Übungen zu Moderne Theoretische Physik III SS 13

Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler, Dr. A. Poenicke

Lösungsvorschlag zu Blatt 12
12.07.2013

---

1. Elektron-Phonon-Streuung:

(a) Die Gesamtstreurate lautet wie angegeben

$$\tau_{\mathbf{p}\sigma}^{-1} = \sum_{\mathbf{p}'} \big(1 - f(\varepsilon_{\mathbf{p}'\sigma})\big)\big(W^{+}_{\mathbf{p}\sigma\to\mathbf{p}'\sigma} + W^{-}_{\mathbf{p}\sigma\to\mathbf{p}'\sigma}\big)\,.$$

Der Ausdruck ergibt sich durch eine Summe über alle Endzustände $(\mathbf{p}'\sigma)$ wobei die einzelnen Übergangsraten noch mit der Wahrscheinlichkeit das der jeweilige Endzustand unbesetzt ist gewichtet werden müssen. Hier wurde schon berücksichtigt, dass die Elektron-Phonon-Streuung spinerhaltend ist. Allgemein müssten die Raten $W^{\pm}_{\mathbf{p}\sigma\to\mathbf{p}'\sigma'}$ berechnet werden, und auch über den Spin der Endzustände σ' summiert werden.

(b) Zunächst müssen die Matrixelemente

$$\langle n_{\mathbf{p}\sigma} = 0, n_{\mathbf{p}'\sigma} = 1, n_{\mathbf{q}\lambda} \mp 1 | H_{el-ph} | n_{\mathbf{p}\sigma} = 1, n_{\mathbf{p}'\sigma} = 0, n_{\mathbf{q}\lambda}\rangle\,,$$

für

$$H_{el-ph} = \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma,\lambda} g^{el-ph}_{\mathbf{q},\lambda} c^{\dagger}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} c_{\mathbf{p},\sigma}(a_{\mathbf{q},\lambda} + a^{\dagger}_{-\mathbf{q},\lambda})$$

berechnet werden.

Ruft man sich in Erinnerung

$$\begin{aligned}
c_{p,\sigma}\,|n_{p,\sigma'}=1\rangle &= (-1)^{\sum\limits_{j<p} n_j}\,|n_{p,\sigma}=0\rangle & c_{p,\sigma}\,|n_{p,\sigma}=0\rangle &= 0\\
c^{\dagger}_{p,\sigma}\,|n_{p,\sigma}=0\rangle &= (-1)^{\sum\limits_{j<p} n_j}\,|n_{p,\sigma}=1\rangle & c^{\dagger}_{p,\sigma}\,|n_{p,\sigma}=1\rangle &= 0\\
a_{q,\lambda}\,|n_{q,\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{q,\lambda}}\,|n_{q,\lambda}-1\rangle & a^{\dagger}_{q,\lambda}\,|n_{q,\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{q,\lambda}+1}\,|n_{q,\lambda}+1\rangle
\end{aligned}$$

erhält man direkt

$$\begin{aligned}
&\langle n_{\mathbf{p}\sigma} = 0, n_{\mathbf{p}'\sigma} = 1, n_{\mathbf{q}\lambda} \mp 1 | H_{el-ph} | n_{\mathbf{p}\sigma} = 1, n_{\mathbf{p}'\sigma} = 0, n_{\mathbf{q}\lambda}\rangle\\
&= \sum_{\bar{\mathbf{p}},\bar{\mathbf{q}},\sigma',\lambda'} g^{el-ph}_{\bar{\mathbf{q}},\lambda'} \langle n_{\mathbf{p}\sigma} = 0, n_{\mathbf{p}'\sigma} = 1, n_{\mathbf{q}\lambda} \mp 1 | c^{\dagger}_{\bar{\mathbf{p}}+\bar{\mathbf{q}},\sigma'} c_{\bar{\mathbf{p}},\sigma'}(a_{\bar{\mathbf{q}},\lambda'} + a^{\dagger}_{-\bar{\mathbf{q}},\lambda'}) | n_{\mathbf{p}\sigma} = 1, n_{\mathbf{p}'\sigma} = 0, n_{\mathbf{q}\lambda}\rangle\\
&= \sum_{\bar{\mathbf{p}},\bar{\mathbf{q}},\sigma',\lambda'} g^{el-ph}_{\bar{\mathbf{q}},\lambda'} \langle n_{\mathbf{q}\lambda} \mp 1 | (a_{\bar{\mathbf{q}},\lambda'} + a^{\dagger}_{-\bar{\mathbf{q}},\lambda'}) | n_{\mathbf{q}\lambda}\rangle\, \delta_{\mathbf{p},\bar{\mathbf{p}}}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{\bar{\mathbf{p}}+\bar{\mathbf{q}},\mathbf{p}'}\\
&= g^{el-ph}_{\mathbf{q},\lambda}\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p} \mp \mathbf{q}) \begin{Bmatrix} \sqrt{n_{\mathbf{q}}} \\ \sqrt{n_{\mathbf{q}}+1} \end{Bmatrix}
\end{aligned}$$

und damit für die Raten aus Goldener Regel

$$\begin{aligned}
W^{\pm}_{\mathbf{p}\to\mathbf{p}'} &= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{q},\lambda} \big|\langle n_{\mathbf{p}} = 0, n_{\mathbf{p}'} = 1, n_{\mathbf{q}} \mp 1 | H_{el-ph} | n_{\mathbf{p}} = 1, n_{\mathbf{p}'} = 0, n_{\mathbf{q}}\rangle\big|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_{\mathbf{p}} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q}})\\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{q},\lambda} |g^{el-ph}_{\mathbf{q},\lambda}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \varepsilon_{\mathbf{p}} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q}})\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p} \mp \mathbf{q}) \begin{Bmatrix} n_{\mathbf{q}} \\ n_{\mathbf{q}}+1 \end{Bmatrix}
\end{aligned}$$

(c)

$$\frac{W^+_{p\to p'}}{W^-_{p'\to p}} = \frac{\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{q},\lambda}|g^{el-ph}_{\mathbf{q},\lambda}|^2\delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}-\varepsilon_{\mathbf{p}}-\hbar\omega_{\mathbf{q}})\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p}-\mathbf{q})N_{\mathbf{q}}}{\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{q},\lambda}|g^{el-ph}_{\mathbf{q},\lambda}|^2\delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}-\varepsilon_{\mathbf{p}'}+\hbar\omega_{\mathbf{q}})\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{q})(N_{\mathbf{q}}+1)}$$

$$= \frac{n_{\mathrm{B}}(\varepsilon_{\mathbf{p}'}-\varepsilon_{\mathbf{p}})}{\big(n_{\mathrm{B}}(\varepsilon_{\mathbf{p}'}-\varepsilon_{\mathbf{p}})+1\big)} = \left(\frac{1}{e^{(\varepsilon_{\mathbf{p}'}-\varepsilon_{\mathbf{p}})\beta}-1}\right)\left(\frac{e^{(\varepsilon_{p'}-\varepsilon_{\mathbf{p}})}}{e^{(\varepsilon_{\mathbf{p}'}-\varepsilon_{\mathbf{p}})\beta}-1}\right)^{-1} = \exp(-\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}'}-\varepsilon_{\mathbf{p}}}{kT})$$

Das Verhältnis der Übergangsraten erfüllt also die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts.

(d) Wir setzen nun die Ergebnisse für $W^\pm$ und die gegebene Kopplungskonstante $g^{el-ph}_{\mathbf{q},\lambda} = g_0\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}/\omega_D}$ in den Ausdruck für die Gesamtstreurate ein, und schreiben die Impulssummen in Integrale um. ($\hbar = 1$)

$$\tau^{-1}_{\mathbf{p},\sigma} = 2\pi 3 g_0^2 \int \frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\big[1-f(\varepsilon_{\mathbf{p}'\sigma})\big]\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_D}$$
$$\times\Big(n_{\mathrm{B}}(\omega_{\mathbf{q}})\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{q})\delta(\epsilon_{\mathbf{p}'}-\epsilon_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{q}})+\big(n_{\mathrm{B}}(\omega_{\mathbf{q}})+1\big)\delta(\epsilon_{\mathbf{p}}-\epsilon_{\mathbf{p}'}-\omega_{\mathbf{q}})\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{q})\Big)$$

Durch die Impulserhaltung läßt sich eine Integration eliminieren

Variante 1: Wir eliminieren $\mathbf{p}'$ und führen die $\mathbf{q}$-Integration explizit aus

$$\tau^{-1}_{\mathbf{p},\sigma} = 3\frac{g_0^2}{(2\pi)^2}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_D}\Big(\big[1-f(\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma})\big]n_{\mathrm{B}}(\omega_{\mathbf{q}})\delta(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{q}})$$
$$+\big[1-f(\varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma})\big]\big(n_{\mathrm{B}}(\omega_{\mathbf{q}})+1\big)\delta(\epsilon_{\mathbf{p}}-\epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{q}})\Big)$$

Jetzt benutzen wir die expliziten Dispersionsrelationen. Für die Elektronen gilt $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(p) = \mathbf{p}^2/2m^*$,wobei m^* die effektive Masse bezeichnet (im Festkörper), für die Phononen im Debeye-Modell $\omega_{\mathbf{q}} = cq$, ($q = |\mathbf{q}|$, $\omega_q \le \omega_D$).
Wir drehen das Koordinatensystem so, dass $\mathbf{p}$ in $\mathbf{z}$-Richtung zeigt. Dann gilt $\mathbf{p}\cdot\mathbf{q} = pq\cos\theta = 2m^*\sqrt{\varepsilon_p\varepsilon_q}\cos\theta$ und

$$\varepsilon_{\mathbf{p}\pm\mathbf{q}} = \frac{(\mathbf{p}\pm\mathbf{q})^2}{2m^*} = \varepsilon_{\mathbf{p}}+\varepsilon_{\mathbf{q}}\pm 2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}\varepsilon_{\mathbf{q}}}\cos\theta = \varepsilon_{\mathbf{p}}+\frac{q^2}{2m^*}\pm\frac{pq\cos\theta}{m^*}$$

Damit erhält man für die Argumente der δ-Funktionen

$$\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}-\varepsilon_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{q}} = \frac{q^2}{2m^*}+\frac{pq\cos\theta}{m^*}-cq$$
$$\varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\varepsilon_{\mathbf{p}}+\omega_{\mathbf{q}} = \frac{q^2}{2m^*}-\frac{pq\cos\theta}{m^*}+cq.$$

Nicht vergessen sollte man noch die innere Ableitung

$$\delta(f(x)) = \sum_i\frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_0)|},\quad x_i \text{ einfache Nullstellen von } f(x) \qquad (1)$$

Mit der Vorarbeit bekommt man dann die inverse Lebensdauer

$$
\begin{aligned}
\tau_{\mathbf{p},\sigma}^{-1} =& 3\frac{g_0^2}{(2\pi)^5}\int q^2 \mathrm{d}q \int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\phi\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\cos\theta\,\frac{\omega_q}{\omega_D}\Big(\big[1-f(\varepsilon_{\mathbf{p}}+\omega_q)\big]n_{\mathrm{B}}(\omega_{\mathbf{q}})\delta(\epsilon_{\mathbf{p+q}}-\epsilon_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{q}})\\
&+\big[1-f(\varepsilon_{\mathbf{p}}-\omega_q)\big]\big(n_{\mathrm{B}}(\omega_{\mathbf{q}})+1\big)\delta(\epsilon_{\mathbf{p}}-\epsilon_{\mathbf{p-q}}-\omega_{\mathbf{q}})\Big)\\
=& 3\frac{g_0^2}{(2\pi)^4}\int q^2\mathrm{d}q\frac{\omega_q}{\omega_D}\left(\frac{2m^*}{pq}\big[1-f(\varepsilon_p+\omega_q)\big]n_{\mathrm{B}}(\omega_q)+\frac{2m^*}{pq}\big[1-f(\varepsilon_{\mathbf{p}}-\omega_q)\big]\big(n_{\mathrm{B}}(\omega_q)+1\big)\right)\\
=& 3\frac{g_0^2}{(2\pi)^4}\frac{2m^*}{pc^3\omega_D}\int\limits_0^{\omega_D}\mathrm{d}\omega_q\,\omega_q^2\Big(\big[1-f(\varepsilon_p+\omega_q)\big]n_{\mathrm{B}}(\omega_q)+\big[1-f(\varepsilon_p-\omega_q)\big]\big(n_{\mathrm{B}}(\omega_q)+1\big)\Big)
\end{aligned}
$$

Variante 2: Wir eliminieren $\mathbf{p}'$ und benutzen gleich die Phononenzustandsdichte. $F(\omega_q)=\omega_q^2/c^3\Theta(\omega_q-\omega_D)$. Dabei allerdings noch die Winkelmittelung durchgeführt werden.

$$\int d^3q = \int \mathrm{d}\omega F(\omega)\int\frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi}$$

Variante 3: Wir eliminieren $\mathbf{q}$ und benutzen die Elektron-Zustandsdichte $N(\varepsilon)=m^{*3/2}\sqrt{\varepsilon}/\sqrt{2}\pi^2$. Auch hier muss die Winkelmittelung durchgeführt werden, zusätzlich muss beachtet werden, dass der Impulsübertrag nur $\omega_q\leq\omega_D$ sein kann.
Die entscheidenden Schritte funktionieren bei beiden Varianten wie bei Variante 1.

(e) Temperaturabhängigkeit der Lebensdauer
Zuerst betrachten wir den Fall $T=0$, dabei gilt:

$$n_{\mathrm{B}}(\omega_q)\xrightarrow{T\to 0}\delta(\omega_q)\quad\text{und}\quad\big[1-f(\varepsilon)\big]\xrightarrow{T\to 0}\Theta(\varepsilon-\varepsilon_{\mathrm{F}})$$

Die Terme mit n_{B} tragen also nichts bei und

$$\tau_\varepsilon^{-1}(T=0)\propto\int\limits_0^{\omega_D}\mathrm{d}\omega\,\omega^2\Theta(\varepsilon-\varepsilon_{\mathrm{F}}-\omega)=\int\limits_0^{\varepsilon-\varepsilon_{\mathrm{F}}}\omega^2\mathrm{d}\omega=(\varepsilon-\varepsilon_{\mathrm{F}})^3 \tag{2}$$

Setzen wir dagegen $\varepsilon=\varepsilon_{\mathrm{F}}$:

$$
\begin{aligned}
\tau_{\varepsilon_{\mathrm{F}}}^{-1}(T)\propto&\int_0^{\omega_D}\mathrm{d}\omega\,\omega^2\left(1-\frac{1}{e^{\beta\omega}+1}\right)\left(\frac{1}{e^{\beta\omega}-1}\right)+\left(1-\frac{1}{e^{-\beta\omega}+1}\right)\left(\frac{1}{e^{\beta\omega}-1}+1\right)\\
=&\int\limits_0^{\omega_D}\mathrm{d}\omega\,\frac{\omega^2}{\sinh(\omega)}=T^3\int\limits_0^{\frac{\omega_D}{kT}}\mathrm{d}x\frac{x^2}{\sinh(x)}
\end{aligned}
$$

Da wir $\frac{\omega_D}{kT}\gg 1$ betrachten sieht man, dass das Integral nur schwach mit der (temperaturabhängigen) oberen Grenze variiert.

2. Tight-Binding-Modell:

Wir verwenden die Transformation von Wannier- zu Blochzuständen

$$c_{r\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N^D}} \sum_{k}^{BZ} e^{ik\cdot r} c_{k\sigma}^{\dagger} \tag{3}$$

$$c_{r\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N^D}} \sum_{k}^{BZ} e^{-ik\cdot r} c_{k\sigma} \tag{4}$$

$$\tag{5}$$

und erhalten

$$H = -t \sum_{\langle r,r'\rangle,\sigma} c_{r\sigma}^{\dagger} c_{r'\sigma} + c_{r'\sigma}^{\dagger} c_{r\sigma} \tag{6}$$

$$= -\frac{t}{N^D} \sum_{\langle r,r'\rangle,\sigma} \sum_{k,k'}^{BZ} e^{ik\cdot r - ik'\cdot r'} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k'\sigma} + e^{ik'\cdot r' - ik\cdot r} c_{k'\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \tag{7}$$

$$\tag{8}$$

Für eine allgemeine Gitterkonstante $a = (a_1, a_2, \ldots, a_D)$ und $r = (a_1 n_1, a_2 n_2, \ldots, a_D n_D)$ berechnen wir

$$\frac{1}{N^D} \sum_{\langle r,r'\rangle} \sum_{k,k'} e^{ik\cdot r - ik'\cdot r'} = \frac{1}{N^D} \sum_{j=1}^{D} \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{k,k'}^{BZ} e^{ia_j k_j n - ia_j k_j' (n+1)} \tag{9}$$

$$= \frac{1}{N^D} \sum_{j=1}^{D} \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{k,k'}^{BZ} e^{ia_j (k_j - k_j') n} e^{-ia_j k_j'} \tag{10}$$

$$= \sum_{j=1}^{D} \sum_{k}^{BZ} e^{-ia_j k_j} \quad \text{für } k_j - k_j' = 2\pi/a_j \text{ und } N \to \infty \tag{11}$$

Einsetzen liefert

$$H = -t \sum_{k}^{BZ} \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^{D} \left(e^{-ik_j a_j} + e^{ik_j a_j} \right) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \tag{12}$$

$$= -2t \sum_{k}^{BZ} \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^{D} \cos(k_j a_j) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \tag{13}$$

Wir finden die Dispersionsrelation

$$\epsilon(k) = -2t \sum_{j=1}^{D} \cos(k_j a_j) \tag{14}$$