

6. Elektron-Elektron-Wechselwirkung

6.1. Zweite Quantisierung (Besetzungszahldarstellung)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_i^2 + U(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}$$

$\uparrow$ Ham.-Op. eines wechselwirkenden Systems ($\sim 10^{23}$ Teilchen)
 $\underbrace{\quad}_{H_0(\vec{r}_i)}$
 $\uparrow$ Einteilchen-H.
 $\nwarrow$ Wechselwirkung

$\psi_k(r)$ ($k=1,2,\dots$) — Einteilchen-Basis

$$\Psi(r_1 \dots r_N, t) = \sum_{k_1 \dots k_N} C(k_1 \dots k_N, t) \underbrace{\psi_{k_1}(r_1) \dots \psi_{k_N}(r_N)}_{\text{Basiszustände}}$$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{symmetrisch für Bosonen} \\ \text{antisymmetrisch für Fermionen} \end{array} \right.$

(Anti-)Symmetrie! $\rightarrow$ bessere Basiszustände

Bosonen

$$\Phi_{n_1 n_2 n_3 \dots}(r_1 \dots r_N) = \left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_{\substack{\{k_1 \dots k_N\} \\ (n_1 n_2 n_3 \dots)}} \psi_{k_1}(r_1) \dots \psi_{k_N}(r_N)$$

$\uparrow$ Anzahl der Teilchen im Zustand $k=1 \dots k=2$

Summierung über alle $\{k_1 \dots k_N\}$, die $(n_1 n_2 n_3 \dots)$ entsprechen, d.h.
 $\{ \underbrace{111}_{n_1} \underbrace{222}_{n_2} \dots \} + \text{Permutationen}$

$$\Psi(r_1 \dots r_N, t) = \sum_{n_1 n_2 \dots} \tilde{C}(n_1 n_2 \dots, t) \Phi_{n_1 n_2 \dots}(r_1 \dots r_N)$$

symbolisch: $\Phi_{n_1 n_2 \dots} \rightarrow |n_1 n_2 n_3 \dots\rangle$

Basis (VONS) im Vielteilchen-Hilbertraum:

$$\langle n_1 n_2 \dots | n'_1 n'_2 \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots ; \sum_{n_1 n_2 \dots} |n_1 n_2 \dots\rangle \langle n_1 n_2 \dots| = \mathbb{1}$$

Erzeugungs- / Vernichtungs-Operatoren:

$$a_k, a_k^+$$

$$[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{kk'}$$

$$[a_k, a_{k'}] = 0 = [a_k^+, a_{k'}^+]$$

$$\rightarrow \begin{cases} a_k |n_k\rangle = n_k^{1/2} |n_k-1\rangle \\ a_k^+ |n_k\rangle = (n_k+1)^{1/2} |n_k+1\rangle \\ a_k^+ a_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle \end{cases}$$

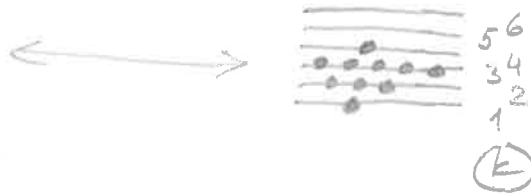
Quantenmechanik
eines harmonischen
Oszillators

$a_k^+ a_k$ - Teilchenzahl - Operator

$$|n_1 n_2 \dots\rangle = \prod_k \frac{(a_k^+)^{n_k}}{(n_k!)^{1/2}} |0\rangle$$

$|000\dots\rangle$ Vakuum

z. B. $|135100\dots\rangle$



$$\hat{H}_0 |n_1 n_2 \dots\rangle = ?$$

$$\sum_i \hat{H}_0(\mathbf{r}_i) \Phi_{n_1 n_2 n_3 \dots}(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N)$$

$$= \sum_k n_k (H_0)_{kk} \Phi_{n_1 n_2 \dots}(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N)$$

$$+ \sum_i \sum_{k'} \left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1) \dots \psi_{k_i}(\mathbf{r}_i) \dots \psi_{k'}(\mathbf{r}_i) \dots$$

$$\left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N)$$

$\{k_1 \dots k_N\} \leftrightarrow (n_1 n_2 \dots)$

diesen Term erhalten wir
($n_{k'}+1$) mal (aus $n_{k'}+1$ verschiedenen Termen
der ursprünglichen Summe)

$$k_i = k : n_k \rightarrow n_k - 1$$

$$k' : n_{k'} \rightarrow n_{k'} + 1$$

$$(H_0)_{k'k} = \langle k' | H_0 | k \rangle = \int d^d r \psi_{k'}^* H_0 \psi_k$$

Einteilchen -
Matrixelement

$$\left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \cdot (n_{k'}+1) = n_k^{1/2} (n_{k'}+1)^{1/2} \left(\frac{n_1! \dots (n_k-1)! \dots (n_{k'}+1)! \dots}{N!} \right)^{1/2}$$

Damit haben wir bekommen

$$\sum_i \hat{H}_0(r_i) \Phi_{n_1 n_2 n_3 \dots}(r_1 \dots r_N)$$

$$= \sum_k n_k (H_0)_{kk} \Phi_{n_1 n_2 \dots}(r_1 \dots r_N)$$

$$+ \sum_{k \neq k'} (n_{k'} + 1)^{1/2} n_k^{1/2} (H_0)_{k'k} \Phi_{n_1 n_2 \dots n_{k'}-1 \dots n_{k'}+1 \dots}(r_1 \dots r_N)$$

$$\rightarrow \sum_{k, k'} (H_0)_{k'k} a_{k'}^+ a_k |n_1 n_2 \dots\rangle$$

$$\sum_i \hat{H}_0(r_i) \rightarrow \sum_{k, k'} (H_0)_{k'k} a_{k'}^+ a_k \quad \text{"zweite Quantisierung"}$$

Ähnlich:

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_i, r_j) \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n} V_{kl; mn} a_k^+ a_l^+ a_n a_m$$

"erste Quantisierung"

"zweite Quantisierung"

$$V_{kl; mn} = \int dr dr' \psi_k^*(r) \psi_m(r) V(r, r') \psi_l^*(r') \psi_n(r')$$

$$\equiv \langle kl | V | mn \rangle$$

$$\hat{H} = \sum_i H_0(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_i, r_j) \quad \text{"erste Quantisierung"}$$

$$\leftrightarrow \sum_{k, l} (H_0)_{kl} a_k^+ a_l + \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n} V_{kl; mn} a_k^+ a_l^+ a_n a_m \quad \text{"zweite Quantisierung"}$$

Fermionen

$$n_k = 0 \text{ oder } 1$$

$$\Phi_{n_1 n_2 \dots}(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) = \left(\frac{1}{N!} \right)^{1/2} \sum_{\substack{\text{Permutationen} \\ \{k_1 \dots k_N\}}} (-1)^P \psi_{k_{P_1}}(\mathbf{r}_1) \dots \psi_{k_{P_N}}(\mathbf{r}_N)$$

$$= \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_{k_1}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_N}(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad \text{Slater-Determinante}$$

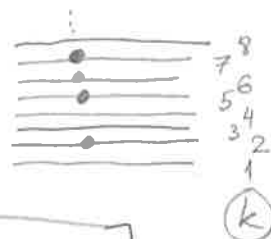
$$\{a_k, a_{k'}^+\} = \delta_{kk'}$$

$$\{a_k, a_{k'}\} = \{a_k^+, a_{k'}^+\} = 0$$

$$\rightarrow \begin{cases} a^+ |0\rangle = |1\rangle & a |1\rangle = |0\rangle \\ a^+ |1\rangle = 0 & a |0\rangle = 0 \\ a_k^+ a_k = n_k \end{cases}$$

$$|n_1 n_2 \dots\rangle = (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots |0\rangle \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{|000\dots\rangle}$$

$$\text{z. B. } |01001110\dots\rangle = a_2^+ a_5^+ a_6^+ a_7^+ \dots |0\rangle$$



$\hat{H}$ hat genau die gleiche Form
in der zweiten Quantisierung wie für Bosonen
(Seite 85b unten)

ψ_K -Basis $\rightarrow$ Γ -Basis:

Feld-Operatoren

$$\hat{\Psi}(r) = \sum_k a_k \psi_k(r)$$

$$\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) a_{\mathbf{k}}^+$$

Bosonen

$$[\hat{\Psi}(r), \hat{\Psi}^+(r')] = \sum_{kk'} \psi_k(r) \psi_{k'}^*(r') \underbrace{[a_k, a_{k'}^+]}_{\delta_{kk'} = \delta(r-r')} = \sum_k \psi_k(r) \psi_k^*(r')$$

$$[\hat{\Psi}(r), \hat{\Psi}(r')] = [\hat{\Psi}^+(r), \hat{\Psi}^+(r')] = 0$$

Fermionen:

$$\{\hat{\Psi}(r), \hat{\Psi}^+(r')\} = \delta(r-r')$$

$$\{\psi\psi\} = \{\psi^+\psi^+\} = 0$$

B und F: $[\hat{\psi}(r), \hat{\psi}^\dagger(r')]_{\mp} = \hat{\psi}(r) \hat{\psi}^\dagger(r') \overset{\text{Bose}}{\mp} \hat{\psi}^\dagger(r') \hat{\psi}(r)$
 $= \delta(r-r')$ Ferm

$$[\hat{\psi}, \hat{\psi}]_{\mp} = [\hat{\psi}^+, \hat{\psi}^+]_{\mp} = 0$$

Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) H_0(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r})$$

mit Spin: $\Gamma \rightarrow \Gamma \otimes$

$$[\hat{\Psi}_\sigma(r), \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(r')]_{\mp} = \delta(r-r') \delta_{\sigma\sigma'}$$

6.2. Korrelationen in einem freien Fermigas

Freie Fermionen, keine Wechselwirkung

Im Gegensatz zu einem klassischen idealen Gas, in dem die Teilchen völlig unkorreliert sind, besitzt das Quantengas ein gewisses Maß an Korrelationen, die durch die Symmetrieeigenschaften der Vielteilchen-Wellenfunktionen (Fermi-/Bose-Statistik) bedingt sind.

Einteilchen-Korrelationsfunktion (Dichtematrix):

$$G_{\sigma}(\vec{r}-\vec{r}') = \langle \Phi_0 | \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r}') | \Phi_0 \rangle$$

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\vec{k}, \sigma: |\vec{k}| < k_F} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} |0\rangle \quad ; \quad \psi_{\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_{\vec{k}\sigma}$$

$$\langle \Phi_0 | c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}'\sigma'} | \Phi_0 \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \theta(k_F - k) \quad (T=0)$$

$$\rightarrow G_{\sigma}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r} + i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} \langle \Phi_0 | c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}'\sigma} | \Phi_0 \rangle =$$

$$= \int_{|\vec{k}| < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} = \frac{3n}{2} \frac{\sin x - x \cos x}{x^3} \quad ; \quad x \equiv k_F |\vec{r}-\vec{r}'|$$

$$n = \text{Dichte} \quad ; \quad n = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

Scharfe Fermikante $\rightarrow$ quantenmechanische Interferenz-Effekte auf der Skala der Fermiwellenlänge.

Paarkorrelationsfunktion: Wahrscheinlichkeitsdichte dafür ein Teilchen am Ort $\vec{r}$ mit Spin σ und ein anderes Teilchen am Ort $\vec{r}'$ mit Spin σ' :

$$G_{\sigma, \sigma'}^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}') = \langle \Phi_0 | \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \psi_{\sigma}(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle$$

Dichte-Dichte-korr. $= \langle \Phi_0 | \hat{\rho}_{\sigma}(\vec{r}) \hat{\rho}_{\sigma'}(\vec{r}') | \Phi_0 \rangle - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'} \cdot \frac{n}{2}$

$\hat{\rho}_{\sigma}(\vec{r}) = \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})$

$$G_{\sigma, \sigma'}^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \vec{q}'} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} e^{-i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{r}'} \langle \Phi_0 | c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}, \sigma'}^{\dagger} \cdot c_{\vec{q}', \sigma'} c_{\vec{k}', \sigma} | \Phi_0 \rangle$$

Nach Anwendung des Produkts $c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}, \sigma'}^{\dagger} c_{\vec{q}', \sigma'} c_{\vec{k}', \sigma}$ muss $|\Phi_0\rangle$ wieder erreicht werden. Dies ist für

* $\sigma \neq \sigma'$ nur möglich falls $\vec{q} = \vec{q}'$ und $\vec{k} = \vec{k}'$

$$\Rightarrow G_{\sigma, \sigma'}^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\vec{k}, \sigma} \hat{n}_{\vec{q}, \sigma'} | \Phi_0 \rangle = \left(\frac{n}{2}\right)^2, \sigma \neq \sigma'$$

$\hat{n}_{\vec{k}, \sigma} = c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma}$

keine Korrelationen

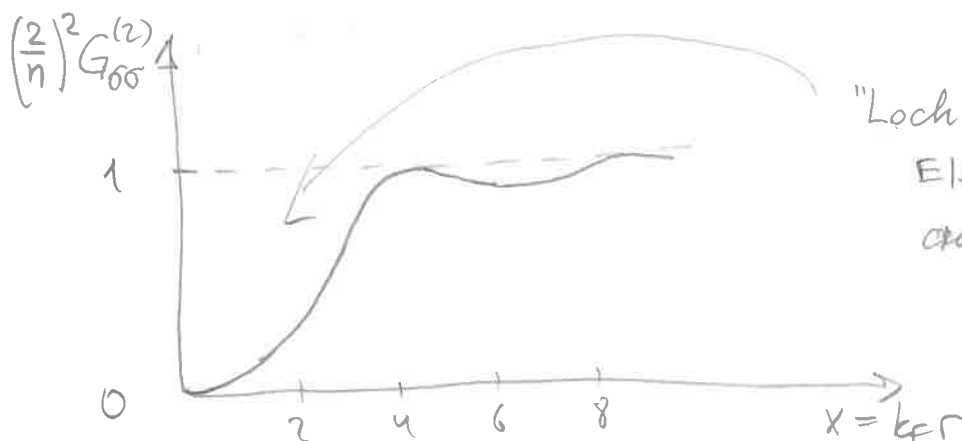
* $\sigma = \sigma'$ möglich falls $\begin{cases} \vec{q} = \vec{q}' \\ \vec{k} = \vec{k}' \end{cases}$ oder $\begin{cases} \vec{q} = \vec{k}' \\ \vec{k} = \vec{q}' \end{cases}$

$$\langle \Phi_0 | c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{q}', \sigma} c_{\vec{k}', \sigma} | \Phi_0 \rangle = n_{\vec{k}, \sigma} n_{\vec{q}, \sigma} (\delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\vec{q}\vec{q}'} - \delta_{\vec{k}\vec{q}'} \delta_{\vec{q}\vec{k}'})$$

($\Leftrightarrow$ Wick-Theorem)

$$\Rightarrow G_{\sigma\sigma}^{(2)}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{V^2} \sum_{|\vec{k}| < k_F, |\vec{q}| < k_F} (1 - e^{-i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}) = \left(\frac{n}{2}\right)^2 - [G_{\sigma}(\vec{r} - \vec{r}')]^2$$

$$= \left(\frac{n}{2}\right)^2 \left[1 - \left(\frac{3(\sin x - x \cos x)}{x^3} \right)^2 \right], \quad x = k_F |\vec{r} - \vec{r}'|$$



"Loch" bei $r \sim k_F^{-1}$:

Elektronen "stoßen sich ab" auf Grund des Pauliprinzips

6.3. Hartree-Fock-Näherung

Jetzt das Problem von Elektronen mit Wechselwirkung

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}_i^2}{2m} + \sum_i U_0(\vec{r}_i) + \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Sehr kompliziert...

Wir suchen die beste Näherung innerhalb der Klasse von nicht-wechselwirkenden Ham-Operatoren (und entsprechenden Zuständen)

Variationsprinzip: Das Energie-Funktional $E\{\psi\} = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$

nimmt sein absolutes Minimum für den Grundzustand von H an.

Beweis: $H|n\rangle = E_n|n\rangle \rightarrow E\{\psi\} = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_n \langle \psi | n \rangle E_n \langle n | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_n \frac{|\langle \psi | n \rangle|^2 E_n}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$

"Beste Näherung" in einer Klasse von Wellenfunktion $\leftrightarrow$ Minimierung von $E\{\psi\}$

HF-Näherung: ψ = Slater-Determinante

$$\Psi(r_1 \sigma_1, \dots, r_N \sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1 \sigma_1) & \dots & \psi_1(r_N \sigma_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N(r_1 \sigma_1) & \dots & \psi_N(r_N \sigma_N) \end{vmatrix}; \quad \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_i \int d\mathbf{r} \quad \psi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_0(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\psi_i(\mathbf{r})|^2 |\psi_j(\mathbf{r}')|^2 \\ &- \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}') \psi_j^*(\mathbf{r}') \psi_j(\mathbf{r}) \delta_{\sigma_i \sigma_j} \end{aligned}$$

Wir haben benutzt, dass es keine explizite Spin-Abhängigkeit in H gibt $\rightarrow \psi_i(\mathbf{r}\sigma) = \psi_i(\mathbf{r}) \delta_{\sigma\sigma_i}$

Wir minimisieren $\langle \psi | H | \psi \rangle$ mit der Nebenbedingungen

$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 1$ $\left[\rightarrow \text{Lagrange-Multiplikator } \epsilon_j \right]$

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i(\vec{r})} \left[\langle \Psi | H | \Psi \rangle - \sum_j \epsilon_j (\langle \psi_j | \psi_j \rangle - 1) \right] = 0$$

HF -
Gleichungen

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) + U_0(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) + U_H(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) - \sum_{j=1}^N \int d\vec{r}' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_j^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} = \epsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

$$U_H(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \rho(\vec{r}') ; \quad \rho(\vec{r}') = \sum_{j=1}^N |\psi_j(\vec{r}')|^2$$

* Hartree-Term: lokales Potential: $U_H(\vec{r}) \psi(\vec{r})$

Austausch-Term: nicht lokal! $H_{ex} \psi(\vec{r}) = - \int U_{ex}(\vec{r}, \vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}'$;
(Fock)

$$U_{ex}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_j^*(\vec{r}') \psi_j(\vec{r})$$

→ HF-Gleichungen ist ein Integrodifferenzialgleichungssystem

* Nichtlinearität ($\leftrightarrow$ Selbstkonsistenz): $U_H, U_{ex} \propto \sum \psi^* \psi$

Numerische Lösung durch Iterationen:

$$\{\psi_j\} \rightarrow U_H, U_{ex} \rightarrow \{\psi_j\} \rightarrow U_H, U_{ex} \rightarrow \dots$$

* Parameter ϵ_i wurden ursprünglich als Lagrange-Multiplikatoren eingeführt. Wir sehen, daß sie die Rolle der Einteilchenenergien spielen

$$H_{HF} \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

(Ionisierungsenergie:
Energie der Entfernung
des Teilchens i)

* Alternative Bezeichnungen:

- "Mean-Field-Näherung" ("Näherung des mittleren Feldes")
- "Molekularfeld-Näherung"

Äquivalente Formulierung der HF-Näherung (in Rahmen der 2. Quantisierung)

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_0(r) \right) \psi_{\sigma}(r)$$

$$v(\vec{R}) = \frac{e^2}{R}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' v(\vec{r}-\vec{r}') \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(r') \psi_{\sigma'}(r') \psi_{\sigma}(r)$$

Für zwei Operatoren A, B:

$$AB = \underbrace{(A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle)}_{\text{Korrelationen, werden in der "Mean-Field-Näherung" vernachlässigt}} + A\langle B \rangle + B\langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

Korrelationen, werden
in der "Mean-Field-Näherung"
vernachlässigt

Näherung:

$$AB \longrightarrow A\langle B \rangle + B\langle A \rangle - \underbrace{\langle A \rangle \langle B \rangle}_{\text{const., kann im Ham.-Operator ignoriert werden}}$$

Für den El.-El.-Wechselwirkungsterm die entsprechende Näherung ist:

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

Damit $\hat{H} \rightarrow \hat{H}_{\text{HF}}$;

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_0(r) + U_H(r) \right) \psi_{\sigma}(r)$$

$$v(\vec{R}) = \frac{e^2}{R}$$

$$- \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) v(r-r') \rho_{\sigma'\sigma}(r',r) \psi_{\sigma'}(r')$$

$$\rho_{\sigma'\sigma}(r',r) = \langle \psi_{\sigma'}^{\dagger}(r') \psi_{\sigma}(r) \rangle ;$$

$$\rho(r) = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma\sigma}(r,r)$$

$$U_H(r) = \sum_{\sigma'} \int d^3r' v(r-r') \rho_{\sigma'\sigma'}(r',r') = \int d^3r' \rho(r') \frac{e^2}{|r-r'|}$$

$\leftrightarrow$ HF-Gleichungen. Selbstkonsistenz:

$\rightarrow \rho_{ss'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow \hat{H}_{\text{HF}}$ (nicht-lokales ein-Teilchen Ham.-Op.)
 $\rightarrow$ Eigenzustände / -energien $\rightarrow \langle \psi_\sigma^+(\mathbf{r}) \psi_\sigma(\mathbf{r}') \rangle$

6.4. Homogenes Elektronengas in der Hartree-Fock-Näherung

"Jellium"-
 -Modell:

Freie Elektronen + Coulomb-Abstoßung +
 + homogene positive Hintergrund-Ladungsdichte,
 die für die Ladungsneutralität sorgt (periodisches
 Potential von Ionen wird ignoriert)

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' \psi_{\sigma}^+(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) ;$$

$$U_{\text{ion}}(\mathbf{r}) = - \int d^3r' n(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} ; \quad n(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \langle \psi_{\sigma}^+(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \rangle$$

HF-Näherung:

$U_{\text{ion}}(\vec{r}) = -U_H(\vec{r})$ - kürzen sich gegenseitig
 $\rightarrow$ nur der Fock-Anteil bleibt übrig.

Lösungen der HF-Gleichungen - ebene Wellen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \times \delta_{\sigma\sigma_i}$$

Jedes $\vec{k}_i$, $|\vec{k}_i| < k_F$ tritt zweimal auf (mit Spin $\uparrow$ und $\downarrow$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) - \sum_{\vec{k}'} \int d^3r' \psi_{\vec{k}'}^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}') \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \epsilon_{\text{HF}}(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \text{ - Lösung ;}$$

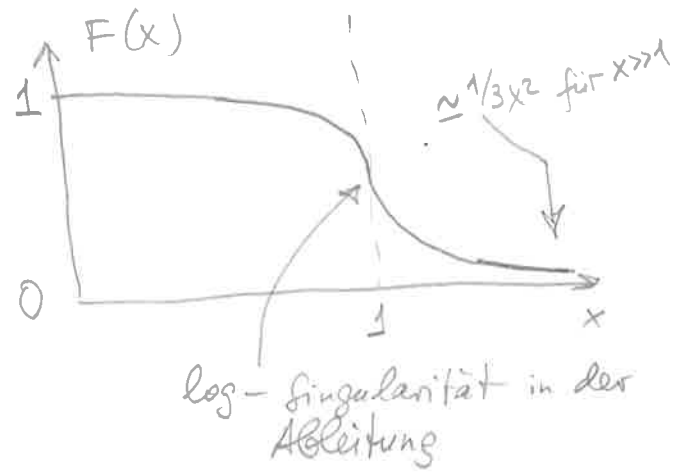
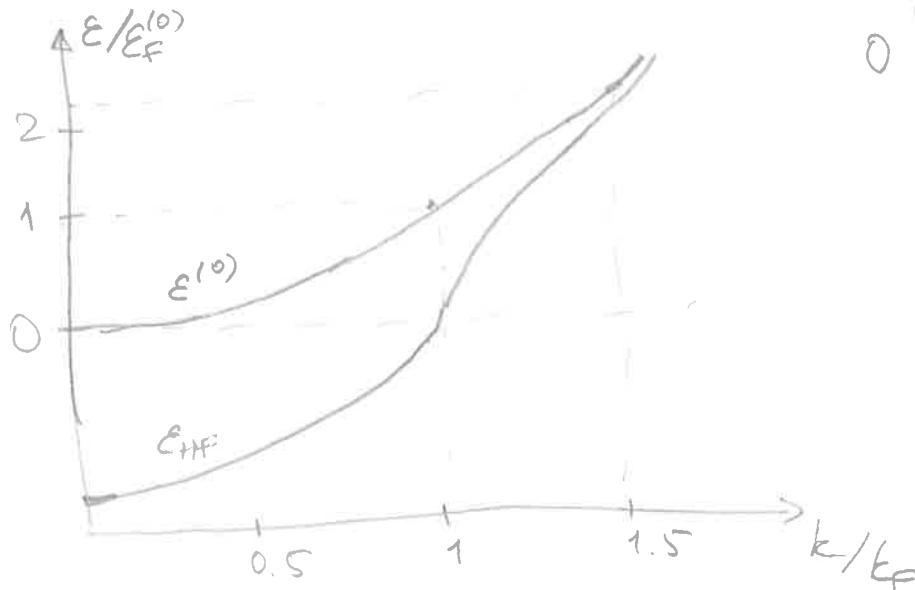
$$\epsilon_{\text{HF}}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{|\vec{k}'| < k_F} \frac{4\pi e^2}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2} =$$

$$\frac{e^2}{r} \xrightarrow{\text{Fourier}} \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

- 91 -

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2e^2}{\pi} k_F F\left(\frac{k}{k_F}\right) ;$$

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$



Dimensionsloser Parameter Γ_S ("Gas-Parameter"):

$$\frac{1}{n} \equiv \frac{4\pi}{3} \Gamma_F^3 \rightarrow \Gamma_F = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} - \text{charakterisiert Dichte} \\ \uparrow \text{Volumen pro Elektron} \quad \Rightarrow \text{kinetische Energie} \\ = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} k_F^{-1}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} - \text{Bohr-Radius} - \text{charakterisiert Wechselwirkung} \\ \Rightarrow \text{potentielle Energie}$$

$$\Gamma_S = \frac{\Gamma_F}{a_0} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{m_e e^2}{\hbar^2 k_F}$$

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F^{(0)}} = x^2 - \underbrace{\frac{4}{\pi} \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3}}_{\approx 0.663} \Gamma_S F(x), \quad x = k/k_F$$

Gesamtenergie des Elektronengases in HF-Näherung

$$E_{HF}^{(kin)} = 2 \sum_{|k| < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2V \int_{|k| < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{\pi^2} V \int_0^{k_F} dk k^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V \frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} = \\ \uparrow N/n \\ = N \cdot \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m}$$

exchange

$$E_{HF}^{(ex)} = -\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \sum_{|k| < k_F} \frac{2e^2}{\pi} k_F F\left(\frac{k}{k_F}\right) =$$

um die W.-Spin Energie nicht doppelt zu zählen

$$= -\frac{2e^2}{\pi} V \int_0^{k_F} \frac{dk k^2}{2\pi^2} k_F F(k/k_F) = -N \frac{3e^2}{4\pi} k_F$$

$$\frac{E_{HF}}{N} = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} - \frac{3e^2}{4\pi} k_F$$

$$= \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \left(\frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \Gamma_s^{-2} - \frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \Gamma_s^{-1} \right)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \left(\frac{2.21}{\Gamma_s^2} - \frac{0.916}{\Gamma_s} \right)$$

$\uparrow$ kin. $\uparrow$ Austausch

* Systematische Theorie:
 Entwicklung in $1/\Gamma_s$. Die ersten beide Terme: HF
 Weitere Terme ($\ln \Gamma_s$, const, Γ_s , ...) - "Korrelations-energie"

* HF is eine vernünftige Näherung für $\Gamma_s \lesssim 1$.
 (d.h. grosse Elektronendichte)

Für $\Gamma_s \gg 1$: qualitativ anderer Grundzustand:
 (kleine Dichte) Wigner-Kristall.

* Log-Singularität in $E_{HF}(k)$ bei $k = k_F$

→ V_F divergiert logarithmisch

Das Problem ist durch Berücksichtigung der Abschirmung beseitigt.

6.5. Abschirmung (Thomas-Fermi-Theorie)

In einem Medium mit beweglichen Ladungen verursacht ein elektrisches Feld eine Polarisation des Mediums
 → Veränderung des Feldes: Abschirmung.

Beziehungen zwischen externer und induzierter Ladungsdichte und entsprechenden Potentialen:

$$\rho(\vec{r}) = \rho^{\text{ext}}(\vec{r}) + \rho^{\text{ind}}(\vec{r})$$

$$-\nabla^2 \varphi^{\text{ext}}(\vec{r}) = 4\pi \rho^{\text{ext}}(\vec{r}) \xrightarrow{\text{Fourier}} q^2 \varphi^{\text{ext}}(\vec{q}) = 4\pi \rho^{\text{ext}}(\vec{q})$$

$$q^2 \varphi(\vec{q}) = 4\pi \rho(\vec{q})$$

Dielektrizitätskonstante $\epsilon(\vec{q})$: hier: statische Felder;
im allgemeinen $\epsilon(\vec{q}, \omega)$;
wird später diskutiert

$$\varphi^{\text{ext}}(\vec{q}) = \epsilon(q) \varphi(\vec{q})$$

Suszeptibilität $\chi(q)$: $\rho^{\text{ind}}(q) = \chi(q) \varphi(q)$

$$\Rightarrow \frac{q^2}{4\pi} (\varphi(q) - \varphi^{\text{ext}}(q)) = \chi(q) \varphi(q)$$

$$\Rightarrow \epsilon(\vec{q}) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \chi(\vec{q})$$

Bemerkung: makroskopische Elektrodynamik:
 $-\nabla \varphi = \vec{E}$; $-\nabla \varphi^{\text{ext}} = \vec{D}$

Thomas-Fermi-Theorie:

Wir berechnen χ in einer Näherung von nicht-w.w. Elektronen (HF, eigentlich Hartree)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(r) - e \varphi(r) \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r)$$

Wir nehmen an, daß $\varphi(r)$ variiert räumlich langsam (q klein),
 so daß man das System in Untersysteme teilen kann.
 In jedem Untersystem $\varphi(\vec{r}) \approx \text{const}$, aber das Untersystem groß
 genug ist, daß die Gesetze der makrost. Thermodynamik
 gelten.

$\Rightarrow$ lokales elektrochemisches Potential $\mu + e\varphi(\vec{r})$

$\rightarrow$ Dichte $n(\vec{r}) = n_0(\mu + e\varphi(\vec{r}))$;

$$n_0(\mu) = \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}$$

$$\Rightarrow \rho^{\text{ind}}(\vec{r}) = -e [n_0(\mu + e\varphi(\vec{r})) - n_0(\mu)]$$

Angenommen $\varphi(\vec{r})$ schwach genug ist, kann man entwickeln:

$$\rho^{\text{ind}}(\vec{r}) \simeq -e^2 \frac{\partial n_0}{\partial \mu} \varphi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \chi(q) = -e^2 \frac{\partial n_0}{\partial \mu} \quad (q - \text{unabhängig})$$

$$\Rightarrow \left[\varepsilon(q) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{\partial n_0}{\partial \mu} \equiv 1 + \frac{k_{\text{TF}}^2}{q^2} \right] \quad \text{Thomas-Fermi.}$$

$$k_{\text{TF}}^2 = 4\pi e^2 \frac{\partial n_0}{\partial \mu} \simeq 4\pi e^2 \nu(\varepsilon_F) \quad \text{Thomas-Fermi-Wellenzahl}$$

$\uparrow$
 $k_B T \ll \varepsilon_F$

Abschirmung des Potentials einer äußeren Punktladung:

$$\varphi^{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{Q}{r} ; \quad \varphi^{\text{ext}}(\vec{q}) = \frac{4\pi Q}{q^2}$$

$$\rightarrow \varphi(q) = \frac{1}{\varepsilon(q)} \varphi^{\text{ext}}(q) = \frac{4\pi Q}{q^2 + k_{\text{TF}}^2}$$

$$\xrightarrow{\text{Fourier}} \varphi(r) = \frac{Q}{r} e^{-k_{\text{TF}} r} \quad \text{Yukawa-Potential}$$

$\Rightarrow k_{\text{TF}}^{-1}$ ist Abschirmungslänge

* Abschätzung von k_{TF} : $k_{\text{TF}}^2 = 4\pi e^2 \nu \sim \underbrace{\frac{me^2}{\hbar^2 k_F}}_{\sim r_s} \cdot \frac{\hbar^2 k_F}{m} \cdot \frac{mk_F}{\hbar^2} \sim r_s k_F^2$

$\downarrow$
 $\sim \nu$

* Die TF Näherung für $\epsilon(\vec{q})$ gilt für $q \ll k_F$.
Beliebige q : Lindhard - Theorie

$$\epsilon(\vec{q}) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} F(q/2k_F) ;$$

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \quad \text{--- Lindhard - Funktion (siehe S. 91)}$$

Große q : $\epsilon(q) - 1 \sim \frac{1}{q^2} \cdot \frac{1}{q^2} \sim \frac{1}{q^4}$ --- sehr schwache Abschirmung
 $\sim F(x) \sim 1/x^2$ für $x \gg 1$

Singularität in $F(x)$ bei $x=1 \rightarrow$ Singularität in $\epsilon(\vec{q})$ bei $q = 2k_F$

$\rightarrow$ Friedel - Oszillationen:

$$\varphi^{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{Q}{r} \quad \longrightarrow \quad \varphi_{\text{osc}}(\vec{r}) \propto \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{einfaches Modell:} \\ \text{Seite 95a (Rückseite)} \end{array} \right.$$

6.6. Plasma - Oszillationen

Wir betrachten jetzt die Bewegung des Elektronensystems als ganzes (also $q \rightarrow 0$, aber ω endlich)

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = e \vec{E} \quad \left| \quad \begin{array}{l} \text{Stramldichte } \vec{j}^{\text{ind}} = en \frac{d\vec{r}}{dt} \quad \rightarrow \quad m \frac{d\vec{j}^{\text{ind}}}{dt} = e^2 n \vec{E} \\ \text{Fourier} \quad -i\omega m \vec{j}_{\omega}^{\text{ind}} = ne^2 \vec{E}_{\omega} \end{array} \right.$$

$$\text{Kontinuitätsgleichung} \quad \partial_t \rho^{\text{ind}} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}^{\text{ind}} = 0$$

$$\partial_t^2 \rho^{\text{ind}} = -\vec{\nabla} \cdot \partial_t \vec{j}^{\text{ind}} = -\frac{e^2 n}{m} \underbrace{\vec{\nabla} \cdot \vec{E}}_{= 4\pi \rho} = -\frac{4\pi e^2 n}{m} (\rho^{\text{ext}} + \rho^{\text{ind}})$$

$\hookrightarrow -\omega^2$

$$\rho^{\text{ind}} = \frac{\omega_p^2}{\omega^2} (\rho^{\text{ind}} + \rho^{\text{ext}}) ;$$

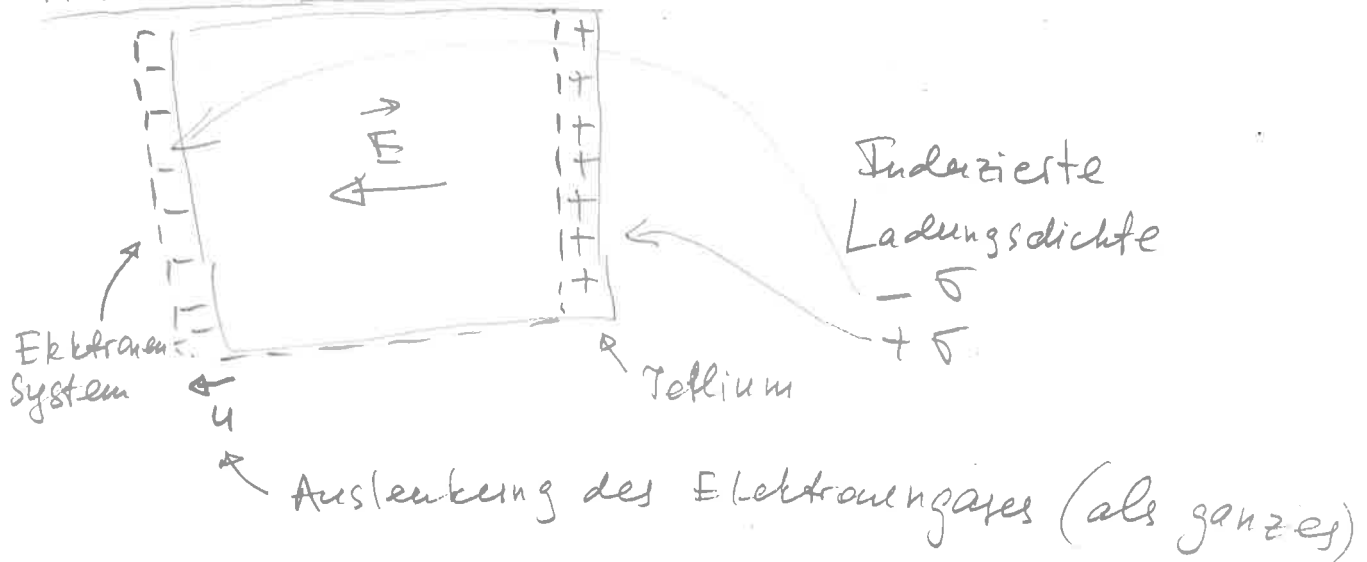
$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m}} \quad \text{--- Plasma-frequenz}$$

$$\rho^{\text{ind}} = \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \rho \quad \rightarrow \quad \rho^{\text{ext}} = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \rho \quad \Rightarrow$$

$$\boxed{\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$$

- 95a -

Plasma Oszillationen, Tellium-Modell



Ladungsdichte $\pm \sigma = \pm ne_u$

→ Elektrisches Feld $E = 2\pi\sigma + 2\pi\sigma = 4\pi\sigma = 4\pi ne_u$

→ $Nm\ddot{u} = -ENE = -4\pi ne^2 Nu$

→ Oszillationen mit der Frequenz

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi ne^2}{m}}$$

* Abschätzung von ω_p :

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m} \sim \underbrace{\frac{me^2}{\hbar^2 k_F}}_{\sim r_s} \cdot \frac{\hbar^2 k_F}{m^2} \cdot k_F^3 \sim r_s \left(\frac{E_F}{\hbar}\right)^2$$

$$\rightarrow \omega_p \sim r_s^{1/2} (E_F/\hbar)$$

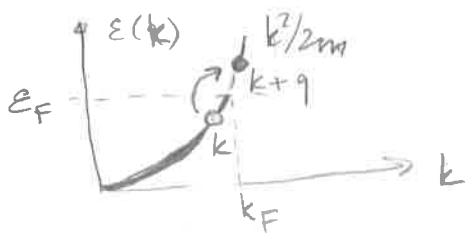
Plasmonen: kollektive Anregungen des Elektronensystems

Dispersion $\omega_p(q)$: Lösung der Gleichung $\epsilon(\omega, q) = 0$

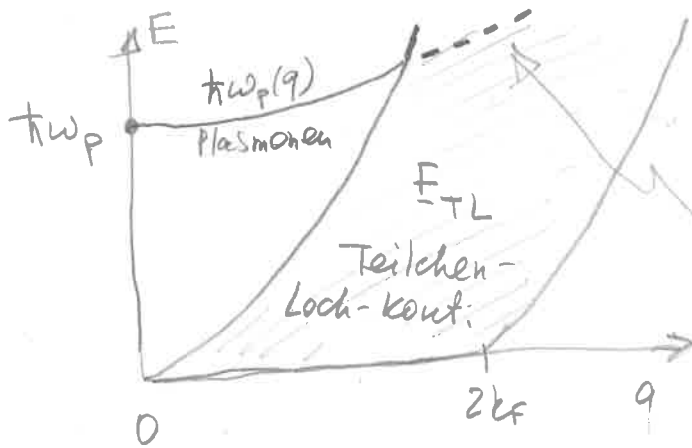


Bosonischer Zweig der Anregungen in einem Fermi-System

Teilchen - Loch - Kontinuum:



Impuls $\hbar q$
Energie $E_{TL} = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{q})^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
 $|\vec{k}| < k_F, |\vec{k} + \vec{q}| > k_F$



$$\Rightarrow E_{TL}(\vec{q}) \geq 0$$

$$E_{TL}(\vec{q}) = \frac{\hbar^2}{m} \left(kq \cos \theta + \frac{q^2}{2} \right)$$

$$E_{TL}(\vec{q}) \begin{cases} \leq \frac{\hbar^2}{m} \left(k_F q + \frac{q^2}{2} \right) \\ \geq \frac{\hbar^2}{m} \left(-k_F q + \frac{q^2}{2} \right) \end{cases}$$

Plasmonen können in Teilchen - Loch - Paare zerfallen ($\rightarrow$ endliche Lebensdauer)

6.7. Magnetismus der beweglichen Bandlelektronen

Verschiedene Wege zum Ferromagnetismus:

- Wechselwirkung zwischen lokalisierten magnetischen Momenten: magn. Isolatoren oder Halbleiter usw.
 $\rightarrow$ Heisenberg-Modell
- Wechselwirkung zwischen beweglichen Elektronen
 (3d-Bänder: Fe, Co, Ni, ...)

Das einfachste Modell: Hubbard-Modell

$$H = \sum_{i\sigma} \sum_{\delta \in \{n.n.\}} t C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i+\delta,\sigma} + U \sum_i \underbrace{C_{i\uparrow}^{\dagger} C_{i\uparrow}}_{n_{i\uparrow}} \underbrace{C_{i\downarrow}^{\dagger} C_{i\downarrow}}_{n_{i\downarrow}}$$

$U > 0$ -
lokale
Coulomb-
Abstoßung

Tight-Binding-Näherung für ein einfach-kubisches Gitter

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$C_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} C_{\vec{k}\sigma} \quad ; \quad \epsilon_{\vec{k}} = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

Zeeman-Ankopplung des Magnetfeldes

$$\epsilon_{\vec{k}} \rightarrow \epsilon_{\vec{k}} + g \mu_B B \frac{\sigma}{2}, \quad \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \equiv \{+1, -1\}$$

$g \approx 2$

HF ("Mean-Field")-Näherung:

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rightarrow \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle$$

$$H \rightarrow H_{HF} = \sum_{\vec{k}} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu_B B + U \langle n_{i\uparrow} \rangle) C_{\vec{k}\downarrow}^{\dagger} C_{\vec{k}\downarrow} + \sum_{\vec{k}} (\epsilon_{\vec{k}} + \mu_B B + U \langle n_{i\downarrow} \rangle) C_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} C_{\vec{k}\uparrow} - U \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle$$

Wir nehmen an, daß $\langle n_{i\sigma} \rangle$ i -unabhängig ist, d.h. wir suchen eine Lösung mit der Translationsinvarianz des ursprünglichen Gitters; kein Antiferromagnetismus usw.

Magnetisierung pro Gitterplatz:

$$m = -\mu_B (\langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle) = -\frac{\mu_B}{N} \sum_{\vec{k}} (\langle C_{\vec{k}\uparrow}^\dagger C_{\vec{k}} \rangle - \langle C_{\vec{k}\downarrow}^\dagger C_{\vec{k}} \rangle)$$

$$= -\frac{\mu_B}{N} \sum_{\vec{k}} \left[f(\epsilon_{\vec{k}} + \mu_B B + U \langle n_{i\downarrow} \rangle) - f(\epsilon_{\vec{k}} - \mu_B B + U \langle n_{i\uparrow} \rangle) \right]$$

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

Magnetische Suszeptibilität (bei $B=0$)

$$\chi(T) = \frac{\partial m}{\partial B} = -\frac{\mu_B}{N} \sum_{\vec{k}} f'(\epsilon_{\vec{k}}) \left[\mu_B + U \frac{\partial}{\partial B} \langle n_{i\downarrow} \rangle + \mu_B - U \frac{\partial}{\partial B} \langle n_{i\uparrow} \rangle \right]$$

$$= \underbrace{-\frac{2\mu_B^2}{N} \sum_{\vec{k}} f'(\epsilon_{\vec{k}})}_{\chi_0} - \frac{U}{N} \sum_{\vec{k}} f'(\epsilon_{\vec{k}}) \frac{\partial m}{\partial B} = \chi(T)$$

$B=0: \langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle = \frac{n}{2}$;
 Beitrag $U \frac{n}{2}$ wird durch Verschiebung des chem. Potentials $\mu \rightarrow \mu - U n/2$ absorbiert

$\chi = \chi_0 \left(1 + \frac{U}{2\mu_B^2} \chi \right)$ - Gleichung für χ

$\chi_0 = -\frac{2\mu_B^2}{N} \sum_{\vec{k}} f'(\epsilon_{\vec{k}}) = -\mu_B^2 \int d\epsilon \nu(\epsilon) f'(\epsilon)$

$\stackrel{T=0}{=} \mu_B^2 \nu(\epsilon_F)$ - Pauli-Suszeptibilität

$\rightarrow \chi = \frac{\chi_0}{1 - \frac{U}{2\mu_B^2} \chi_0} = \frac{\chi_0}{1 - \frac{1}{2} U \nu(\epsilon_F)}$

im allgemeinen $(T \text{ beliebig}):$
 $\partial n / \partial \mu$

- * Stoner-Verstärkung der Suszeptibilität
- * $U \nu(\epsilon_F) / 2 > 1$ $\rightarrow$ Instabilität $\rightarrow$ Spontane Magnetisierung: Stoner-Ferromagnetismus

6.8 Fermiflüssigkeitstheorie

Ferniflüssigkeit — Normalzustand eines wechselwirkenden Fermi-System (d.h. der Zustand ohne spontan gebrochenen Symmetrien)

Landau, 1957 (Nobel Prize 1962)

Gedankenexperiment: langsames Einschalten der Wechselwirkung
Annahme: stetige Entwicklung, kein Phasenübergang

→ eins-zu-eins Korrespondenz zwischen den Zuständen des Fermigas (d.h. ohne Ww) und denen der Ferniflüssigkeit (mit Ww).

Niederenergetische Anregungen: Quasiteilchen (fermionische)

mit ^{eines} eindeutigen Energie-Impuls-Beziehung $E = E_{\vec{k}}$ und einer kleinen Zerfallsrate $\gamma_{\vec{k}}$

Quantenzahlen der Quasiteilchen (identisch zu denen von Elektronen)

- Teilchenzahl 1 ($\leftrightarrow$ Ladung $-e$)

- Spin $\frac{1}{2}$

- Impuls $\vec{k}$

Zustand des Systems ist durch die Quasiteilchenverteilungsfunktion $n_{\vec{k}\sigma}$ bestimmt.

Grundzustand: $n_{\vec{k}\sigma}^{(0)} = \theta(k_F - k)$ wie für das Fermigas, d.h. alle Zustände mit $k < k_F$ (bzw. mit $E_k < E_{k_F} \equiv E_F$) besetzt.

Fermiwellenzahl k_F ist durch die Bedingung

$$\text{Spin} \rightarrow \sum_{\vec{k}} 2 n_{\vec{k}}^{(0)} = N \quad \text{festgelegt}$$

→ die selbe Beziehung zwischen der Dichte $\frac{N}{V}$ und k_F wie für das Fermigas:

$$n_e \equiv \frac{N}{V} = \frac{1}{3\pi^2} k_F^3$$

$$\rightarrow k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3} \quad \text{unabhängig von der Ww!}$$

Energie eines Quasiteilchens über dem Grundzustand

$$\boxed{\varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_F \equiv \xi_{\vec{k}} = v_F \hbar (k - k_F)} ; \quad v_F = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}}{\partial k} ; \quad k = |\vec{k}|$$

(mit der Annahme der Isotropie: $\varepsilon_{\vec{k}}$ hängt nur von $|\vec{k}|$ ab)

$$\boxed{v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*}} ;$$

m^* - effektive Masse

(ein phenomenologischer Parameter der Theorie)

Quasiteilchenzustandsdichte an der Fermikante:

$$\mathcal{D}_F = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \hbar^2}$$

Wichtige Bemerkung: $\gamma_{\vec{k}} \ll \xi_{\vec{k}}$ nur für $|\vec{k} - \vec{k}_F| \leq k_F$ (siehe unten). Quasiteilchen sind nur in der Nähe der Fermikante gut definiert! $\rightarrow$ Theorie anwendbar

Wechselwirkung zwischen Quasiteilchen für $\xi_{\vec{k}}, k_B T \ll \varepsilon_F$

Falls mehrere Quasiteilchen über dem Grundzustand vorhanden sind, ist die Ww zwischen den zu berücksichtigen.

Änderung der Gesamtenergie infolge von Anregungen

$$\delta E \{ n_{\vec{k}\sigma} \} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}\sigma}^{(0)} \delta n_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\sigma, \vec{k}'\sigma'} f_{\vec{k}\sigma, \vec{k}'\sigma'} \delta n_{\vec{k}\sigma} \delta n_{\vec{k}'\sigma'}$$

$$\delta n_{\vec{k}\sigma} = n_{\vec{k}\sigma} - n_{\vec{k}\sigma}^{(0)}$$

$\uparrow$
Landau-Funktion

$\rightarrow$ Energie eines Quasiteilchens mit Berücksichtigung der Ww mit anderen Quasiteilchen

$$\boxed{\varepsilon_{\vec{k}\sigma} = \varepsilon_{\vec{k}\sigma}^{(0)} + \sum_{\vec{k}'\sigma'} f_{\vec{k}\sigma, \vec{k}'\sigma'} \delta n_{\vec{k}'\sigma'}}$$

Eigenschaften und Parametrisierung der Funktion f :

* Spinrotationsinvarianz $\rightarrow f = f_{\vec{k}\vec{k}'}^s + f_{\vec{k}\vec{k}'}^a \vec{\sigma} \vec{\sigma}'$

Magnetfeld (falls vorhanden) $\parallel \hat{z}$.

Dann $\vec{\sigma} \vec{\sigma}' \rightarrow \sigma_z \sigma_z' \equiv \sigma \sigma' ; \quad \sigma, \sigma' = \pm 1$

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

* Charakteristische Skala für Änderung der Funktion f (im k -Raum) $\sim \frac{1}{\text{mittlerer Teilchenabstand}} \sim k_F$.

Wir interessieren uns aber für k in der Nähe von k_F :

$$|k - k_F| \ll k_F \Rightarrow f_{\vec{k}\vec{k}'}^{s,a} \simeq f^{s,a}(\hat{k}, \hat{k}')$$

hängt nur von der Richtungen von $\vec{k}$ und $\vec{k}'$ ab. $\uparrow \uparrow$ Einheitsvektoren

$$* \text{Isotropie} \rightarrow f^{s,a}(\hat{k}, \hat{k}') = f^{s,a}(\hat{k} \cdot \hat{k}')$$

Entwicklung nach Legendrepoly-nomen

$$P_l(\cos \theta) \rightarrow$$

$$\uparrow \cos \theta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

$$f_{\vec{k}\sigma, \vec{k}'\sigma'} = \frac{1}{v_F} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') [F_l^s + F_l^a \sigma\sigma']$$

Hier wurde der Faktor $1/v_F$ eingeführt, um dimensionslose Koeffizienten $F_l^{s,a}$ (Landauparameter) zu erhalten. Übliche Annahme: $f^{s,a}$ - relativ glatte Funktionen von $\theta_{\vec{k}\vec{k}'}$ $\rightarrow F_l^{s,a}$ für höhere l 's rasch abfallen.

$$\delta \varepsilon_{\vec{k}\sigma} = \varepsilon_{\vec{k}\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}^{(0)} = \frac{1}{v_F} \sum_{\vec{k}'\sigma'} \sum_{l=0}^{\infty} (F_l^s + F_l^a \sigma\sigma') P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}') \cdot [n_{\vec{k}'\sigma'} - n_{\vec{k}'}^{(0)}]$$

• $l=0, s$: $\sum_{\vec{k}\sigma} [n_{\vec{k}\sigma} - n_{\vec{k}}^{(0)}] = \delta n$ - Änderung der Teilchen-Dichte

• $l=0, a$: $\sum_{\vec{k}\sigma} \sigma [n_{\vec{k}\sigma} - n_{\vec{k}}^{(0)}] = \delta n_s$ - Spindichte

• $l=1, s$: $\sum_{\vec{k}\sigma} \vec{k} [n_{\vec{k}\sigma} - n_{\vec{k}}^{(0)}] \simeq \frac{1}{k_F} \sum_{\vec{k}\sigma} \vec{k} [n_{\vec{k}\sigma} - n_{\vec{k}}^{(0)}] = \frac{1}{k_F} \vec{g}$

$\hbar \vec{g}$ - Impulsdichte, $\frac{\hbar \vec{g}}{m} = \vec{j}$ - Teilchenstromdichte

$$\rightarrow \delta \epsilon_{\vec{k}\sigma} = \frac{1}{V_F} \left[F_0^s \delta n + 5 F_0^a \delta n_s + \frac{1}{k_F^2} F_1^s \vec{k} \cdot \vec{g} + \dots \right]$$

Molekularfelder $\uparrow$ "backflow term" $\uparrow$

Galilei-invarianz $\rightarrow \frac{m^*}{m} = 1 + \frac{1}{3} F_1^s$ (ohne Beweis)

Quasiteilchenzerfallsrate

Wir haben oben angenommen, daß die Quasiteilchen exakte (zeitunabhängige) Zustände sind. Dies ist aber nicht der Fall: die Quasiteilchen haben eine endliche Lebensdauer (oder, äquivalent, endliche Zerfallsrate). Die folgende Abschätzung zeigt aber, daß diese Rate klein ist was die Theorie rechtfertigt.

Wir betrachten ein Quasiteilchen mit Anregungsenergie

$\xi_1 = \epsilon_1 - \epsilon_F > 0$. Zerfallsprozess: ϵ_1



Quasiteilchen $\epsilon_1 > \epsilon_F \rightarrow$ Quasiteilchen + Quasiteilchen-Loch-Paar
 $\epsilon_2, \epsilon_3 > \epsilon_F$
 $\epsilon_4 < \epsilon_F$
 (T=0)

Goldene Regel: Zerfallsrate

$$\gamma_1 \equiv \frac{\hbar}{\tau_1} = 2\pi \int d\epsilon_2 \nu(\epsilon_2) \int d\epsilon_3 \nu(\epsilon_3) \int d\epsilon_4 \nu(\epsilon_4) \cdot$$

$$\cdot |\nu|^2 f(\epsilon_4) [1-f(\epsilon_2)][1-f(\epsilon_3)] \cdot$$

$$\cdot \delta(\epsilon_1 + \epsilon_4 - \epsilon_3 - \epsilon_2)$$

$$\stackrel{T=0}{=} 2\pi \nu_F^3 \int_0^{\xi_1} d\xi_2 \int_0^{\xi_1 - \xi_2} d\xi_3 |\nu|^2 \propto \xi_1^2$$

$$\epsilon_i - \epsilon_F = \xi_i$$

$$\xi_1 = \xi_2 + \xi_3 - \xi_4$$

$$= \underset{0}{\xi_2} + \underset{0}{\xi_3} + \underset{0}{|\xi_4|}$$

$$\gamma_1 \sim \frac{\xi_1^2}{\epsilon_F}$$

$$\rightarrow \gamma_1 \ll \xi_1 \text{ für } \xi_1 \ll \epsilon_F$$

$\Rightarrow$ die Quasiteilchenbeschreibung ist für $\xi, \hbar\omega, k_B T \ll \epsilon_F$ gültig

Status der Fermi-Flüssigkeitstheorie: phenomenologische Theorie mit den Parametern m^* , $F_i^{s,e}$.

Begründung: feldtheoretische Methoden (TKM II) für Dimensionen $d \geq 2$ und nicht zu starke Ww.

In 1D ist die Fermiflüssigkeitstheorie nicht anwendbar (auch TKM II)

6.9. Thermodynamische Eigenschaften einer Fermiflüssigkeit bei tiefen Temperaturen

(*) Quasiteilchenverteilungsfunktion im Gleichgewicht
Eins-zu-eins-Korrespondenz von Zuständen einer Fermi-Flüssigkeit und denen eines nicht-ww Gases
→ Entropie

$$S = -k_B \sum_{\vec{k}\sigma} \left[n_{\vec{k}\sigma} \ln n_{\vec{k}\sigma} + (1 - n_{\vec{k}\sigma}) \ln (1 - n_{\vec{k}\sigma}) \right]$$

Beweis: die Formel ist rein kombinatorisch, folgt aus

$$S = -k_B \sum_s w_s \ln w_s ; \quad s - \text{mikroskopische Zustände}$$

$$|010001110\dots\rangle ; \quad w_s = \prod_{\text{besetzt}} n_{\vec{k}\sigma} \prod_{\text{unbesetzt}} (1 - n_{\vec{k}\sigma})$$

↑ ↑
unbesetzt besetzt
(Einteilchenzustände)

$$n_{\vec{k}\sigma} = \langle \hat{n}_{\vec{k}\sigma} \rangle - \text{Wahrscheinlichkeit, dass der Zustand } \vec{k}\sigma \text{ ist besetzt}$$

↑
0 oder 1

Wir suchen das Maximum von S bei gegebenen (Mittelwerten von) Teilchenzahl N und Energie E . Variationen:

$$\delta N = \sum_{\vec{k}\sigma} \delta n_{\vec{k}\sigma} ; \quad \delta E = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}\sigma} \delta n_{\vec{k}\sigma}$$

↑ ↑
infinitesimal kleine Variation von gegebene $n_{\vec{k}\sigma}$

$$\delta \left(S + \frac{\mu}{T} N - \frac{1}{T} E \right) = 0$$

$\uparrow \quad \quad \uparrow$
 Lagrange - Multiplikatoren

$\Rightarrow$

$$-k_B (\ln n_{\vec{k}\sigma} + 1 - \ln(1 - n_{\vec{k}\sigma}) - 1) + \frac{\mu}{T} - \frac{1}{T} \epsilon_{\vec{k}\sigma} = 0$$

$\Rightarrow$

$$\ln \frac{1 - n_{\vec{k}\sigma}}{n_{\vec{k}\sigma}} = \frac{\epsilon_{\vec{k}\sigma} - \mu}{k_B T}$$

$$\Rightarrow n_{\vec{k}\sigma} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}\sigma} - \mu)}} \equiv n_F(\epsilon_{\vec{k}\sigma}), \quad \beta = 1/k_B T$$

Fermi-Dirac-Verteilung, aber mit $\epsilon_{\vec{k}\sigma} = \epsilon_{\vec{k}\sigma}(\{n_{\vec{k}'\sigma'}\})$

⊗ Spezifische Wärme

$$C_v = \frac{\partial E}{\partial T}; \quad \delta E = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}\sigma} \delta n_{\vec{k}\sigma}$$

Bei der Berechnung $\frac{\partial n_{\vec{k}\sigma}}{\partial T}$ die Abhängigkeit der Energie $\epsilon_{\vec{k}\sigma}$ von $\{n_{\vec{k}'\sigma'}\}$ (und damit von T) kann vernachlässigt werden ($\rightarrow$ kleine Korrekturen $\sim (k_B T / \epsilon_F)^2$)

$\rightarrow$ die selbe Rechnung wie für freie Fermionen

$$\rightarrow C_v = \frac{\pi^2}{3} \nu_F k_B^2 T$$

$$\text{mit } \nu_F = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \hbar^2}$$

(m^* anstatt m für freie Fermionen)

⊗ Spinsuszeptibilität (Pauli-Paramagnetismus)

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0}$$

M - Magnetisierung

-105-

im Magnetfeld H $\equiv \epsilon_{\vec{k}\sigma}^{(H)}$
 $\epsilon_{\vec{k}\sigma} \rightarrow \epsilon_{\vec{k}\sigma} - \mu_m H \sigma$, $\sigma = \pm 1$ (Spin $\uparrow, \downarrow$)
 Funktional von $\{n_{\vec{k}\sigma}\}$, wie in $H=0$ $\uparrow$ mag Moment des Quasiteilchens

→ Unterschied in der Besetzung von $\uparrow$ und $\downarrow$ Zuständen → Spindichte

$$\delta n_s = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} \sigma n_F(\epsilon_{\vec{k}\sigma} - \mu_m H \sigma)$$

Energieverschiebung von Quasiteilchen durch eine endliche Spinpolarisation

$$\delta \epsilon_{\vec{k}\sigma} = \frac{1}{V_F} F_0^a \sigma \delta n_s$$

$$\epsilon_{\vec{k}\sigma}^{(H)} = \epsilon_{\vec{k}}^{(0)} + \underbrace{\frac{1}{V_F} F_0^a \sigma \delta n_s - \mu_m H \sigma}_{\text{wir entwickeln die Fermifunktion nach}}$$

$$\rightarrow \boxed{\delta n_s = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} - \frac{\partial n_F}{\partial \epsilon_{\vec{k}}^{(0)}} \left[\mu_m H - \frac{1}{V_F} F_0^a \delta n_s \right]}$$

-geschlossene Gleichung für δn_s

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} \left(- \frac{\partial n_F}{\partial \epsilon_{\vec{k}}^{(0)}} \right) = V_F \rightarrow \boxed{\delta n_s = V_F \left(\mu_m H - \frac{F_0^a}{V_F} \delta n_s \right)}$$

$$\Rightarrow \delta n_s = \frac{V_F \mu_m H}{1 + F_0^a}$$

⇒ Magnetisierung

$$M = \mu_m \delta n_s = \frac{V_F \mu_m^2 H}{1 + F_0^a}$$

⇒ Suszeptibilität

$$\boxed{\chi = \frac{\mu_m^2 V_F}{1 + F_0^a}}$$

Gegenüber dem Ergebnis für das freie Fermigas, $\chi_0 = \mu_m^2 V_F^{(0)}$, gibt es zwei Änderungen:

- i) Renormierung der Quasiteilchenzustandsdichte
($\leftrightarrow$ eff. Masse):

$$v_F^{(0)} \rightarrow v_F \quad \text{oder, äquivalent, } m \rightarrow m^*$$

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

- ii) Faktor $\frac{1}{1+F_0^a}$ (analog zu HF-Rechnung)

$$F_0^a < 0 \rightarrow \text{Verstärkung der Suszeptibilität}$$

Thermodynamische Stabilität erfordert $\chi > 0$

$$\Rightarrow F_0^a > -1$$

Im Grenzfall $F_0^a \rightarrow -1$ divergiert die Suszeptibilität

$\chi \rightarrow \infty \Rightarrow$ Instabilität gegenüber ferromagn.
Ordnung (Stoner-Ferromagnetismus)

⊛ Kompressibilität

$$\kappa = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_N = \frac{1}{n^2} \frac{\partial n}{\partial \mu}$$

Berechnung völlig analog zur Spin-Suszeptibilität

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{v_F}{1+F_0^s}}$$

Stabilität: $F_0^s > -1$

$F_0^s \rightarrow -1$: Instabilität gegenüber Phase separation
in eine dichte und verdünnte Phase

7. Elektronen-Phonon-Wechselwirkung

7.1 Effektive e-e-Wechselwirkung in einem Metall. Abschirmung in einem System von Leitungselektronen und Ionen

Wir betrachten ein Metall: [um die Analyse zu vereinfachen
→ 1 Ion pro EZ ⇒ Alle Ionen haben die
selbe Masse]

- positiv geladene Teilchen - Ionen, Masse M , Ladung $+Ze$, Dichte n_i
- negativ geladene Teilchen - Elektronen, Masse m , Ladung $-e$, Dichte $n_e = Zn_i$

Wir analysieren zuerst kollektive Anregungen von Ionen mit kleinem Wellenvektor q . Falls wir die Dynamik von Leitungselektronen dabei ignorieren:

→ Plasma-Schwingungen des Ionensystems;

Plasma-Frequenz von Ionen $\Omega_p^2 = 4\pi \frac{Z^2 e^2 n_i}{M}$

Das wäre im Widerspruch zu $\omega(q) \propto q$ für akustische Phononen.

Erklärung: man muß die Abschirmung durch Leitungselektronen berücksichtigen:

$$\epsilon_{el}(\vec{q}) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} \quad (\text{Thomas-Fermi})$$

$\Omega_p^2 \propto$ elektrischem Feld, das durch die Auslenkung von Ionen verursacht wird

$$\Rightarrow \Omega_p^2 \rightarrow \omega^2(q) = \frac{\Omega_p^2}{\epsilon_{el}(q)} = \frac{4\pi Z^2 e^2 n_i}{M} \frac{q^2}{q^2 + k_{TF}^2}$$

Für kleine q : $\omega(q) \approx \sqrt{\frac{4\pi Z^2 e^2 n_i}{M k_{TF}^2}} q \propto q$ wie erwartet

Schallgeschwindigkeit:

$$c = \sqrt{4\pi Z^2 e^2 n_i / M k_{TF}^2}$$

Benutzen $n_i = n_e / Z$, $n_e = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$, $k_F^2 = \frac{4me^2 k_F}{\pi \hbar^2}$
(parabolische Dispersion)

$$\rightarrow \boxed{C^2 = \frac{1}{3} Z \frac{m}{M} v_F^2}$$

Bohm-Staver-Relation

(in Übereinstimmung mit unseren früheren Abschätzungen:
 $C \sim \sqrt{m/M} \cdot v_F$)

Wir wollen jetzt die dielektrische Konstante $\epsilon(\omega, q)$ des gesamten Systems berechnen. Es gilt (per Definition von ϵ):

$$\epsilon(\omega, q) \varphi^{\text{total}}(\omega, q) = \varphi^{\text{ext}}(\omega, q)$$

$$\epsilon^{\text{el}}(\omega, q) \simeq 1 + \frac{k_{\text{TF}}^2}{q^2}$$

(wir betrachten $\omega \ll \omega_{pe}$ von Elektronen)

$$\epsilon_{\text{bare}}^{\text{ion}}(\omega, q) \simeq 1 - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2}$$

↗ Abschirmung durch "nackte" Ionen

$$\epsilon_{\text{dressed}}^{\text{ion}}(\omega, q) \simeq 1 - \frac{\omega^2(q)}{\omega^2}$$

Abschirmung durch abgeschirmte Ionen
[$\Omega_p^2 \rightarrow \omega^2(q)$; unten bestätigt]

Zwei (äquivalente) Wege, die totale ϵ zu berechnen:

i) Kombination von ϵ^{el} und $\epsilon_{\text{bare}}^{\text{ion}}$:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon^{\text{el}} \varphi^{\text{total}} &= \varphi^{\text{ext}} + \varphi^{\text{ion}} \\ \epsilon_{\text{bare}}^{\text{ion}} \varphi^{\text{total}} &= \varphi^{\text{ext}} + \varphi^{\text{el}} \end{aligned} \right\} \rightarrow (\epsilon^{\text{el}} + \epsilon_{\text{bare}}^{\text{ion}}) \varphi^{\text{total}} = 2\varphi^{\text{ext}} + \varphi^{\text{ion}} + \varphi^{\text{el}} = \varphi^{\text{ext}} + \varphi^{\text{total}}$$

$$\Rightarrow (\epsilon^{\text{el}} + \epsilon_{\text{bare}}^{\text{ion}} - 1) \varphi^{\text{total}} = \varphi^{\text{ext}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\epsilon = \epsilon^{\text{el}} + \epsilon_{\text{bare}}^{\text{ion}} - 1}$$

ii) Kombination von ϵ_{el} und $\epsilon_{ion}^{dressed}$

* Abschirmung des externen Potential durch Elektronen: $\varphi^{ext} \rightarrow \frac{1}{\epsilon_{el}} \varphi^{ext}$

* Danach: Abschirmung durch abgeschirmten Ionen:

$$\frac{1}{\epsilon_{el}} \varphi^{ext} \rightarrow \frac{1}{\epsilon_{ion}^{dressed}} \frac{1}{\epsilon_{el}} \varphi^{ext}$$

$$\Rightarrow \boxed{\epsilon = \epsilon_{ion}^{dressed} \epsilon_{el}}$$

Die beiden Formel müssen äquivalent sein

$$\Leftrightarrow \epsilon_{ion}^{dressed} = 1 + \frac{1}{\epsilon_{el}} (\epsilon_{bare}^{ion} - 1)$$

$$\boxed{\epsilon_{bare}^{ion} = 1 - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2}} \rightarrow \boxed{\epsilon_{ion}^{dressed} = 1 - \frac{\Omega_p^2 / \epsilon_{el}}{\omega^2} = 1 - \frac{\omega^2(q)}{\omega^2}}$$

wie erwartet

$$\Rightarrow \epsilon(\omega, q) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2}$$

$$= \left(1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} \right) \left(1 - \frac{\omega^2(q)}{\omega^2} \right)$$

$$\frac{1}{\epsilon(\omega, q)} = \frac{q^2}{q^2 + k_{TF}^2} \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega^2(q)}$$

$\Rightarrow$ effektive (abgeschirmte) Coulomb-Wechselwirkung:

$$V_0(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \rightarrow V_{eff}(\omega, q) = \frac{V_0(q)}{\epsilon(\omega, q)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2} \left(1 + \frac{\omega^2(q)}{\omega^2 - \omega^2(q)} \right)$$

$$V^{\text{eff}}(\omega, q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2} \left(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{statische} \\ \text{Abschirmung}}}{1} + \frac{\omega^2(q)}{\omega^2 - \omega^2(q)} \right) \quad \begin{array}{l} \text{dynamische} \\ \text{Abschirmung} \end{array}$$

Phononen - Beitrag

Phononen - Beitrag:

unter in Rahmen einer quantenmechanischen Rechnung bestätigt



$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \epsilon_1 - \epsilon_1' = \epsilon_2' - \epsilon_2 \\ \vec{q} &= \vec{k}_1 - \vec{k}_1' \\ &= \vec{k}_2' - \vec{k}_2 \end{aligned}$$

Für $\omega < \omega(q)$ ist $V^{\text{eff}}(\omega, q) < 0$

$\Rightarrow$ Anziehung zwischen Elektronen vermittelt durch Phononen!

Typische $\omega(q) \sim \omega_D \Rightarrow$ Anziehung ist nicht instantan, sondern retardiert, kommt erst nach der Zeit $t_D \sim \omega_D^{-1}$ zustande

7.2. Fröhlich-Hamilton-Operator

Jetzt eine mikroskopische Theorie.

Entwicklung des Periodischen Gitterpotentials nach den Gitterauslenkungen $\vec{u}_n$: (1 Atom pro EZ angenommen)

$$U(\vec{r}) = \sum_n V^{\text{ion}}(\vec{r} - \underbrace{\vec{R}_n + \vec{u}_n}_{\text{Bravais-Gitter}}) \approx$$

$\uparrow$ Potential eines Ions

$$\approx \sum_n \left[V^{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n) - \vec{\nabla} V^{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n) \vec{u}_n + O(u^2) \right]$$

$\rightarrow$ in der zweiten Quantisierung

$$\delta H_{\text{el-ph}} = + \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \sum_n \vec{\nabla} V^{\text{ion}}(\vec{r} - \vec{R}_n) \vec{u}_n \psi_{\sigma}(\vec{r})$$

$$\psi_{\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) c_{\vec{k}\sigma} \quad ; \quad \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}$$

$\uparrow$ Blochfunktionen

7.2. Fröhlich-Hamilton-Operator

Vereinfachte Ableitung: 1 Atom pro EZ;

lange Phononenwellenlänge

→ kontinuierliche Näherung für Auslenkungen von Atomen aus der Gleichgewichtsposition: $\vec{u}_n \rightarrow \vec{u}(\vec{r})$

→ Polarisation $\vec{P}(\vec{r}) = e n \vec{u}(\vec{r})$
 $\uparrow$ Dichte

→ Ladungsdichte $\rho^{\text{ion}}(\vec{r}) = - \vec{\nabla} \cdot \vec{P}(\vec{r})$

→ Wechselwirkungsenergie eines Elektrons

$$U(\vec{r}) = - e \int d^3 r_1 Q(\vec{r} - \vec{r}_1) \rho^{\text{ion}}(\vec{r}_1) \\ = e^2 n \int d^3 r_1 Q(\vec{r} - \vec{r}_1) \vec{\nabla} \vec{u}(\vec{r}_1)$$

$$Q(q) = \frac{4\pi}{q^2 + k_{\text{TF}}^2} \simeq \frac{4\pi}{k_{\text{TF}}^2} \quad - \text{TF-abgeschirmte WW}$$

$$\vec{u}_n = \sum_{j,q} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_j(q)}} [a_{j,q} + a_{j,-q}^\dagger] \vec{e}^{(j)}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n}$$

$$\rightarrow \vec{u}(\vec{r}) \simeq \sum_{j,q} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_j(q)}} [a_{j,q} + a_{j,-q}^\dagger] \vec{e}^{(j)}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

In der zweiten Quantisierung

$$H_{\text{el-ph}} = \sum_{\sigma} \int d^3 r \psi_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r})$$

$$\psi_{\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) c_{\vec{k}\sigma}$$

$\uparrow$ Bloch-Funktionen

$$\rightarrow H_{\text{el-ph}} = \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \sigma} \langle \vec{k}_1 | U | \vec{k}_2 \rangle c_{\vec{k}_1 \sigma}^\dagger c_{\vec{k}_2 \sigma}$$

$$\langle \vec{k}_1 | U | \vec{k}_2 \rangle = \frac{1}{V} e^2 n \int d^3 \vec{r} \int d^3 \vec{r}_1 \psi_{\vec{k}_1}^\dagger(\vec{r}) Q(\vec{r} - \vec{r}_1) \vec{\nabla} \vec{u}(\vec{r}_1) \psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}) =$$

$$= \frac{1}{V} e^2 n \sum_{j,q} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_j(q)}} (-i) \vec{q} \vec{e}^{(j)}(\vec{q}) [a_{j,q} + a_{j,-q}^\dagger] Q(q) \cdot \underbrace{\int d^3r \psi_{k_1}^*(\vec{r}) \psi_{k_2}(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}}}_{N \int_{Ez} u_{k_1}^*(r) u_{k_2}(r) \cdot \delta_{k_1 - k_2 - \vec{q}, \vec{G}}}$$

$\vec{G}$ $\leftarrow$ Reziprokes Gitter

Wir haben benutzt $\psi_k(r) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$

$\uparrow$ Bloch

$\uparrow$ periodisch

Wir vereinfachen etwas und vernachlässigen Umklapp-Prozesse (d.h. Prozesse mit $\vec{G} \neq 0$)

$$\rightarrow H_{el-ph} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma, j} M_{j,\vec{E}}(\vec{q}) C_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger C_{\vec{k}, \sigma} [a_{j,q} + a_{j,-q}^\dagger],$$

$$M_{j,\vec{E}}(\vec{q}) = - \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_j(q)}} e^2 n \frac{4\pi}{k_{TF}^2} i\vec{q} \vec{e}^{(j)}(q) \frac{1}{V_{Ez}} \int d^3r u_{\vec{k}+\vec{q}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Weitere Vereinfachung: i) wir nehmen an, dass die Phononen-Moden exakt longitudinal ($\vec{q} \parallel \vec{e}$) und transversal ($\vec{q} \perp \vec{e}$) sind

Dann trägt nur die longitudinale Mode bei;

$$ii) \text{ für kleine } q \quad \frac{1}{V_{Ez}} \int d^3r u_{\vec{k}+\vec{q}}^*(r) u_{\vec{k}}(r) \simeq 1$$

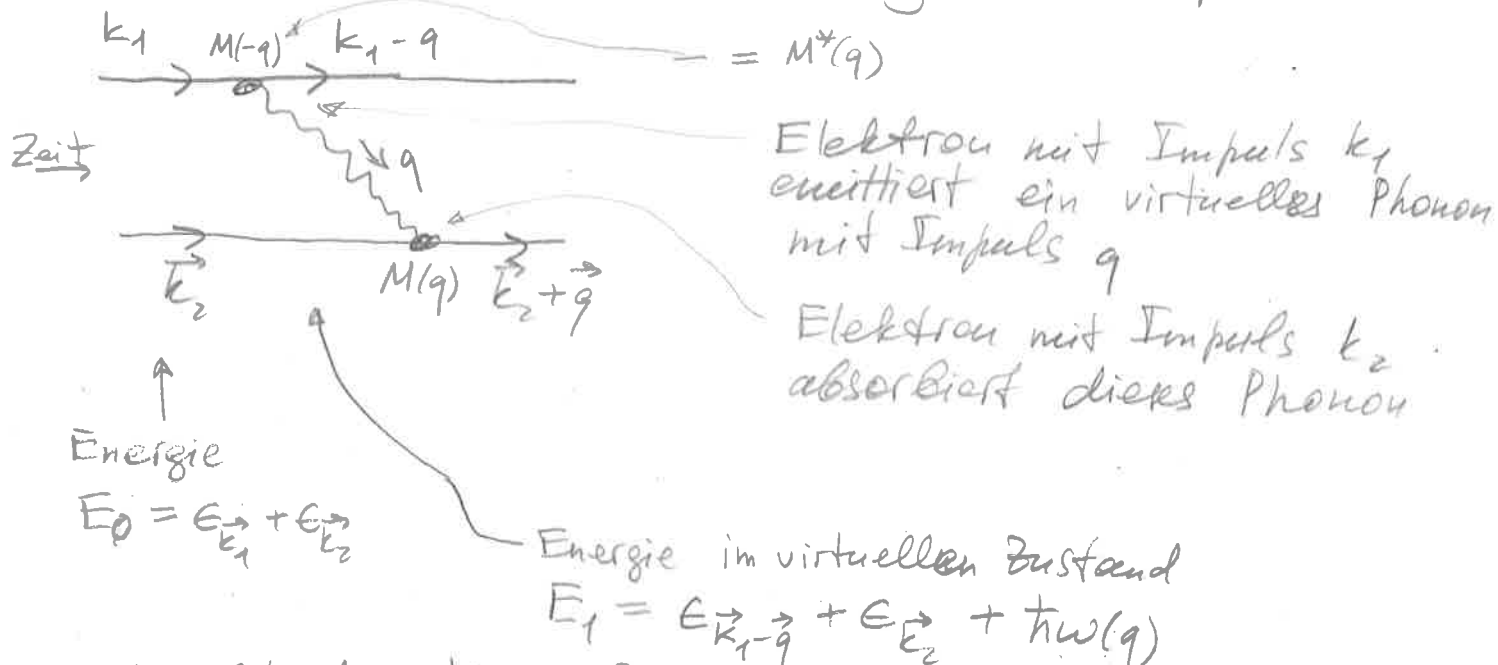
$$\rightarrow H_{el-ph} = \sum_{\vec{E}, \vec{q}, \sigma} M(\vec{q}) C_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger C_{\vec{k}, \sigma} [a_q + a_{-q}^\dagger]$$

$$M(\vec{q}) = -iq \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega(q)}} \frac{4\pi e^2 n}{k_{TF}^2}$$

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma} + \sum_q \hbar \omega_q a_q^\dagger a_q + H_{el-ph}$$

(Hel) (Hph)

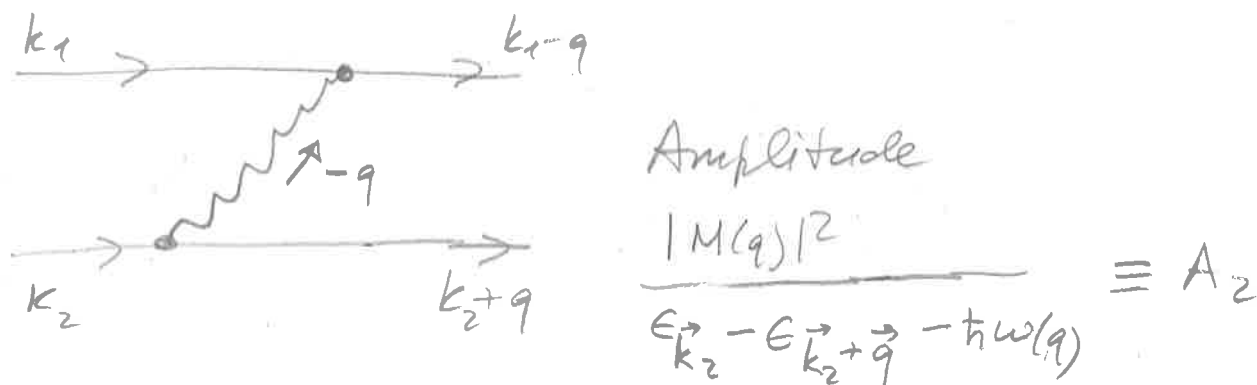
Effektive e-e Ww, induzierte durch Phononen?
Prozess der zweiten Ordnung in Hel-ph:



Amplitude dieses Prozesses
(2. Ordnung der Störungstheorie):

$$\frac{|M(\vec{q})|^2}{E_0 - E_1} = \frac{|M(\vec{q})|^2}{E_{\vec{k}_1} - E_{\vec{k}_1 - \vec{q}} - \hbar\omega(q)} \equiv A_1$$

Es gibt noch einen Prozess, der mit diesem interferiert.



Energierhaltung: $E_{\vec{k}_1} + E_{\vec{k}_2} = E_{\vec{k}_1 - \vec{q}} + E_{\vec{k}_2 + \vec{q}}$

$$\begin{aligned} \rightarrow A_1 + A_2 &= \frac{|M(\vec{q})|^2}{E_{\vec{k}_1} - E_{\vec{k}_1 - \vec{q}} - \hbar\omega(q)} + \frac{|M(q)|^2}{E_{\vec{k}_1 - \vec{q}} - E_{\vec{k}_1} - \hbar\omega(q)} = \\ &= \frac{2 |M(q)|^2 \hbar\omega(q)}{(E_{\vec{k}_1} - E_{\vec{k}_1 - \vec{q}})^2 - (\hbar\omega(q))^2} \end{aligned}$$

→ effektive, durch Phononen induzierte, e-e Ww

$$V_k^{\text{eff}}(q) = \frac{2 |M(q)|^2 \hbar \omega(q)}{(\epsilon_k - \epsilon_{k-q})^2 - (\hbar \omega(q))^2} = \frac{2 |M(q)|^2 \hbar \omega(q)}{\hbar^2 (\omega^2 - \omega^2(q))} \equiv$$

$\hbar \omega = \epsilon_k - \epsilon_{k-q}$ — Energietransfer

Für $\omega < \omega_q$ $V_k(q) < 0 \rightarrow$ Anziehung!

Wir vergleichen mit dem Ergebnis der früheren Berechnung der effektiven (abgeschirmten Ww),

Seite 109:

$$V_{\text{eff}}(\omega, q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{\text{TF}}^2} \left(1 + \frac{\omega^2(q)}{\omega^2 - \omega^2(q)} \right) \times \frac{1}{V} \quad \leftarrow \text{Normierung}$$

↑ durch Phononen induzierter Beitrag

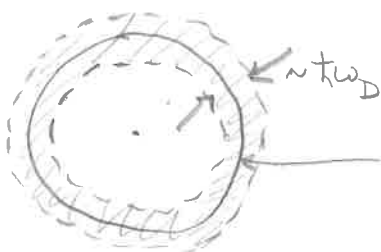
$$\text{jetzt: } V_k^{\text{eff}}(q) = \frac{2q^2 \hbar}{2NM\omega(q)} \frac{\omega(q)}{\hbar(\omega^2 - \omega^2(q))} \left(\frac{4\pi e^2 n}{k_{\text{TF}}^2} \right)^2$$

$$= \frac{1}{V} \frac{4\pi e^2}{k_{\text{TF}}^2} \frac{\omega^2(q)}{\omega^2 - \omega^2(q)} \cdot \underbrace{\frac{4\pi e^2}{k_{\text{TF}}^2} n \frac{q^2}{M\omega^2(q)}}_{\approx 1} \quad \text{— exakte Übereinstimmung}$$

[Wir haben $\omega(q) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{Mk_{\text{TF}}^2}} q$ (Seite 107) benutzt]

Anziehung für $\hbar \omega < \hbar \omega_q \sim \hbar \omega_D$

↑ $\epsilon_k - \epsilon_{k-q}$ (Energietransfer)



Fermikugel (E_F)

→ Instabilität, Supraleitung