar^2} \quad \leftarrow \text{specific heat}$$

(unterscheidet sich vom Tensor $m^*(\vec{E})$ und von der Zyklotron-Masse $m_c^*(E, k_z)$). Messung der sp. Wärme bei $T \rightarrow 0$:

$$\rightarrow \gamma \rightarrow \gamma(E_F) \rightarrow m_{sh}^*.$$

Koeffizient A: Elektronischer Beitrag:

Sommerfeld-Entwicklung in $(k_B T / E_F)^2 \Rightarrow$

$$\Rightarrow \left. \frac{C_V}{T} \right|_{el} = \gamma \left(1 + \underbrace{\left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2}_{\sim 1} + \dots \right)$$

$$\Rightarrow A_{el} \sim \gamma \left(\frac{k_B}{E_F} \right)^2 \sim k_B n e \cdot \left(\frac{k_B}{E_F} \right)^3$$

kleine Korrekturen für alle $k_B T \ll E_F$

-52-

Experiment: $AT^2 \sim \gamma$ schon bei $T \sim 1 \div 5 \text{ K}$

→ A grösser als A_{el} um viele Größenordnungen:
 $A/A_{el} \sim 10^8!$

Phononenbeitrag! (wird später diskutiert)

4. Festkörper im äußeren Magnetfeld: Paramagnetismus und Diamagnetismus

4.1. Ankopplung von Magnetfeldern, magnetische Suszeptibilität

Elektron in einem (statischen) Magnetfeld:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r})$$

1) $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}$ orbitale Ankopplung (Ladung $-e$; $e > 0$)

2) - ^{Zeeman-}Beitrag zum Hamilton-Operator

$$\Delta H = g \mu_B \vec{S} \cdot \vec{H}, \quad \vec{S} = \frac{\vec{\sigma}}{2} - \text{Spin}$$

μ_B - das Bohrsche Magneton, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$

$$g = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots\right) = 2.0023 \simeq 2 - \text{elektronischer } g\text{-Faktor}$$

Magnetisierung $\vec{M}$; $\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M}$

Magnetische Suszeptibilität: $\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{\vec{H}=0}$

Für kleine $\vec{H}$: $\vec{M} = \chi \vec{H}$

$$\rightarrow \vec{B} = (1 + 4\pi\chi) \vec{H} \equiv \mu_m \vec{H} \quad \mu_m - \text{magnetische Permeabilität}$$

$$\vec{M} = \frac{\chi}{\mu} \vec{B} = \frac{\chi}{1 + 4\pi\chi} \vec{B} \quad [\simeq \chi \vec{B} \text{ falls } \chi \ll 1]$$

Freie Energie $F(T, V, H)$; $dF = -SdT - PdV - \vec{M}d\vec{H}$ ($N = \text{const}$)

oder, im großkanonischen Ensemble, großes Potential $\Omega(T, V, \mu, H)$;

$$d\Omega = -SdT - PdV - Nd\mu - \vec{M}d\vec{H}$$

Magnetisierung $M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_{T,V}$ oder $-\left(\frac{\partial \Omega}{\partial H}\right)_{T,\mu,V}$

Suszeptibilität $\chi = -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2}\right)_{H=0,T,V}$ oder $-\left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial H^2}\right)_{H=0,T,\mu,V}$

4.2. Paramagnetismus lokalisierter magnetischer Momente : Curie - Gesetz

Lokalisierte Atome oder Ionen mit nicht vollständig gefüllten Elektronenschalen. Jeder besitzt einen Drehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ und damit ein magnetisches Moment $\vec{\mu} = -g\mu_B \vec{J}$

$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$ (Lande' g-Faktor, folgt aus der Theorie des Drehimpulses)

z.B. $\vec{L} = 0$, $\vec{J} = \vec{S} \rightarrow g = 2$ wie für Spin einer Elektrons

Hamilton-Operator $\mathcal{H} = -\sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{H} = \sum_i g\mu_B J_{z,i} H$

Zustandssumme $Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} = \prod_i \sum_{J_{z,i}=-J}^J e^{-g\mu_B J_{z,i} H \beta} = Z_1^N$

$Z_1 = \sum_{J_z=-J}^J e^{-g\mu_B J_z H \beta} = \frac{e^{(J+\frac{1}{2})g\mu_B H \beta} - e^{-(J+\frac{1}{2})g\mu_B H \beta}}{e^{\frac{1}{2}g\mu_B H \beta} - e^{-\frac{1}{2}g\mu_B H \beta}}$

Freie Energie $F = -k_B T \ln Z = -N k_B T \ln Z_1$

$M = -\partial F / \partial H = N g \mu_B J B_J(g\mu_B J H \beta)$;

$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} x\right) - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2J}$ Brillouin-Funktion

$x \rightarrow 0$: $\coth x \approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + \dots \rightarrow B_J(x) \approx \left(1 + \frac{1}{J}\right) \frac{x}{3}$

$$\Rightarrow \text{für } g\mu_B H \ll k_B T \text{ gilt } M \simeq N \frac{(g\mu_B)^2 J(J+1)}{3k_B T} H$$

$\Rightarrow$ Suszeptibilität pro Einheitsvolumen

$$\chi = \frac{1}{V} \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H \rightarrow 0} = \frac{N}{V} \frac{(g\mu_B)^2 J(J+1)}{3k_B T} \propto \frac{1}{T}$$

Curie - Gesetz

4.3. Pauli - Paramagnetismus von Leitungselektronen

Bewegliche Elektronen.

Nur die Kopplung des Magnetfeldes an den Elektronenspin wird berücksichtigt.

$$H = H_0 + H_{\text{zeeman}}; \quad H_{\text{zeeman}} = \sum_i \frac{g\mu_B \vec{H} \cdot \vec{\sigma}_i}{2} \quad (g=2)$$

2. Quantisierung

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma=\pm 1/2} \epsilon(\vec{k}) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \mu_B H \sum_{\vec{k}} (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow})$$

$$= \sum_{\vec{k}} [\epsilon(\vec{k}) + \mu_B H] c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + \sum_{\vec{k}} [\epsilon(\vec{k}) - \mu_B H] c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}$$

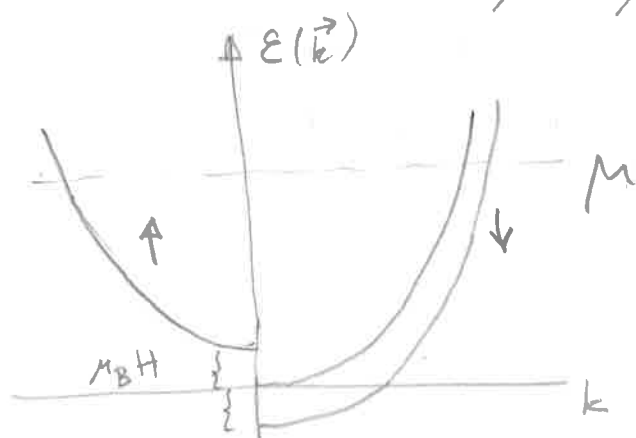
$\rightarrow$ entspricht einer Verschiebung des chemischen Potentials

$$\mu \rightarrow \mu - \mu_B H$$

für Spin $\uparrow$

$$\mu \rightarrow \mu + \mu_B H$$

für Spin $\downarrow$



Magnetisierung

$$M = -\frac{1}{V} \mu_B \sum_{\vec{k}} (\langle C_{k\uparrow}^+ C_{k\uparrow} \rangle - \langle C_{k\downarrow}^+ C_{k\downarrow} \rangle)$$

$$\equiv -\mu_B (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$$

Spin ↑ -
Elektronendichte

$$H=0: n = \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f(\varepsilon)$$

$$n_{\uparrow} = \frac{1}{2} \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f(\varepsilon + \mu_B H)$$

$$\approx \frac{1}{2} \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f(\varepsilon) + \frac{1}{2} \mu_B H \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f'(\varepsilon)$$

$$n_{\downarrow} = \frac{1}{2} \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu_B H)$$

$$\approx \frac{1}{2} \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f(\varepsilon) - \frac{1}{2} \mu_B H \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f'(\varepsilon)$$

$$n_{\downarrow} + n_{\uparrow} = \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f(\varepsilon) = n_{H=0}$$

$$M = -\mu_B^2 H \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f'(\varepsilon) \approx -\mu_B^2 H \nu(\varepsilon_F) \underbrace{\int d\varepsilon f'(\varepsilon)}_{=-1} =$$

$$= \mu_B^2 H \nu(\varepsilon_F)$$

$$\rightarrow \boxed{\chi_{\text{Pauli}} = \mu_B^2 \nu(\varepsilon_F)}$$

Pauli
paramagnetische
Suszeptibilität

T-unabhängig bei $T \rightarrow 0$

Vergleichen χ_{Pauli} mit χ_{Curie} :

$$\chi_{\text{Curie}} \sim n \mu_B^2 / k_B T$$

$$\chi_{\text{Pauli}} \sim \nu(\varepsilon_F) \mu_B^2 \sim n \mu_B^2 / \varepsilon_F \quad \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{\chi_{\text{Pauli}}}{\chi_{\text{Curie}}} \sim \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \ll 1$$

analog zu spezif. Wärme:

$$C_v / C_{v,cl} \sim \frac{k_B T}{\varepsilon_F}$$

4.4. Landau - Diamagnetismus

Orbitale Ankopplung des Magnetfeldes

Bohr - van Leeuwen - Theorem: keine Magnetisierung
in einer klassischen Theorie

Beweis

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N, \vec{p}_1 \dots \vec{p}_N) = \sum \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$$

$$Z = \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N e^{-\beta \mathcal{H}} = e^{-\beta \Omega}$$

Magnetfeldankopplung: $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i)$

Verschiebung der Integrationsvariabel $\vec{p}_i$ eliminiert
den Effekt des Magnetfeldes $\vec{A}$

$\Rightarrow \Omega$ ist unabhängig vom Magnetfeld

$\Rightarrow$ keine Magnetisierung im thermodynamischen
Gleichgewicht!

Gilt nur klassisch.

Quanteneffekte $\rightarrow$ orbitale magnetische
Suszeptibilität (Landau)

Landau - Diamagnetismus

Jetzt wird nur orbitale Ankopplung des Magnetfeldes berücksichtigt. Um die Rechnung zu vereinfachen, Annahme einer parabolischen Dispersion $\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$.

$$\vec{H} \parallel z \rightarrow \vec{A} = (0, Hx, 0)$$

$$H \approx B$$

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} + \frac{ieH}{\hbar c} x \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] ; \mathcal{H}\psi = E\psi$$

Ansatz: $\psi(x, y, z) = \phi(x) e^{ik_y y} e^{ik_z z}$

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \left(ik_y + \frac{ieH}{\hbar c} x \right)^2 \phi - k_z^2 \phi \right] e^{ik_y y + ik_z z} = E \phi \cdot e^{ik_y y + ik_z z}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k_y + \frac{eH}{\hbar c} x \right)^2 \phi = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right) \phi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{m^* \omega_c^2}{2} (x - x_0)^2 \phi = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right) \phi$$

$$x_0 = -\frac{\hbar c}{eH} k_y \equiv -l_H^2 k_y ; \quad \omega_c = \frac{eH}{m^* c}$$

l_H mag. Länge

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Landau - Niveaus
 $n = 0, 1, 2, \dots$

Anzahl der Zustände (Entartung eines Landau - Niveaus):

$$V = L_x L_y L_z$$

$$k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z}, \quad n_z \in \mathbb{Z} ;$$

$$k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, \quad n_y \in \mathbb{Z}$$

periodische Randbedingungen in y und z Richtungen

$$x_0 = -\frac{\hbar c}{eH} k_y \in [0, L_x] \Rightarrow k_y^{\max} - k_y^{\min} = \frac{eH}{\hbar c} L_x$$

$\Rightarrow$ Anzahl der Zustände in einem Landau-Niveau für ein gegebenes k_z :

$$\frac{eH}{\hbar c} L_x \cdot \frac{1}{2\pi/L_y} = \frac{eH}{2\pi\hbar c} L_x L_y$$

Anzahl der Zustände in einem Landau-Niveau in einem Intervall dk_z :

$$dN = \frac{eH}{2\pi\hbar c} L_x L_y \cdot \frac{dk_z \cdot L_z}{2\pi} = \frac{eH}{(2\pi)^2 \hbar c} V \cdot dk_z$$

Großes Potential

$$\Omega = -k_B T \frac{L_x L_y}{2\pi} \frac{eH}{\hbar c} \sum_{n, k_z} \ln \left\{ 1 + \exp \left[\beta \left(\mu - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} - \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right) \right] \right\}$$

$$\sum_{k_z} \rightarrow \frac{L_z}{2\pi} \int dk_z \dots$$

$$\Omega = - \frac{k_B T eH V}{(2\pi)^2 \hbar c} \sum_{h=0}^{\infty} F\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \left\{ 1 + \exp \left[\beta \left(\mu - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} - \hbar \omega_c x \right) \right] \right\}$$

$\hbar \omega_c \ll k_B T \rightarrow$ Näherung:

$$\sum_{n=0}^{\infty} F\left(n + \frac{1}{2}\right) = \int_0^{\infty} dx F(x) + \frac{1}{24} F'(0) + \dots \quad \text{Euler-Maclaurinsche Summenformel}$$

$$F(x) \equiv g(\mu - \hbar \omega_c x) \quad ; \quad g(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \left\{ 1 + \exp \left[\beta \left(y - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right) \right] \right\}$$

$$\int_0^{\infty} dx F(x) = \frac{1}{\hbar \omega_c} \int_{-\infty}^{\mu} dy g(y) \quad ; \quad F'(0) = -\hbar \omega_c g'(\mu)$$

$$\Omega = - \underbrace{\frac{k_B T V m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\mu} dy g(y)}_{\Omega_0 \text{ (H-unabhängig)}} + \underbrace{\frac{1}{24} \frac{k_B T V m^*}{(2\pi\hbar)^2} (\hbar\omega_c)^2 g'(\mu)}_{\delta\Omega}$$

$$\delta\Omega = -\frac{1}{24} (\hbar\omega_c)^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} = -\frac{1}{24} \left(\frac{\hbar e H}{m^* c} \right)^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2}$$

$$\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial H^2} = \frac{1}{V} \frac{1}{12} \left(\frac{e\hbar}{m^* c} \right)^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2}$$

$$\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\frac{N}{V} = -n$$

$$\frac{1}{V} \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} = -\frac{\partial n}{\partial \mu} = -\frac{\partial}{\partial \mu} \int d\varepsilon \gamma(\varepsilon) f_{\mu}(\varepsilon) = \int d\varepsilon \gamma(\varepsilon) f'_{\mu}(\varepsilon) \approx -\gamma(\varepsilon_F)$$

$$\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{12} \left(\frac{e\hbar}{m^* c} \right)^2 \gamma(\varepsilon_F) = -\frac{1}{3} \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 \mu_B^2 \gamma(\varepsilon_F)$$

Vergleichen mit

Landau - Diamagnetismus

$$\chi_{\text{Pauli}} = \mu_B^2 \gamma(\varepsilon_F)$$

$$\rightarrow \chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3} \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 \chi_{\text{Pauli}}$$

4.5. De-Haas-van-Alphen-Effekt

Landau-Quantisierung
der Elektronen im Magnetfeld

$H \rightarrow 0 \rightarrow$ Diamagnetismus, siehe oben

Stärkere
Magnetfelder
($\mu_B H \gtrsim k_B T$)

periodische Variation
von thermodynamischen
und Transportgrößen
als Funktionen von $1/H$
- Quantenmagnetooszillationen

Periodische Variation

$M(1/H)$

$\uparrow$ Magnetisierung

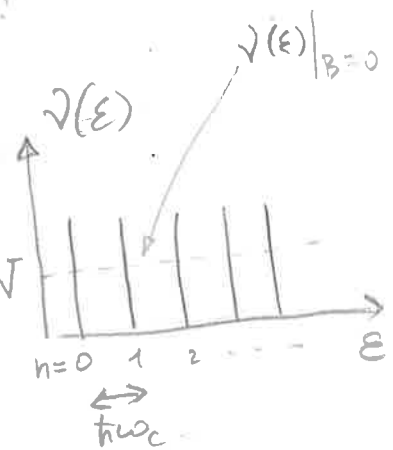
de Haas-van Alphen-Effekt

Wir betrachten zunächst freie Elektronen
2D ($p_z = 0$) - einfachere Rechnung:

Landau - Niveaus:

$$\varepsilon_n = \hbar \omega_c (n + 1/2), \quad \omega_c = eH/mc$$

Entartung jedes Niveaus: $\frac{eH}{2\pi\hbar c} L_x L_y \equiv \frac{H}{\Phi_0} V$



$$\nu(\varepsilon) = \frac{eH}{2\pi\hbar c} \sum_{n=0}^{\infty} \delta(\varepsilon - \hbar \omega_c (n + 1/2))$$

2D-Elektronendichte: n_e

Nehmen wir an, dass p Landau - Niveaus vollständig gefüllt sind, und das $(p+1)$ -te Niveau teilweise gefüllt ist:

$$p \frac{H}{\Phi_0} < n_e < (p+1) \frac{H}{\Phi_0} \quad ; \quad T=0$$

$$E = \sum_{j=0}^{p-1} \hbar \omega_c (j + 1/2) \cdot \frac{H}{\Phi_0} + (n_e - p \frac{H}{\Phi_0}) \hbar \omega_c (p + 1/2)$$

$$= - (p^2 + p) \frac{e^2 H^2}{4\pi m c^2} + (p + 1/2) n_e \frac{\hbar e H}{mc}$$

$$M = - \frac{\partial E}{\partial H} = (p^2 + p) \frac{e^2 H}{2\pi m c^2} - n_e (p + 1/2) \frac{e \hbar}{mc}$$

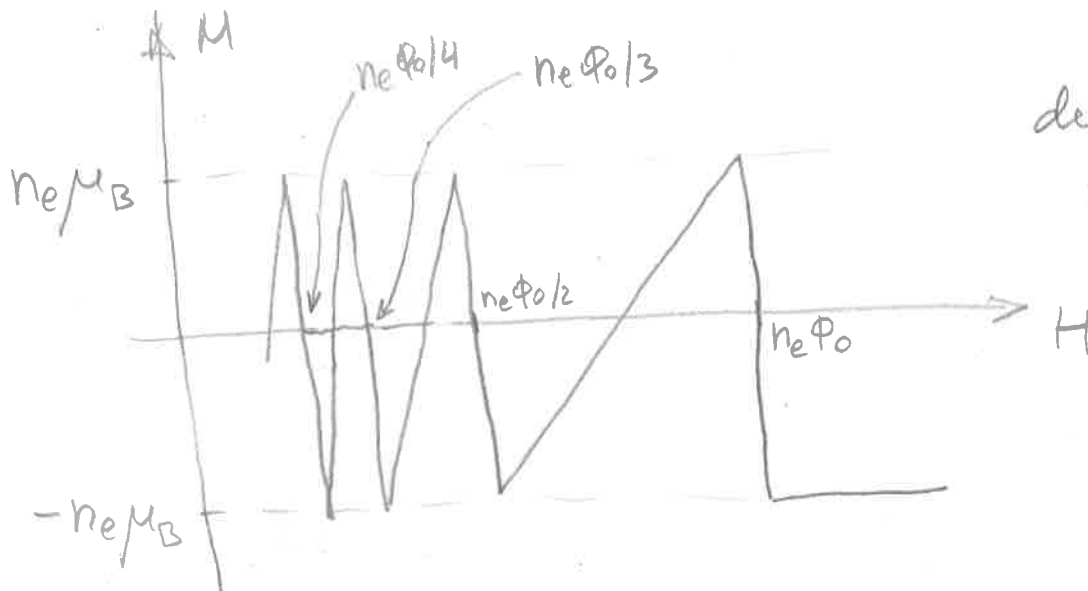
$$= 2(p^2 + p) \frac{\mu_B H}{\Phi_0} - 2 n_e (p + 1/2) \mu_B$$

- lineare H -Abhängigkeit

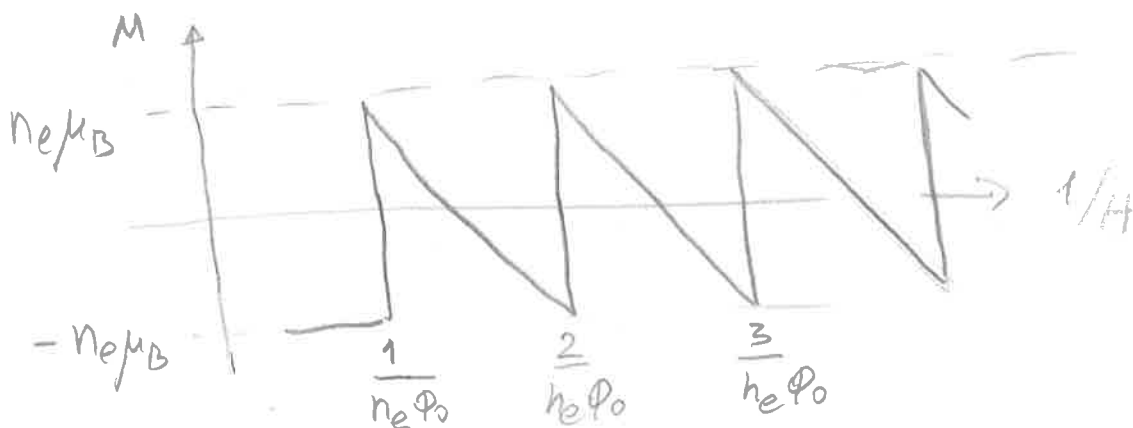
Werte an den Grenzen des Intervalls:

$$n_e = p \frac{H}{\Phi_0} \rightarrow M = p \frac{\mu_B H}{\Phi_0} = \mu_B n_e$$

$$n_e = (p+1) \frac{H}{\Phi_0} \rightarrow M = - (p+1) \frac{\mu_B H}{\Phi_0} = - \mu_B n_e$$



de-Haas-van-Alphen-Oszillationen

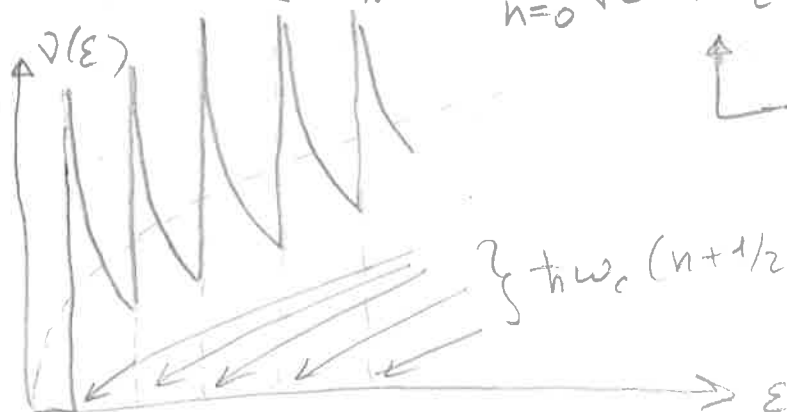


Oszillationen periodisch in $1/H$!

$$\Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{1}{n_e \Phi_0} = \frac{e}{2\pi \hbar c n_e}$$

3D: $\epsilon = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$

$$\nu(\epsilon) = \frac{m^{3/2}}{2^{5/2} \pi^2 \hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\omega_c}{\sqrt{\epsilon - \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)}} \Theta\left(\epsilon - \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)$$



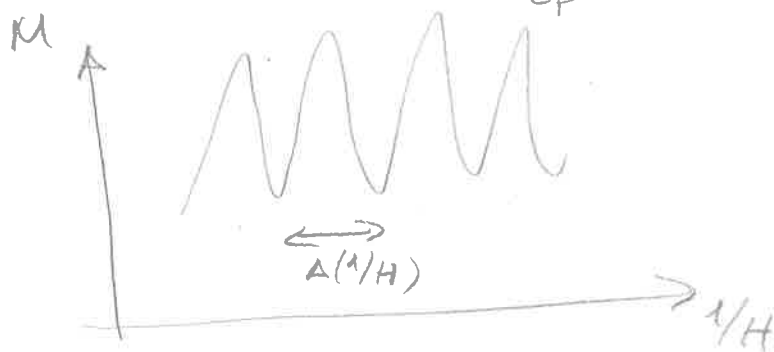
$1/\sqrt{\epsilon}$ - Singularität (van Hove) charakteristisch für 1D (k_z)

$$\left\{ \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right), n = 0, 1, \dots \right.$$

→ Oszillationen in der Magnetisierung (und anderen Größen), wie in 2D.

Singularitäten an $\hbar \omega_c (n + 1/2) = \epsilon_F$

$$\rightarrow \frac{1}{\omega_c} = \frac{\hbar}{\epsilon_F} (n + 1/2) \rightarrow \Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{e\hbar}{m c \epsilon_F} = \frac{2e}{\hbar c k_F^2} = \frac{4\pi}{\Phi_0 k_F^2}$$



Allgemeine Dispersion:

quasiklassische Quantisierung der Zyklotronbahnen

→ Landau-Niveaus

Fläche in k -Raum $\rightarrow S(\epsilon, k_z) = \frac{2\pi e H}{\hbar c} (n + 1/2)$

$$\Rightarrow \Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar c S(\epsilon_F, k_z)}$$

Überlagerung von oszillierenden Beiträgen mit verschiedenen k_z . Stationäre Phase → die Werte von k_z , für die $S(\epsilon_F, k_z)$ ein Extremum hat

$$\rightarrow \Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar c S_{\text{extr}}^{(j)}(\epsilon_F)} \quad j=1, \dots, N_{\text{extr}}$$

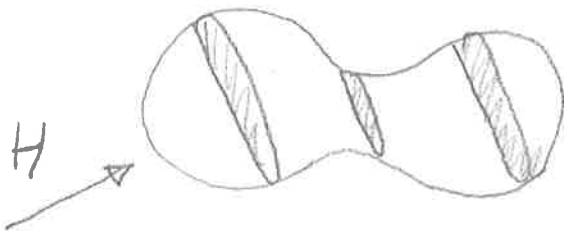
Anzahl von Extrema

Parabolische Dispersion:



$$S_{\text{extr}} = \pi k_F^2 \rightarrow \text{die Formel oben für } \Delta(1/H)$$

Kompliziertere Situationen: mehrere $S_{\text{extr}}^{(j)}$



dHvA - Effekt - eine sehr effiziente Methode, die Struktur der Fermifläche experimentell zu bestimmen.

* Oszillationen auch in Transportgrößen.

Leitfähigkeit $\sigma(H)$
oder Widerstand $\rho_{xx}(H)$
- Shubnikov-de Haas - Oszillationen



Hall - Widerstand $\rho_{xy}(H)$



→ Quanten-Hall-Effekt
Anderson-Lokalisierung wichtig!

* $T > 0 \rightarrow$ Dämpfung der Oszillationen im Bereich von kleinen H

Dämpfungsfaktor $\sim \exp\left(-2\pi^2 \frac{k_B T}{\hbar \omega_c}\right)$, $\omega_c = \frac{eH}{m_c^* c}$

→ experimentelle Bestimmung der effektiven Masse.

$m_c^* = m_c^*(E_F, k_z^{(j)})$
an extremalen Bahnen