

## Kap. II Wechselwirkungen in Festkörpern und 2. Quantisierung

Im Festkörper betrachten wir Ionen und Leitungselektronen. Die ersten bilden ein regelmäßiges Gitter, abgesehen von Störstellen durch Fremdatome oder Gitterfehler und ihrer Schwingungen um die Gleichgewichtslage. Die Leitungselektronen können sich relativ frei bewegen. Der Hamilton-Operator des Gesamtsystems

$$H = \sum_J \frac{\mathbf{p}_J^2}{2M} + U(\mathbf{R}) + \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} + V(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

setzt sich zusammen aus der kinetischen Energie der Ionen (hier betrachten wir nur eine Ionensorte mit Masse  $M$ ), ihrer Wechselwirkung (abhängend von allen Ionenkoordinaten  $\mathbf{R} = \{\mathbf{R}_J\}$ ), der kinetischen Energie der Elektronen und ihrer Wechselwirkung (abhängend von  $\mathbf{r} = \{\mathbf{r}_i\}$ ) sowie der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Ionen  $V(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ . Für punktförmige Ionen gilt

$$U(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \sum_{J \neq J'} \frac{Z_J Z_{J'} e^2}{|\mathbf{R}_J - \mathbf{R}_{J'}|} \quad \text{und} \quad V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = - \sum_{i, J} \frac{Z_J e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_J|} .$$

Bei ausgedehnten Ionen kann die van-der-Waals- oder Austauschwechselwirkung zu komplizierteren Ausdrücken führen.

### 2.1 Adiabatische Näherung (Born-Oppenheimer)

Die sehr unterschiedlichen Massen und Beweglichkeiten von Elektronen und Ionen ermöglichen eine Näherung in mehreren Schritten:

1.) Die leichten und beweglichen Elektronen sehen in niedrigster Ordnung ein statisches Gitter der schweren und langsamen Ionen. Sie stellen sich sehr schnell auf die aktuellen Positionen der Ionen und beeinflussen dadurch auch deren Wechselwirkungen (Abschirmung). Aus diesem Grund setzen wir an, dass die Gesamtwellenfunktion faktorisiert  $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{R})$ . Die Elektronenwellenfunktion  $\phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$  hängt parametrisch von den Ionenkoordinaten  $\mathbf{R}$  ab. Die Wellenfunktion der Ionen wird zwar durch die Elektronen beeinflusst, deren Eigenschaften sind aber in einfacher Näherung durch die Ionenkoordinaten bestimmt. Daher hängt  $\chi(\mathbf{R})$  nur von  $\mathbf{R}$  ab.

2.) Bei vorgegebenen Ionenkoordinaten ergibt sich also folgendes Eigenwertproblem

$$H^{\text{el}} \phi_{\mathbf{R},\Lambda}(\mathbf{r}) = \left\{ \sum_{i=1} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} + V(\mathbf{R},\mathbf{r}) \right\} \phi_{\mathbf{R},\Lambda}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{R},\Lambda}^{\text{el}} \phi_{\mathbf{R},\Lambda}(\mathbf{r})$$

für die Vielteilcheneigenzustände  $\phi_{\mathbf{R},\Lambda}(\mathbf{r})$  und -energien  $E_{\mathbf{R},\Lambda}^{\text{el}}$  der Elektronen. Im idealen periodischen Gitter, wenn die Ionen nicht ausgelenkt sind,  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$ , sind die Eigenzustände einzelner Elektronen Bloch-Zustände, charakterisiert durch Wellenvektoren (Kristallimpuls  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ ), Bandindex und Spin,  $\lambda = \mathbf{p}, n, \sigma$ . Die zugehörigen Eigenenergien definieren die 'Bandstruktur'  $\varepsilon_{\mathbf{p},n,\sigma}$ . Einfache Grenzfälle sind die „nahezu freien Elektronen“ oder die Ergebnisse des tight-binding Modells. Die Gesamtwellenfunktion der N Elektronen ist dann als antisymmetrisiertes Produkt der Einteilchenwellenfunktion, d.h. als Slater-Determinante darstellbar. Sie und die gesuchte Gesamtenergie der Elektronen hängen dann von den Besetzungszahlen  $\Lambda = \{n_{\mathbf{p},n,\sigma}\}$  mit  $n_{\mathbf{p},n,\sigma} = 0, 1$  ab,

$$E_{\mathbf{R}_0, \{n_{\mathbf{p},n,\sigma}\}}^{\text{el}} = \sum_{\mathbf{p},n,\sigma} n_{\mathbf{p},n,\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p},n,\sigma} \quad \text{mit} \quad \sum_{\mathbf{p},n,\sigma} n_{\mathbf{p},n,\sigma} = N.$$

Bei der Berechnung der Bandstruktur wird die Elektron-Elektron-Wechselwirkung nicht oder bestenfalls approximativ berücksichtigt. Es bleibt ein Problem diese Wechselwirkungseffekte zu beschreiben. Dies kann aber häufig im Rahmen einer Störungstheorie angegangen werden.

3.) Im Prinzip können wir auch die Eigenenergien und -zustände der Elektronen für beliebige Ionenkoordinaten  $\mathbf{R}$  berechnen. Für das folgende genügt es anzunehmen, sie seien im Grundzustand. Das Ergebnis bezeichnen wir mit  $E_{\mathbf{R}}^{\text{el}}$  und  $\phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$ . Dann bleibt für das gekoppelte System aus Ionen und Elektronen das folgende Eigenwertproblem

$$\begin{aligned} H \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{R}) &= \left\{ \sum_{\mathbf{J}} \frac{\mathbf{p}_{\mathbf{J}}^2}{2M} + U(\mathbf{R}) + E_{\mathbf{R}}^{\text{el}} \right\} \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{R}) = E \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{R}) \\ &= \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) \left\{ \sum_{\mathbf{J}} \frac{\mathbf{p}_{\mathbf{J}}^2}{2M} + U(\mathbf{R}) + E_{\mathbf{R}}^{\text{el}} \right\} \chi(\mathbf{R}) - \sum_{\mathbf{J}} \frac{\hbar^2}{2M} \left\{ 2 \frac{\partial \chi(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}_{\mathbf{J}}} \frac{\partial \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{R}_{\mathbf{J}}} + \chi(\mathbf{R}) \frac{\partial^2 \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{R}_{\mathbf{J}}^2} \right\}. \end{aligned}$$

Der erste Term liefert das Eigenwertproblem für die Ionen

$$\left\{ \sum_{\mathbf{J}} \frac{\mathbf{p}_{\mathbf{J}}^2}{2M} + U_{\text{eff}}(\mathbf{R}) \right\} \chi(\mathbf{R}) = E \chi(\mathbf{R}).$$

Dabei ist die effektive Ionenwechselwirkung  $U_{\text{eff}}(\mathbf{R})$  wesentlich durch die Elektronen beeinflusst  $U_{\text{eff}}(\mathbf{R}) = U(\mathbf{R}) + E_{\mathbf{R}}^{\text{el}}$ , und zwar wird sie durch die Elektronen abgeschirmt. Diese abgeschirmte Wechselwirkung klingt genügend schnell ab, so dass eine Entwicklung in den Ionenauslenkungen  $\mathbf{Q}(t) = \mathbf{R}(t) - \mathbf{R}_0$  gemacht werden darf. Eine harmonische Entwicklung von  $U_{\text{eff}}(\mathbf{R})$  in diesen

Auslenkungen und anschließende Diagonalisierung führt dann auf die Beschreibung der Gitterschwingungen durch Eigenmoden mit

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \left\{ \frac{\mathbf{P}_{\mathbf{q}, \lambda}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega_{\mathbf{q}, \lambda}^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{q}, \lambda}^2 \right\}.$$

Die Eigenmoden sind Bloch-Zustände, charakterisiert durch die Wellenzahl  $\mathbf{q}$  und Polarisationsindex  $\lambda = 1, t_1, t_2$  für longitudinale und zwei transversale Auslenkungen. I. A. gibt es sowohl akustische wie optische Phononmoden. Hier beschränken wir uns auf die akustischen.

4.) Der gemischte Term des Eigenwertproblems beschreibt die abgeschirmte Elektron-Phonon Wechselwirkung. In Störungstheorie behandelt (s.u.) führt sie zu Übergängen zwischen den Eigenzuständen. Zur Abschätzung der Stärke betrachten wir das Matrixelement

$$\langle \Psi | H_1 | \Psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2M} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{r} \left\{ 2 \phi_{\mathbf{R}}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{R}} \chi^*(\mathbf{R}) \frac{\partial \chi(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}} + \phi_{\mathbf{R}}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 \phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{R}^2} |\chi^*(\mathbf{R})|^2 \right\}.$$

Der erste Term enthält einen Term proportional zu  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \int d\mathbf{r} |\phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})|^2$  der verschwindet, da  $\phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$  normiert ist. Der zweite Term ist um einen Faktor  $m/M$  kleiner als die elektronische kinetische Energie.  $H_1$  kann daher in Störungstheorie behandelt werden.

Störstellen im Gitter oder Gitterfehler werden durch ein Störstellen-Potenzial beschrieben

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = V(\mathbf{R}_0, \mathbf{r}) + V^{\text{imp}}(\mathbf{r}) .$$

Dieses wird ebenso wie die Elektron-Elektron und Elektron-Phonon Wechselwirkung meist in Störungstheorie behandelt.

Für die weitere Beschreibung dieser und weiterer Effekte ist der Formalismus der sogenannten 2. Quantisierung sehr nützlich.

## 2.2 Phononen

Die Moden der Gitterschwingungen - in harmonischer Näherung sind dies alles harmonische Oszillatoren - sind durch Wellenzahl  $\mathbf{q}$  und Polarisation  $\lambda$  beschrieben. (Der Einfachheit halber betrachten wir hier nur akustische Phononen. Die Verallgemeinerung ist offensichtlich möglich.) Ihre Zustände und Energien sind durch die Anregungszahlen  $n_{\mathbf{q}, \lambda} = 0, 1, 2 \dots$  beschrieben (Fock-Raum) und die Gesamtheit der Moden durch

$$|n_1, \dots, n_{\mathbf{q},\lambda}, \dots\rangle \text{ und } E_{\{n_{\mathbf{q},\lambda}\}}^{\text{ph}} = \sum_{\mathbf{q},\lambda} \hbar \omega_{\mathbf{q},\lambda} (n_{\mathbf{q},\lambda} + 1/2).$$

Für jede Mode  $\mathbf{q},\lambda$  können wir, wie bekannt vom harmonischen Oszillator, Auf- und Absteigeoperatoren,  $a_{\mathbf{q},\lambda}^+$  und  $a_{\mathbf{q},\lambda}$  einführen. Ihre Wirkung in der Basis der Besetzungszahlen ist

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{q},\lambda}^+ |n_1, \dots, n_{\mathbf{q},\lambda}, \dots\rangle &= \sqrt{n_{\mathbf{q},\lambda} + 1} |n_1, \dots, n_{\mathbf{q},\lambda} + 1, \dots\rangle \\ a_{\mathbf{q},\lambda} |n_1, \dots, n_{\mathbf{q},\lambda}, \dots\rangle &= \sqrt{n_{\mathbf{q},\lambda}} |n_1, \dots, n_{\mathbf{q},\lambda} - 1, \dots\rangle . \end{aligned}$$

Sie erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$[a_{\mathbf{q},\lambda}, a_{\mathbf{q}',\lambda'}^+] = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{\lambda\lambda'} \quad , \quad [a_{\mathbf{q},\lambda}, a_{\mathbf{q}',\lambda'}] = [a_{\mathbf{q},\lambda}^+, a_{\mathbf{q}',\lambda'}^+] = 0 \quad .$$

Der Operator  $n_{\mathbf{q},\lambda} = a_{\mathbf{q},\lambda}^+ a_{\mathbf{q},\lambda}$  zählt, wievielfach die Mode  $\mathbf{q},\lambda$  angeregt ist. Entsprechend gilt für den Hamilton-Operator

$$H_{\text{ph}} = \sum_{\mathbf{q},\lambda} \hbar \omega_{\mathbf{q},\lambda} (a_{\mathbf{q},\lambda}^+ a_{\mathbf{q},\lambda} + \frac{1}{2}) .$$

Weitere Operatoren können mit Hilfe der Erzeuger und Vernichter geschrieben werden. Z.B. ist die Amplitude der Gitterschwingung am Ort  $\mathbf{R}$  mit Polarisationsrichtung  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{q},\lambda}$

$$\mathbf{Q}_{\lambda}(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{q},\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2M \omega_{\mathbf{q},\lambda}}} (a_{\mathbf{q},\lambda} + a_{-\mathbf{q},\lambda}^+) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} .$$

Jede Anregung einer Mode  $\mathbf{q}, \lambda$  kann auch als ein **Phonon** mit Wellenvektor  $\mathbf{q}$  und Polarisation  $\lambda$  interpretiert werden. Die Zustände des Gesamtsystems sind charakterisiert durch die Angabe der Zahl der Phononen in den verschiedenen Moden. Die Auf- und Absteigeoperatoren werden dann zu **Phonon-Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren**  $a_{\mathbf{q},\lambda}^+$  und  $a_{\mathbf{q},\lambda}$  .

## 2.3 Bose-Teilchen

Auch für Teilchen mit Masse bietet sich eine Darstellung von Energie, Teilchenzahl und Zuständen durch Besetzungszahlen  $n_{\lambda} = 0,1,2 \dots$  an (Fock-Raum). Wenn wir, darüber hinaus, analog zum Beispiel der Phononen Erzeuger und Vernichter für Teilchen einführen, können wir beliebige Ein- und Mehrteilchenoperatoren umschreiben. Dies wird im Folgenden gezeigt.

Wir gehen aus von einer Basis gebildet aus den Eigenzuständen des wechselwirkungsfreien Systems

$$H_0 = \sum_{i=1}^N h_i, \quad \text{mit } h_i |\lambda\rangle_i = \varepsilon_\lambda |\lambda\rangle_i .$$

Bei unterscheidbaren Teilchen ist die Gesamtwellenfunktion dann ein Produkt  $|\lambda_1, \dots, \lambda_i, \dots\rangle = |\lambda_1\rangle_1 \dots |\lambda_i\rangle_i \dots$ , was bedeutet, dass das Teilchen 1 im Zustand  $\lambda_1$  ist, ... , das Teilchen  $i$  im Zustand  $\lambda_i$ , .... Wenn die Teilchen ununterscheidbar sind und der Bose-Statistik gehorchen, muss die Wellenfunktion durch Summieren über alle Permutationen symmetrisiert werden. In der Besetzungszahldarstellung geben wir nur an, wie häufig jeder Zustand  $\lambda$  besetzt ist. Dabei gilt für Bose-Teilchen  $n_\lambda = 0, 1, 2, \dots$ . Damit gilt

$$H_0 |\{n_\lambda\}\rangle = E_{\{n_\lambda\}} |\{n_\lambda\}\rangle \quad \text{mit} \quad E_{\{n_\lambda\}} = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda n_\lambda$$

Für die Zustände gilt nach geeigneter Normierung

$$|\{n_\lambda\}\rangle = |n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{n_1! \dots n_\lambda! \dots}} \sum_P |\lambda_1, \dots, \lambda_i, \dots\rangle$$

(Die Normierung ist etwas subtil und wird hier nicht weiter erläutert. Siehe z.B. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene* für weitere Details.)

Wir führen nun **Erzeuger und Vernichter** für die Bose-Teilchen ein mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} a_\lambda^\dagger |n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle &= \sqrt{n_\lambda + 1} |n_1, \dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle \\ a_\lambda |n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle &= \sqrt{n_\lambda} |n_1, \dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle \end{aligned}$$

und den damit konsistent zusammenhängenden Vertauschungsrelationen

$$[a_\lambda, a_{\lambda'}] = [a_\lambda^\dagger, a_{\lambda'}^\dagger] = 0; \quad [a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda, \lambda'} .$$

Offensichtlich ist  $n_\lambda = a_\lambda^\dagger a_\lambda$  ein Zähloperator und es gilt

$$H_0 = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda a_\lambda^\dagger a_\lambda \quad \text{und} \quad N = \sum_\lambda a_\lambda^\dagger a_\lambda .$$

Mit Hilfe der Erzeuger und Vernichter können wir aber auch beliebige Operatoren umschreiben, z.B. einen **Einteilchenoperator**, auch wenn er nichtdiagonal in den Basiszuständen ist (aber hier der Einfachheit halber für alle Teilchen  $i$  gleich)

$$T = \sum_{i=1}^N t_i(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \dots) .$$

Mit i.A. nicht-diagonalen Matrixelementen  $t_{\lambda, \lambda'} = {}_i \langle \lambda | t_i | \lambda' \rangle_i = \int d^3r \phi_\lambda^*(\mathbf{r}) t_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \phi_{\lambda'}(\mathbf{r})$

D.h.  $t_i = \sum_{\lambda, \lambda'} t_{\lambda, \lambda'} |\lambda\rangle_i \langle \lambda'|$  bzw.  $T = \sum_{\lambda, \lambda'} t_{\lambda, \lambda'} \sum_i |\lambda\rangle_i \langle \lambda'|$

Nun gilt

$$\sum_i |\lambda\rangle_i \langle \lambda'| \left| n_1, \dots, n_\lambda, \dots, n_{\lambda'}, \dots \right\rangle = n_{\lambda'} \frac{\sqrt{n_\lambda + 1}}{\sqrt{n_{\lambda'}}} \left| n_1, \dots, n_\lambda + 1, \dots, n_{\lambda'} - 1, \dots \right\rangle$$

Der erste Faktor  $n_{\lambda'}$  zählt, wie oft die Einteilchenwellenfunktion  $|\lambda'\rangle_i$  in der Vielteilchenwellenfunktion vorkommt und so das Skalarprodukt einen von Null verschiedenen Wert annimmt. Da durch das Skalarprodukt diese Einteilchenwellenfunktion wegfällt, nimmt  $n_{\lambda'}$  um 1 ab. Andererseits kommt eine Einteilchenwellenfunktion im Zustand  $|\lambda\rangle_i$  hinzu, und  $n_\lambda$  nimmt um 1 zu. Das Verhältnis der Wurzeln berücksichtigt die veränderte Normierung. Der neue Zustand auf der rechten Seite incl. der Vorfaktoren kann aber auch als  $a_\lambda^+ a_{\lambda'} \left| n_1, \dots, n_\lambda, \dots, n_{\lambda'}, \dots \right\rangle$  geschrieben werden. Daraus schließen wir dass

$$\sum_i |\lambda\rangle_i \langle \lambda'| = a_\lambda^+ a_{\lambda'}$$

und

$$T = \sum_{\lambda, \lambda'} t_{\lambda, \lambda'} a_\lambda^+ a_{\lambda'}$$

Der Operator bewirkt Übergänge von Zuständen  $\lambda$  nach  $\lambda'$  mit den Amplituden  $t_{\lambda, \lambda'}$ , was durch Vernichten und gleichzeitiges Erzeugen eines Pairs von Teilchen in den entsprechenden Zuständen dargestellt werden kann.

Analog gilt (hier ohne Herleitung; unten folgt eine detaillierte Herleitung für Fermionen) für einen **Zweiteilchenoperator**  $F = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} f^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ , dass

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu, \nu, \rho} \langle \lambda, \mu | f^{(2)} | \nu, \rho \rangle a_\lambda^+ a_\mu^+ a_\rho a_\nu$$

Der Operator bewirkt Übergänge von 2 Teilchen aus den Zuständen  $\rho, \nu$  nach  $\mu, \lambda$  mit den Amplituden

$$\langle \lambda, \mu | f^{(2)} | \nu, \rho \rangle = \int d^3 r_i \int d^3 r_j \phi_\lambda^*(\mathbf{r}_i) \phi_\mu^*(\mathbf{r}_j) f^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \phi_\nu(\mathbf{r}_i) \phi_\rho(\mathbf{r}_j)$$

### 2.4. Fermi-Teilchen: Elektronen im Festkörper

Auch für Fermionen bietet sich eine Darstellung von Energie, Teilchenzahl und Zuständen durch Besetzungszahlen und ein Umschreiben in 2. Quantisierung an. Wir gehen aus von einer Basis gebildet aus den Eigenzuständen des wechselwirkungsfreien Systems

$$H_0 = \sum_{i=1}^N h_i, \quad \text{mit } h_i |\lambda\rangle_i = \varepsilon_\lambda |\lambda\rangle_i .$$

Die Zustände und Quantenzahlen hängen ab vom konkreten System. Im idealen Gitter sind die Eigenzustände einzelner Elektronen Bloch-Zustände, charakterisiert durch Wellenvektoren (Kristallimpulse), Bandindex und Spin,  $\lambda = (\mathbf{p}, n, \sigma)$ , und die zugehörigen Eigenenergien definieren die 'Bandstruktur'  $\varepsilon_{\mathbf{p}, n, \sigma}$ . Im Folgenden betrachten wir der Einfachheit halber nur ein Band und unterdrücken den Bandindex.

Zustände des Vielteilchenproblems können als antisymmetrisiertes Produkt (Slater-Determinante) der Einteilchenzustände mit  $|\lambda\rangle_i$ , oder einfacher durch die Angabe der Besetzungszahlen der Einteilchenzustände beschrieben (Fock-Raum) werden

$$|n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle .$$

Für Fermionen gilt das Pauli Prinzip, und jeder Zustand kann maximal einfach besetzt sein, d.h. es gilt  $n_\lambda = 0, 1$ .

Auch für Fermionen führen wir **Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren**  $c_\lambda^+$  und  $c_\lambda$  ein, die die Besetzungszahl eines Einteilchenzustands erhöhen oder erniedrigen

$$\begin{aligned} c_\lambda^+ |n_1, \dots, n_\lambda = 0, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_{\nu < \lambda} n_\nu} |n_1, \dots, n_\lambda = 1, \dots\rangle \\ c_\lambda |n_1, \dots, n_\lambda = 1, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_{\nu < \lambda} n_\nu} |n_1, \dots, n_\lambda = 0, \dots\rangle \\ c_\lambda^+ |n_1, \dots, n_\lambda = 1, \dots\rangle &= c_\lambda |n_1, \dots, n_\lambda = 0, \dots\rangle = 0 \end{aligned}$$

Der Faktor  $(-1)^{\sum_{\nu < \lambda} n_\nu}$  ist nötig, um den Vorzeichenwechsel der Vielteilchenwellenfunktion bei Vertauschen von zwei Fermionen korrekt zu liefern. (Offensichtlich war hier eine zunächst willkürlich wählbare, aber dann feste Reihenfolge der Zustände nötig.) Die Erzeuger und Vernichter von Fermi-Teilchen erfüllen die **Antivertauschungsrelationen**

$$[c_\lambda, c_{\lambda'}^+]_+ = \delta_{\lambda\lambda'} \quad , \quad [c_\lambda, c_{\lambda'}]_+ = [c_\lambda^+, c_{\lambda'}^+]_+ = 0 .$$

Der Operator  $n_\lambda = c_\lambda^+ c_\lambda$  zählt die Besetzung des Zustands  $\lambda$ . Der Teilchenzahl- und Hamilton-Operator wechselwirkungsfreier Elektronen können daher einfach geschrieben werden als

$$N_{\text{el}} = \sum_{\lambda} c_\lambda^+ c_\lambda \quad \text{und} \quad H_{\text{el}} = \sum_{\lambda} \varepsilon_\lambda c_\lambda^+ c_\lambda$$

bzw. für Bloch-Zustände (hier nur ein Band) bei Berücksichtigung des Spins

$$N_{\text{el}} = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma} \quad \text{und} \quad H_{\text{el}} = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma}$$

Anstelle der Erzeuger und Vernichter im Fockraum (Besetzung der Einteilchenzustände) können wir auch entsprechende „**Feldoperatoren**“ im Ortsraum einführen. Mit  $\varphi_{\lambda}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \lambda \rangle$  sei

$$\psi^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} c_{\lambda}^{\dagger} \varphi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \quad ; \quad \psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} c_{\lambda} \varphi_{\lambda}(\mathbf{r})$$

bzw. für die - häufig verwendete - Basis aus ebenen Wellen und Spinoren

$$\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}, \sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \chi_{\sigma}^{\text{T}*} ; \quad \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}, \sigma} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \chi_{\sigma}$$

Hier bezeichnet  $\chi_{\sigma}$  den Zustand im Spinraum. Für Spin-1/2-Teilchen ist es ein zwei-komponentiger Spinor, z.B.  $\chi_{\uparrow}^{\text{T}*} = (1, 0)$  und  $\chi_{\downarrow}^{\text{T}*} = (0, 1)$ . (Zur Unterscheidung vom Wechselwirkungspotenzial ist im Folgenden das Volumen des Systems mit  $\Omega$  bezeichnet.)

Die Feldoperatoren erfüllen die Antivertauschungsrelationen

$$[\psi(\mathbf{r}), \psi^{\dagger}(\mathbf{r}')]_{+} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad ; \quad [\psi^{\dagger}(\mathbf{r}), \psi^{\dagger}(\mathbf{r}')]_{+} = [\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')]_{+} = 0$$

bzw. wenn wir den Spin explizit schreiben

$$[\psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}')]_{+} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} \quad ; \quad [\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}')]_{+} = [\psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')]_{+} = 0$$

Dies folgt aus

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{r}), \psi^{\dagger}(\mathbf{r}')]_{+} &= \sum_{\lambda, \lambda'} [c_{\lambda}, c_{\lambda'}^{\dagger}]_{+} \varphi_{\lambda}(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'}^*(\mathbf{r}') \\ &= \sum_{\lambda} \varphi_{\lambda}(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Feldoperatoren können wir auch weitere Operatoren ausdrücken. Zum Beispiel ist der **Operator für die lokale Teilchendichte**

$$\rho(\mathbf{r}) = \psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad \text{bzw. bei Berücksichtigung des Spins} \quad \rho_{\sigma}(\mathbf{r}) = \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}).$$

Zur Begründung zeigen wir, dass der Erwartungswert dieses Operators im Fock-Raum mit dem Erwartungswert in der üblichen Darstellung (1. Quantisierung) übereinstimmt: Üblicherweise würden wir den Teilchendichteoperator eines N-Teilchensystems wie folgt schreiben:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{i}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathbf{i}})$$



Wir bestimmen seinen Erwartungswert in einem Zustand  $\Phi_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ , bei dem  $N$  Fermionen die Zustände  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$  besetzen. In der Darstellung durch Wellenfunktionen ist  $\Phi$  eine Slater-Determinante aufgebaut aus genau diesen  $\varphi_{\lambda_j}(\mathbf{r}_i)$ . Wegen deren Orthogonalität gilt

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \rho(\mathbf{r}) | \Phi \rangle &= \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N \Phi_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \left[ \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right] \Phi_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \sum_{i=1}^N |\varphi_{\lambda_i}(\mathbf{r})|^2 \end{aligned}$$

Andererseits gilt  $\rho(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda, \lambda'} c_\lambda^\dagger c_{\lambda'} \varphi_\lambda^*(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r})$ . Für den Erwartungswert dieses Operators für einen Zustand im Fock-Raum  $|n_{\lambda_1}=1, n_{\lambda_2}=1, \dots, n_{\lambda_N}=1, 0, 0, \dots\rangle$ , bei dem die Zustände  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$  besetzt sind und alle anderen leer (wir haben die Zustände o.B.d.A. so angeordnet) finden wir

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda, \lambda'} \langle n_{\lambda_1}=1, n_{\lambda_2}=1, \dots, n_{\lambda_N}=1, 0, 0, \dots | c_\lambda^\dagger c_{\lambda'} | n_{\lambda_1}=1, n_{\lambda_2}=1, \dots, n_{\lambda_N}=1, 0, 0, \dots \rangle \\ \times \varphi_\lambda^*(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r}) = \sum_{\text{besetzte Zustände}} |\varphi_\lambda(\mathbf{r})|^2 = \sum_{i=1}^N |\varphi_{\lambda_i}(\mathbf{r})|^2 \end{aligned}$$

Offensichtlich trägt in der Doppelsumme nur  $\lambda = \lambda'$  bei, und wir erhalten dasselbe Ergebnis wie zuvor, was die Äquivalenz der Darstellungen demonstriert.

Analog können wir jeden **Einteilchenoperator**, den wir von der üblichen Quantenmechanik her kennen (1. Quantisierung), durch einen entsprechenden Operator in 2. Quantisierung schreiben:

$$O^{(1)} = \sum_{i=1}^N O^{(1)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) \rightarrow O^{(1)} = \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) O^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda, \lambda'} O_{\lambda, \lambda'}^{(1)} c_\lambda^\dagger c_{\lambda'}$$

$$\text{mit } O_{\lambda, \lambda'}^{(1)} = \int d^3\mathbf{r} \varphi_\lambda^*(\mathbf{r}) O^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r}) = \langle \lambda | O^{(1)} | \lambda' \rangle$$

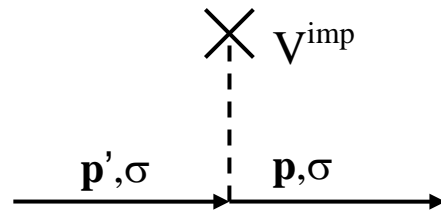
Ein Beispiel bietet die **kinetische Energie**. Durch Feldoperatoren ausgedrückt bzw. in der Basis der ebenen Wellen-Zustände und - jetzt explizit berücksichtigt - Spinoren ist sie

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \rightarrow \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{r} \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} c_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p},\sigma}$$

**Störstellen** im Gitter führen zu einem extra Potenzial  $V^{\text{imp}}(\mathbf{r})$  für die Elektronen. Der entsprechende Beitrag zum Hamilton-Operator lautet

$$H_{el-imp} = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^+(\mathbf{r}) V^{imp}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$$

$$= \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \sigma} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}^{imp} c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}', \sigma}$$



wobei  $V_{\mathbf{q}}^{imp} = \frac{1}{\Omega} \int d^3r V^{imp}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$  die Fourier-Transformierte des Störstellenpotenzials ist.

(Hier und im Folgenden definieren wir die Fourier-Transformation so, dass die Dimension, hier Energie, erhalten bleibt. Dies ist aber in der Literatur nicht einheitlich so. Tatsächlich wird dort häufig, um dem Problem elegant aus dem Weg zu gehen, das Volumen  $\Omega=1$  gesetzt, und erst in Endergebnissen wieder  $\Omega$  eingesetzt.)

Im Allgemeinen wird  $H_{el-imp}$  störungstheoretisch behandelt und führt zu Übergängen zwischen den ungestörten Zuständen  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{p}'$ .

Die 2. Quantisierung erlaubt es auch Mehrteilchenoperatoren bequem darzustellen. Z.B. ist die **Elektron-Elektron-Wechselwirkung** beschrieben durch den Hamilton-Operator

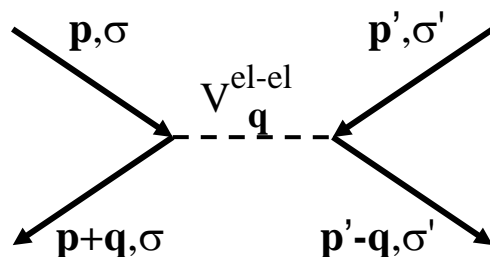
$$H_{el-el} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V^{el-el}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' V^{el-el}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') [\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') - \rho(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] ]$$

wobei  $\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma}(\mathbf{r})$  die totale Elektronendichte ist. Mit den Feldoperatoren ausgedrückt wird

$$H_{el-el} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3r \int d^3r' V^{el-el}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \psi_{\sigma}^+(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}, \sigma\sigma'} V_{\mathbf{q}}^{el-el} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^+ c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}, \sigma'}^+ c_{\mathbf{p}', \sigma'} c_{\mathbf{p}, \sigma}$$

Die Ordnung der Erzeuger und Vernichter wie angeschrieben ist zu beachten. Die Vertauschung dieser Operatoren hat auch den Term  $\rho(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  in dem oben angegebenen Hamilton-Operator weggehoben. Die Wirkung der Erzeuger und Vernichter ist in dem Diagramm rechts dargestellt.



$V_{\mathbf{q}}^{el-el}$  ist die Fourier-Transformierte der Elektron-Elektron-Wechselwirkung. In Thomas-Fermi-Näherung (s.u.) gilt für die abgeschirmte Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$V_{\mathbf{q}}^{\text{el-el}} = \frac{1}{\Omega} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{\mathbf{q}^2 + \mathbf{q}_{\text{TF}}^2}.$$

( $\mathbf{q}$  hat die Dimension eines Impulses, daher der Faktor  $\hbar^2$ .) Die Wechselwirkung  $H_{\text{el-el}}$  wird häufig in Störungstheorie berücksichtigt.

Die allgemeine Übersetzungsregel für **2-Teilchenoperatoren** lautet

$$\begin{aligned} O^{(2)} &= \sum_{i \neq j}^N O^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i; \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j) = \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3r \int d^3r' \psi_{\sigma}^+(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}') O^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; \mathbf{r}', \mathbf{p}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} O_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(2)} c_{\alpha}^+ c_{\beta}^+ c_{\gamma} c_{\delta} \end{aligned}$$

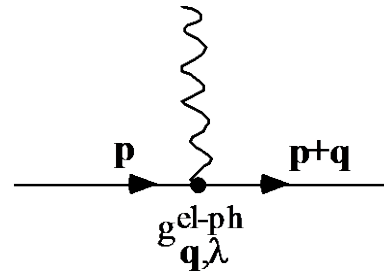
mit  $O_{\alpha\beta\delta\gamma}^{(2)} = \langle \alpha, \beta | O^{(2)} | \delta, \gamma \rangle = \int d^3r \int d^3r' \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\beta}^*(\mathbf{r}') O^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; \mathbf{r}', \mathbf{p}') \varphi_{\delta}(\mathbf{r}) \varphi_{\gamma}(\mathbf{r}')$ .

**Elektron-Phonon-Wechselwirkung.** Ausgangspunkt ist die Ionen-Elektron-Wechselwirkung, die durch die Gitterschwingungen beeinflusst wird,  $\sum_{\mathbf{J}, i} V(\mathbf{R}_{\mathbf{J}} - \mathbf{r}_i) = \sum_{\mathbf{R}_0, i} V(\mathbf{R}_0 + \mathbf{Q}_{\lambda}(\mathbf{R}_0) - \mathbf{r}_i)$ . In

einer Entwicklung in der Auslenkung der Ionen finden wir für den Term erster Ordnung

$$H_{\text{el-ph}} = \int d^3r \sum_{\mathbf{R}_0, \lambda} \rho(\mathbf{r}) \mathbf{Q}_{\lambda}(\mathbf{R}_0) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} V(\mathbf{R}-\mathbf{r})|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0}.$$

Nach Einsetzen der Feldoperatoren sowie des oben gegebenen Ausdrucks für die Auslenkung und nach Übergang in die Fourier-Darstellung erhalten wir daraus



$$H_{\text{el-ph}} = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma, \lambda} g_{\mathbf{q}, \lambda}^{\text{el-ph}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^+ c_{\mathbf{p}, \sigma} (a_{\mathbf{q}, \lambda} + a_{-\mathbf{q}, \lambda}^+).$$

Die hier auftretende Elektron-Phonon-Kopplungskonstante ist

$$g_{\mathbf{q}, \lambda}^{\text{el-ph}} = \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar N}{2M\omega_{\mathbf{q}, \lambda}}} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{q}, \lambda} V(\mathbf{q}).$$

Auch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung hängt von der abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung  $V(\mathbf{q}) = -\frac{1}{\Omega} \frac{Z 4\pi e^2 \hbar^2}{\mathbf{q}^2 + \mathbf{q}_{\text{TF}}^2}$  ab. Die Stärke der Wechselwirkung kann so abgeschätzt werden. Oft wird allerdings  $g_{\mathbf{q}, \lambda}^{\text{el-ph}}$  als Fitparameter genutzt.

## 2.5 Fermi-Gas und Hartree-Fock Näherung

Im Folgenden betrachten wir einen idealisierten Festkörper mit einem sehr schwachen Kristallpotenzial, so dass wir die Elektronenzustände als ebene Wellen annehmen können und der Fermi-See eine Kugel ist. Für dieses System wollen wir den Einfluss der Elektron-Elektron Wechselwirkung untersuchen. In der Energiebilanz ist dann aber auch die Wechselwirkung der Elektronen mit den homogen verteilten Ionen und die der Ionen untereinander zu berücksichtigen. Das Modell wird als Jellium Modell bezeichnet. Wir nehmen an, dass kein Magnetfeld anliegt und entsprechend die zwei Spinzustände entartet sind.

A) Wir betrachten zunächst ein Gas von  $N$  **wechselwirkungsfreien Elektronen**. Im Grundzustand besetzen sie die Zustände innerhalb des Fermi-Sees (für den betrachteten Fall eine Fermi-Kugel), d.h.

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\mathbf{k}|\leq k_F, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ |0\rangle$$

wobei  $|0\rangle$  der Vakuumzustand ist. Offensichtlich gilt

$$n_{\mathbf{k}, \sigma} = \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\mathbf{k}, \sigma} | \Phi_0 \rangle = \begin{cases} 1 & \text{für } |\mathbf{k}| \leq k_F \\ 0 & \text{für } |\mathbf{k}| > k_F \end{cases}$$

Damit gilt für die Teilchenzahl und Erwartungswert der kinetischen Energie

$$N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} n_{\mathbf{k}, \sigma} = 2\Omega \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(k_F - k) = \frac{1}{3\pi^2} \Omega k_F^3$$

$$E^{(0)} = \langle \Phi_0 | \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} | \Phi_0 \rangle = \frac{\hbar^2 \Omega}{m} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \mathbf{k}^2 \theta(k_F - k) = \frac{3}{5} \epsilon_F N$$

Wir führen einen typischen Abstand  $r_0$  zwischen den Elektronen ein über  $\frac{4\pi}{3} r_0^3 = \frac{\Omega}{N}$  bzw. den dimensionslosen Parameter  $r_s = r_0 / a_0$ , dem Verhältnis zwischen  $r_0$  und dem Bohr'schen Radius

$$a_0 = \hbar^2 / (me^2). \text{ Damit wird } k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s a_0} \text{ und } E^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0} \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} N.$$

Für das wechselwirkungsfreie Gas können wir Korrelationsfunktionen berechnen. Beispiele sind

### a) Der **Einteilchenkorrelator**

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

ist die Amplitude für den Prozess, wenn bei  $\mathbf{r}'$  ein Elektron entfernt wurde, eines bei  $\mathbf{r}$  zu finden.

Für freie Fermionen finden wir dafür

$$G_\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\mathbf{k}', \sigma} | \Phi_0 \rangle = \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

Damit erhalten wir 
$$G_{\sigma}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{2} n \frac{3(\sin x - x \cos x)}{x^3} \quad \text{mit } x = k_F |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|.$$

### b) Der Zweiteilchenkorrelator

$$\begin{aligned} G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &= \langle \Phi_0 | \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \rho_{\sigma}(\mathbf{r}) \rho_{\sigma'}(\mathbf{r}') | \Phi_0 \rangle - \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \delta_{\sigma,\sigma'} \frac{n}{2} \end{aligned}$$

ist die Wahrscheinlichkeit bei  $\mathbf{r}'$  ein Elektron mit Spin  $\sigma'$  zu finden, wenn bereits eines bei  $\mathbf{r}$  mit Spin  $\sigma$  vorhanden ist. Für freie Fermionen finden wir

$$g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \left(\frac{2}{n}\right)^2 G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \left(\frac{2}{n}\right)^2 \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\mathbf{q}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{r}'} \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{q},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{q}',\sigma'} c_{\mathbf{k}',\sigma} | \Phi_0 \rangle.$$

Für verschiedene Spins,  $\sigma \neq \sigma'$  tragen zur Summe nur  $\mathbf{k}'=\mathbf{k}$  und  $\mathbf{q}'=\mathbf{q}$  bei, und wir erhalten

$$g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \left(\frac{2}{n}\right)^2 \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \langle \Phi_0 | n_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} n_{\mathbf{q},\sigma'} | \Phi_0 \rangle = 1$$

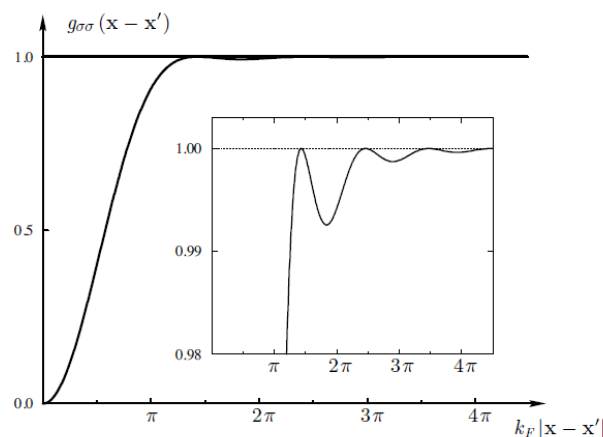
Für gleiche Spins,  $\sigma = \sigma'$  erhalten wir dagegen

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

Damit folgt (siehe Übungen)

$$\begin{aligned} g_{\sigma,\sigma}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &= \left(\frac{2}{n}\right)^2 \frac{1}{\Omega^2} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F, |\mathbf{q}| \leq k_F} (1 - e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q})(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}) = 1 - \frac{9(\sin x - x \cos x)^2}{x^6} \\ &= 1 - \frac{4}{n^2} G_{\sigma}^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \end{aligned}$$

mit  $x = k_F |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ . Für  $\mathbf{r}-\mathbf{r}'=0$  verschwindet die 2-Teilchen-Korrelationsfunktion. Das Pauli-Prinzip bewirkt, dass keine zwei Teilchen an derselben Stelle sind. Für Abstände größer als  $1/k_F$  geht der Korrelator schnell (mit schwachen Oszillationen) gegen 1.



B) Als nächstes betrachten wir ein Fermigas mit **Coulomb-Wechselwirkung**. Wir vernachlässigen weiterhin die Effekte des Kristallpotenzials, daher heißt das Modell auch Jellium-Modell.

$$H = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[ \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \right] \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \\ + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3r \int d^3r' V^{\text{el-el}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$$

Dabei ist die Wechselwirkung der Elektronen mit den Ionen beschrieben durch

$$U_{\text{ion}}(\mathbf{r}) = - \int d^3\mathbf{R} n_{\text{ion}}(\mathbf{R}) \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}|} \\ = -n_{\text{ion}} U_0 \quad \text{mit} \quad U_0 = \int d^3r \frac{e^2}{|\mathbf{r}|}$$

Die 2. Zeile gilt, wenn die Ionen homogen verteilt sind (Jellium). Die Wechselwirkungsenergie der Elektronen mit den homogen verteilten Ionen ist dann

$$E_{\text{el-ion}} = \langle \Phi_0 | \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) U_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle = -n n_{\text{ion}} \Omega U_0$$

Wenn wir noch berücksichtigen, dass die Ionendichte gleich der Elektronendichte ist,  $n_{\text{ion}} = n = N/V$ , erhalten wir  $E_{\text{el-ion}} = -n^2 \Omega U_0$ .

Als nächstes betrachten wir die Korrektur zur Grundzustandsenergie auf Grund der Elektron-Elektron Wechselwirkung. In führender Ordnung Störungstheorie finden wir

$$E_{\text{el-el}} = \langle \Phi_0 | \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle \\ = \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{n^2}{4} g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \\ = \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \left( n^2 - \sum_{\sigma} G_{\sigma}^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \right)$$

Die Energie kann einfach durch den oben berechneten Zweiteilchenkorrelator ausgedrückt werden. Der erste Beitrag ist der sogenannte **Hartree-Term**. Sein Wert ist

$$E_{\text{Hartree}} = n^2 \Omega U_0 / 2 \xrightarrow{\text{effektiv}} 0.$$

Er beschreibt die Wechselwirkung der Elektronen mit der mittleren Dichte aller anderen Elektronen. Allerdings ist er effektiv gleich 0. Denn die Summe aus Hartree-Term, der Wechselwirkungsenergie der Elektronen mit den Ionen  $E_{\text{el-ion}} = -n^2 \Omega U_0$  bei  $n_{\text{ion}} = n = N/V$

sowie die (hier nicht näher betrachteten) Wechselwirkungsenergie der Ionen untereinander  $E_{\text{el-ion}} = \frac{1}{2} n^2 \Omega U_0$  ergibt 0.

Der zweite Beitrag zum Erwartungswert der Grundzustandsenergie ist der sogenannte **Fock-Term**. Er entsteht auf Grund der Möglichkeit, identische Fermionen mit gleichem Spin auszutauschen,

$$\begin{aligned} E_{\text{Fock}} &= -\frac{\Omega}{2} \int d^3r \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \sum_{\sigma} G_{\sigma}^2(\mathbf{r}) \\ &= -N \frac{9n}{4} \int d^3r \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \left[ \frac{\sin(k_F |\mathbf{r}|) - k_F |\mathbf{r}| \cos(k_F |\mathbf{r}|)}{(k_F |\mathbf{r}|)^3} \right]^2 \\ &= -N \frac{3e^2}{4\pi} k_F = -N \frac{0,916 e^2}{2a_0 r_s} \equiv N \varepsilon_{\text{exch}} \end{aligned}$$

Zusammen finden wir also für die Grundzustandsenergie

$$E = N(\varepsilon_{\text{kin}} + \varepsilon_{\text{exch}}) = N \left( \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right) \frac{e^2}{2a_0}$$

Wir sehen, dass wir effektiv in dem Parameter  $r_s$  entwickelt haben, d.h. die Entwicklung ausgehend von freien Elektronen ist gut für Systeme mit hoher Elektronendichte. Bei niedriger Dichte und großen Werten von  $r_s$  könnte ein ganz anderer Zustand, z.B. der Wigner-Kristall, d.h. ein Gitter von lokalisierten Elektronenladungen realisiert sein. Dieser ist allerdings in natürlichen Festkörpern nicht beobachtet worden.

Das oben erwähnte gegenseitige Wegheben der Wechselwirkungsenergien homogen verteilter Ionen und Elektronen kann effektiv dadurch berücksichtigt werden, dass im Wechselwirkungs-Hamilton-Operator der Term mit  $\mathbf{q}=0$ , weggelassen wird,

$$H_{\text{el-el}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \neq 0, \sigma, \sigma'} V_{\mathbf{q}}^{\text{el-el}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}', \sigma'} c_{\mathbf{p}, \sigma} \quad .$$

Damit können wir die Korrektur zur Grundzustandsenergie noch einmal explizit ausrechnen:

$$E_{\text{el-el}} = \frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0, \sigma, \sigma'} \frac{4\pi}{q^2} \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}', \sigma'} c_{\mathbf{k}, \sigma} | \Phi_0 \rangle$$

Da  $\mathbf{q}=0$  ausgeschlossen ist, tragen in der Summe nur  $\mathbf{k}' - \mathbf{q} = \mathbf{k}$  mit  $\sigma = \sigma'$  bei. Damit gilt

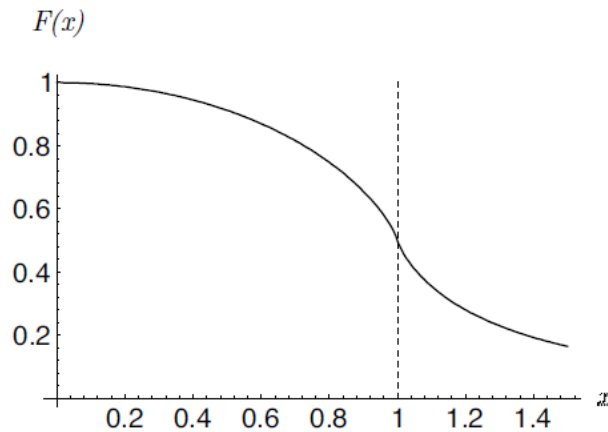
$$E_{\text{el-el}} = -\frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q} \neq 0, \sigma} \frac{4\pi}{q^2} \langle \Phi_0 | n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} n_{\mathbf{k}, \sigma} | \Phi_0 \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \neq \mathbf{k}, \sigma} \frac{4\pi}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} \langle \Phi_0 | n_{\mathbf{k}', \sigma} n_{\mathbf{k}, \sigma} | \Phi_0 \rangle \\
&= -4\pi e^2 \Omega \int_{\mathbf{k} \leq k_F} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k}' \leq k_F} \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}
\end{aligned}$$

Das Integral kann explizit ausgewertet werden:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbf{k}' \leq k_F} \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{k_F} dk' k'^2 \int_{-1}^1 d \cos \theta \frac{1}{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta} \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{k_F} dk' k'^2 \frac{1}{kk'} \ln \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| = \frac{k_F}{2\pi^2} \left( \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right) \equiv \frac{k_F}{2\pi^2} F(x)
\end{aligned}$$

mit  $x=k/k_F$ . Wir definieren für später die „Lindhard Funktion“  $F(x)$ . Sie nimmt vom Wert 1 bei  $x=0$  über  $1/2$  bei  $x=1$  nach 0 mit wachsendem  $x$  ab. Bei  $x=1$  ist die Ableitung singulär.



Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
E_{\text{el-el}} &= -e^2 \Omega \frac{k_F}{\pi} \int_{\mathbf{k} \leq k_F} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left( 1 + \frac{k_F^2 - k^2}{2kk_F} \ln \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right) \\
&= -\frac{3}{4} N e^2 \frac{k_F}{\pi} = -\frac{3}{4\pi} N \frac{e^2}{a_0 r_0} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} = -N \frac{e^2}{2a_0} \frac{0,916}{r_s}
\end{aligned}$$

also dasselbe Ergebnis wie oben.

### Einteilchenenergien

Mit den so gewonnenen Erkenntnissen können wir auch verstehen, dass die Energien der Einteilchenzustände durch die Wechselwirkung modifiziert werden. Wir machen dazu eine Molekularfeldnäherung, um das Produkt aus 4 Erzeugern bzw. Vernichtern in  $H_{\text{el-el}}$  durch Produkte aus je einem Erzeuger und Vernichter gekoppelt an ‚Molekularfelder‘ – d.h im Allgemeinen selbstkonsistent zu bestimmende Mittelwerte – zu ersetzen.



1. Das generelle Schema besteht darin, ein Produkt von Operatoren  $AB$  wie folgt zu ersetzen: Unter der Voraussetzung, dass die Operatoren nur wenig von ihrem Mittelwert abweichen (dies erfordert, dass wir die richtige Physik erkannt haben!) schreiben wir  $A = \langle A \rangle + (A - \langle A \rangle)$  und vernachlässigen quadratisch kleine Terme. Damit erhalten wir  $AB \approx -\langle A \rangle \langle B \rangle + A \langle B \rangle + B \langle A \rangle$ .

Der erste Beitrag ist trivial und wird häufig nicht angeschrieben.

2. Bei den 4 Operatoren  $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+$ ,  $c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}$ ,  $c_{\mathbf{k}',\sigma'}$ ,  $c_{\mathbf{k},\sigma}$  in  $H_{\text{el-el}}$  müssen wir noch entscheiden, wie wir sie paaren wollen, um dann nach dem oben erläuterten Schema vorzugehen. Das Kriterium ist, dass der Erwartungswert eines Produktes von 2 Operatoren groß ist. Es bietet sich an, nur Erwartungswerte eines Produktes von einem Erzeuger und einem Vernichter zu betrachten (das gilt nicht für Supraleiter!). Naheliegender wäre  $\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle$  zu wählen. Dies ist aber eine schlechte Wahl; denn der Erwartungswert verschwindet im Grundzustand, weil wir in  $H_{\text{el-el}}$ , wie oben diskutiert,  $\mathbf{q}=0$  ausschließen. Eine bessere Wahl ist  $\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma'} \rangle$ , was für  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$  mit  $\sigma = \sigma'$  einen endlichen Wert im Grundzustand liefert.

D.h. wir schreiben, nach Vertauschen der Reihenfolge gemäß der Fermi-Statistik

$$c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{k}',\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma} \approx -\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma'} \rangle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma} - \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma'}$$

Es tragen nur  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$  mit  $\sigma = \sigma'$  bei und beide Terme gleich, sodass gilt

$$H_{\text{el-el}} = -\frac{2e^2}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q} \neq 0, \sigma} \frac{4\pi}{q^2} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \rangle c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma}$$

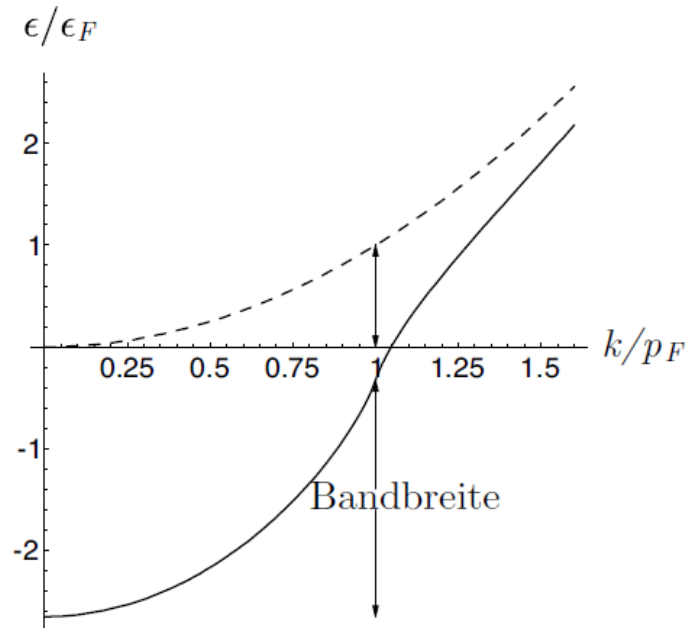
D.h. wir erhalten

$$H_0 + H_{\text{el-el}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma}$$

mit den renormierten Einteilchenenergien

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{2e^2}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{4\pi}{q^2} \theta(p_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) \\ &= \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{2e^2 k_F}{\pi} F(k/k_F) \end{aligned}$$

mit der oben definierten Lindhard-Funktion  $F(x)$ .



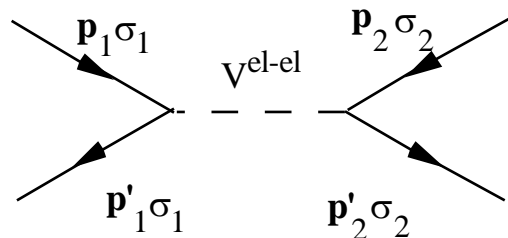
Das hier beschriebene Verfahren kann dahingehend verallgemeinert werden, dass man die Blochzustände im Kristallpotential plus dem oben angeschriebenen Molekularfeld, also eine bessere Näherung für die tatsächlichen Wellenfunktionen als die ebenen Wellen, benutzt. Der Erwartungswert des Molekularfelds ist dann selbstkonsistent zu bestimmen. Dies ist, was als Hartee-Fock Methode bezeichnet wird.

### 2.6 Stoßraten

Oft genügt es im Festkörper, die Wechselwirkungen störungstheoretisch zu behandeln. Sie führen dazu, dass Elektronen mit einer gewissen Rate aus einem gegebenen Zustand gestreut werden. Die Rate kann mit der goldenen Regel berechnet werden.

Als Beispiel betrachten wir hier den Effekt der Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$H_{el-el} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q},\sigma\sigma'} V_{\mathbf{q}}^{el-el} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q},\sigma'}^+ c_{\mathbf{p}',\sigma'} c_{\mathbf{p},\sigma}$$



Zunächst bestimmen wir die Rate für die Streuung aus einem gewissen (besetzten) Einteilchenzustand  $\mathbf{p}_1\sigma_1$  mit Energie  $\varepsilon_1$  in den Endzustand  $\mathbf{p}'_1\sigma_1$  mit Energie  $\varepsilon'_1$ , wobei gleichzeitig ein anderes Elektron von  $\mathbf{p}_2\sigma_2$  mit Energie  $\varepsilon_2$  in den Endzustand  $\mathbf{p}'_2\sigma_2$  mit Energie  $\varepsilon'_2$  gestreut wird. Natürlich muss dazu der Zustand  $\mathbf{p}_2\sigma_2$  besetzt sein, und die beiden Endzustände wegen des Pauli Prinzips unbesetzt. Da die Coulomb-Wechselwirkung nicht vom Spin abhängt, ändert sich der Spin der Teilchen nicht. Die goldene Regel liefert die Rate für diesen Übergang

$$W_{\substack{\mathbf{p}_1\sigma_1 \rightarrow \mathbf{p}'_1\sigma_1 \\ \mathbf{p}_2\sigma_2 \rightarrow \mathbf{p}'_2\sigma_2}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p}'_1\sigma_1, \mathbf{p}'_2\sigma_2 | H_{\text{el-el}} | \mathbf{p}_1\sigma_1, \mathbf{p}_2\sigma_2 \rangle|^2 \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1' - \varepsilon_2'),$$

wobei das Matrixelement zwischen Anfangs- und Endzustand das Folgende bedeutet und liefert

$$\begin{aligned} & \langle n_{\mathbf{p}'_1\sigma_1}=1, n_{\mathbf{p}'_2\sigma_2}=1, n_{\mathbf{p}_1\sigma_1}=0, n_{\mathbf{p}_2\sigma_2}=0, \dots | H_{\text{el-el}} | n_{\mathbf{p}_1\sigma_1}=0, n_{\mathbf{p}'_2\sigma_2}=0, n_{\mathbf{p}_1\sigma_1}=1, n_{\mathbf{p}_2\sigma_2}=1, \dots \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q},\sigma\sigma'} \langle \dots | V_{\mathbf{q}}^{\text{el-el}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q},\sigma'}^+ c_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p}',\sigma'} | \dots \rangle \\ &= [V_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}_1}^{\text{el-el}} - \delta_{\sigma_1\sigma_2} V_{\mathbf{p}'_2-\mathbf{p}_1}^{\text{el-el}}] \delta_{\mathbf{p}'_1+\mathbf{p}'_2, \mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2}. \end{aligned}$$

Die Impulserhaltung, die schon im Hamilton-Operator explizit ist, spiegelt sich im Matrixelement wieder. Die beiden Beiträge ergeben sich aus der folgenden Überlegung: Wir wählen z.B.  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1$  und  $\mathbf{p}' = \mathbf{p}_2$  (die Alternative  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_2$  und  $\mathbf{p}' = \mathbf{p}_1$  liefert im Endergebnis einen Faktor 2). Dann muss bei verschiedenen Spins,  $\sigma_1 \neq \sigma_2$ , für die Impulse  $\mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{p}'_1$  und  $\mathbf{p}' - \mathbf{q} = \mathbf{p}'_2$  gelten, d.h.  $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$  und  $\mathbf{q} = \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1$ . Bei gleichen Spins,  $\sigma_1 = \sigma_2$ , kann *zusätzlich*  $\mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{p}'_2$  und  $\mathbf{p}' - \mathbf{q} = \mathbf{p}'_1$  gelten, d.h. wieder  $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$  aber diesmal  $\mathbf{q} = \mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_1$ . Die veränderte Reihenfolge der Operatoren führt zu einem Vorzeichenwechsel.

Die Lebensdauer eines Elektrons im Zustand  $\mathbf{p}_1\sigma_1$  ist bestimmt durch die Rate, dass das Elektron aus dem Zustand  $\mathbf{p}_1\sigma_1$  in *irgend* einen anderen Zustand  $\mathbf{p}'_1\sigma_1$  gestreut wird, und auch der Anfangs- und Endzustand des Streupartners ist beliebig. Wir summieren daher über all diese Zustände, haben aber zu berücksichtigen, dass diese entsprechend der Fermi-Statistik und Temperatur besetzt waren bzw. als Endzustand zur Verfügung stehen. Die gesuchte Rate ist daher

$$\begin{aligned} \tau_{\mathbf{p}_1\sigma_1}^{-1} &= \sum_{\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2, \mathbf{p}_2, \sigma_2} W_{\substack{\mathbf{p}_1\sigma_1 \rightarrow \mathbf{p}'_1\sigma_1 \\ \mathbf{p}_2\sigma_2 \rightarrow \mathbf{p}'_2\sigma_2}} f(\varepsilon_2) [1 - f(\varepsilon_1)][1 - f(\varepsilon_2')] \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2, \mathbf{p}_2, \sigma_2} |V_{\mathbf{p}'_1-\mathbf{p}_1}^{\text{el-el}} - \delta_{\sigma_1\sigma_2} V_{\mathbf{p}'_2-\mathbf{p}_1}^{\text{el-el}}|^2 \delta_{\mathbf{p}'_1+\mathbf{p}'_2, \mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2} \\ &\quad \times f(\varepsilon_2) [1 - f(\varepsilon_1)][1 - f(\varepsilon_2')] \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_1' - \varepsilon_2'). \end{aligned}$$

Zur weiteren Auswertung schreiben wir  $\sum_{\mathbf{p}} \dots = \int d\varepsilon D(\varepsilon) \int \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{4\pi} \dots$ , wobei  $D(\varepsilon)$  die energieabhängige Zustandsdichte der Elektronen ist. Die wichtigste Energie- und Temperaturabhängigkeit kommt von den Fermi-Funktionen. Daher können wir zur Vereinfachung das Matrixelement und die Winkelintegrationen durch Konstanten ersetzen. Auch liegen typische Energien nahe der Fermi-Energie (d.h.  $D(\varepsilon) \approx D(\varepsilon_F)$ ). Die Streurrate eines Elektrons mit Energie  $\varepsilon$  ist also

$$\tau_{\varepsilon}^{-1} = \text{const} \int d\varepsilon_1' \int d\varepsilon_2' f(\varepsilon_1' + \varepsilon_2' - \varepsilon) [1 - f(\varepsilon_1')] [1 - f(\varepsilon_2')].$$

Bei tiefen Temperaturen liefert dies  $\tau_{\varepsilon}^{-1} (T = 0) = \frac{1}{2} \text{const} (\varepsilon - \varepsilon_F)^2$ , während für Elektronen an der Fermi-Kante  $\varepsilon = \varepsilon_F$  gilt  $\tau_{\varepsilon_F}^{-1} (T) = \frac{1}{2} \text{const} (kT)^2$ . Zusammenfassend gilt also

$$\tau_{\varepsilon}^{-1} (T) = \frac{1}{2} \text{const} [(\varepsilon - \varepsilon_F)^2 + (kT)^2].$$

Wir sehen, und das ist ein wesentliches Argument für das weitere Vorgehen (Quasiteilchen und Landau Fermiflüssigkeitstheorie), dass die Rate nahe der Fermikante und bei tiefen Temperaturen auf Grund der Einschränkungen durch das Pauli Prinzip klein sind.

## 2.7 Thomas-Fermi-Theorie der Abschirmung

Die nackte Coulomb-Wechselwirkung ist langreichweitig, aber Abschirmungseffekte machen die Wechselwirkung effektiv kurzreichweitig. Als Beispiel betrachten wir nahezu freie Elektronen, und wir nehmen an, dass die Ionenladungen homogen verschmiert sind (Jellium-Modell). Im Mittel ist die Ladungsdichte gleich Null.

Wir bringen nun eine Testladung in das System  $\rho_0(\mathbf{r}) = q\delta(\mathbf{r})$ . Im Vakuum erzeugt dies ein Potenzial  $\phi(\mathbf{r}) = q/|\mathbf{r}|$ . Im Festkörper führt die Coulomb-Wechselwirkung aber zur Abstoßung anderer Elektronen, sodass ein positiver Hintergrund der homogen verschmierten Ionen in der Nachbarschaft der Testladung überwiegt. Dies bewirkt die Abschirmung.

Angenommen  $\phi(\mathbf{r})$  ändert sich langsam, und dass die Elektronen lokal im Gleichgewicht mit dem lokalen elektrochemischen Potenzial  $\mu - e\phi(\mathbf{r})$  sind. Dann ist

$$\langle n_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{r}) \rangle = f(\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} - e\phi(\mathbf{r})) = \frac{1}{e^{[\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} - \mu - e\phi(\mathbf{r})]/kT} + 1}.$$

Dies bedeutet eine Änderung der lokalen Elektronendichte

$$\begin{aligned} \delta\rho(\mathbf{r}) &= (-e) \delta n(\mathbf{r}) = \frac{-e}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \langle \delta n_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{-e}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}, \sigma} [f(\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} - e\phi(\mathbf{r})) - f(\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma})] \\ &= (-e) \int d\varepsilon 2 D(\varepsilon) [f(\varepsilon - e\phi(\mathbf{r})) - f(\varepsilon)] \approx (-e) 2D(\varepsilon_F) e\phi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Die letzte Form gilt für Metalle, wo wir für  $k_B T \ll \varepsilon_F$  nur die Zustandsdichte (pro Spinkomponente) an der Fermi-Kante  $D(\varepsilon_F)$  brauchen.

Die so erzeugte Ladungsänderung bewirkt gemäß der Poisson-Gleichung wiederum eine Änderung des Potentials. Wir müssen also eine selbstkonsistente Lösung finden für

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -4\pi \rho(\mathbf{r}) = -4\pi q \delta(\mathbf{r}) + 4\pi e 2D(\epsilon_F) e\phi(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \left( \nabla^2 - 1/\lambda_{TF}^2 \right) \phi(\mathbf{r}) = -4\pi q \delta(\mathbf{r}) .$$

Hier haben wir die Thomas-Fermi-Abschirmlänge  $\lambda_{TF} = \frac{1}{\sqrt{8\pi e^2 D(\epsilon_F)}}$  eingeführt. Für Metalle ist  $\lambda_{TF}$  typisch von derselben Größenordnung wie die atomaren Abstände. Die Lösung der Poisson-Gleichung im Fourier-Raum lautet

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega} \frac{4\pi q}{k^2 + 1/\lambda_{TF}^2} .$$

Nach Rücktransformation finden wir das abgeschirmte Coulomb-Potenzial (Yukawa-Potenzial)

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{q}{|\mathbf{r}|} e^{-|\mathbf{r}|/\lambda_{TF}} .$$

Für die Abschirmung in Halbleitern gilt eine ähnliche Relation. Dort ist die Elektronendichte gering, und die Maxwell-Boltzmann-Statistik kann verwendet werden.

$$\Rightarrow \phi(\mathbf{r}) = \frac{q}{|\mathbf{r}|} e^{-|\mathbf{r}|/\lambda_D} \quad \text{mit} \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{kT}{4\pi e^2 \langle n \rangle}} .$$

Die Abschirmlänge wird nun Debye-Länge genannt. Sie hängt nicht von der Fermi-Energie sondern von der Temperatur ab.  $\langle n \rangle$  ist die temperaturabhängige Elektronendichte.

## 2.8 Quasiteilchen und Landau Theorie der Fermi-Flüssigkeiten

Obwohl die Wechselwirkung zwischen den Teilchen eines Festkörpers i.A. nicht exakt behandelt werden kann, genügt doch oft eine effektive Beschreibung mit nahezu unabhängigen Quasiteilchen. Dafür gibt es folgende Gründe:

1) Die Einteilchenenergien können stark von der Energie freier Teilchen abweichen; denn das periodische Potenzial der Ionen führt zu einer i.A. komplizierten Bandstruktur  $\epsilon_{n\mathbf{p}\sigma}$ .

In **Halbleitern** sind wir aber hauptsächlich an Zuständen an der Bandkante eines Bandes  $n$  interessiert. (Wir schreiben im Folgenden den Bandindex nicht mehr.)

– An der unteren Bandkante gilt  $\epsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \epsilon_c + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}$ , wobei die effektive Elektronenmasse i.a. von der freien Elektronenmasse abweicht,  $m_e \neq m$ .

– An der oberen Bandkante gilt  $\epsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \epsilon_v - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_h}$ , wobei die effektive Löchermasse i.a. von der freien Elektronenmasse abweicht,  $m_h \neq m$ .

In **Metallen** interessieren die Zustände in der Nähe der Fermi-Energie.

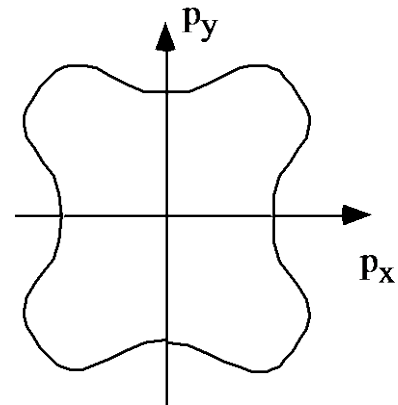
Der Fermi-See ist i. A. nicht mehr eine Kugel. Ein Beispiel ist rechts dargestellt. Das Volumen des Fermi-Sees,  $\Omega_F$ , hängt mit der Dichte zusammen

$$n = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \Omega_F.$$

In der Nähe der Fermi-Kante ist die Energie einfach charakterisiert durch die Fermi-Geschwindigkeit

$$\epsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \epsilon_F + \mathbf{v}_F \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}_F)$$

sowie die Zustandsdichte (pro Spin)  $D(\epsilon_F)$ .



Der Zusammenhang zwischen  $\mathbf{p}_F$  und  $\mathbf{v}_F$ ,  $\mathbf{p}_F = m^* \mathbf{v}_F$  definiert eine weitere effektive Masse  $m^*$ , die allerdings von den oben erwähnten Bandmassen abweicht.

2) Die Wechselwirkungen sind abgeschwächt durch Abschirmungseffekte (s.o.).

3) Die Stoßprozesse sind eingeschränkt durch die Energieerhaltung und das Pauli Prinzip. Die goldene Regel liefert die Streurrate für den Übergang eines Quasiteilchens von einem herausgegriffenen Zustand  $\mathbf{p}_1\sigma_1$  nach irgendeinem Zustand  $\mathbf{p}_1'\sigma_1$  während ein anderes Quasiteilchen von irgendeinem Zustand  $\mathbf{p}_2\sigma_2$  nach  $\mathbf{p}_2'\sigma_2$  gestreut wird

$$\tau_{\mathbf{p}_1\sigma_1}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \sigma_2} |\langle \mathbf{p}_1' \mathbf{p}_2' | H_{el-el} | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \rangle|^2 \delta(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_1' - \epsilon_2') f(\epsilon_2) [1-f(\epsilon_1')] [1-f(\epsilon_2')].$$

Wegen des Pauli Prinzips liegen bei  $T \approx 0$  die Energien aller Zustände  $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_1', \epsilon_2'$  nahe  $\epsilon_F$ . Dies schränkt die möglichen Streuprozesse stark ein. Als Ergebnis (s.o.) ist die Rate für die Streuung eines Elektrons mit Energie  $\epsilon$  nahe der Fermi-Kante mit anderen Elektronen klein,

$$\tau_{\epsilon}^{-1}(T) \propto (\epsilon - \epsilon_F)^2 + (kT)^2.$$

Ähnliches gilt für die Streuung an Phononen, nämlich  $\tau_{\epsilon}^{-1}(T) \propto (\epsilon - \epsilon_F)^3 + (kT)^3$ .

4) Bei *hoher* Elektronendichte  $n$  ist die mittlere Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen schwach gegen die kinetische Energie. Beide hängen ab von der Dichte

$$\langle e^2/r \rangle \approx e^2 n^{1/3} \quad , \quad \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad .$$

D.h. die Wechselwirkungsenergie ist kleiner als  $\varepsilon_F$ , solange der mittlere Elektronenabstand  $r_0$  klein ist gegen den Bohr'schen Radius  $a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{m e^2} = 0,529 \dots \text{\AA}$ . Genauer gesagt, solange

$$r_0 \equiv \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n}} < \frac{3\pi}{4} \sqrt[3]{2} a_0 \quad .$$

5) Es besteht eine 1:1 Beziehung zwischen den angeregten Zuständen des wechselwirkenden Systems und den angeregten Zuständen des wechselwirkungsfreien. (Wir können uns vorstellen, dass die Wechselwirkung langsam eingeschaltet wird, d.h. alle Zustände entwickeln sich kontinuierlich.) Dies hat die folgenden Konsequenzen:

– die Quasiteilchen sind Fermionen

– weiterhin sind die Einteilchenzustände beschrieben durch Bloch-Zustände mit  $\mathbf{p}, \sigma$ .

– Die durch die Besetzungszahlen  $|\{n_{\mathbf{p}\sigma}\}\rangle$ ;  $n_{\mathbf{p}\sigma} = 0, 1$  charakterisierten Zustände stellen eine Basis der Vielteilchenzustände dar. Auch die Energie hängt davon ab  $E = E(\{n_{\mathbf{p}\sigma}\})$ . Wenn wir die Energie wie folgt schreiben  $E(\{n_{\mathbf{p}\sigma}\}) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma}$  müssen wir berücksichtigen, dass die

Einteilchenenergien i.A. wiederum von der Besetzungszahl aller anderen Zustände abhängt.

– Im Grundzustand gilt  $n_{\mathbf{p}\sigma}^0 = \begin{cases} 1 & \text{für } \mathbf{p} \in \text{Fermi-See} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$ .

Angeregte Zustände sind Teilchen- oder Lochartig  $v_{\mathbf{p}\sigma} = n_{\mathbf{p}\sigma} - n_{\mathbf{p}\sigma}^0 = \begin{cases} 1 & \text{"Elektron"} \\ -1 & \text{"Loch"} \end{cases}$ .

Im thermischen Gleichgewicht ist die Verteilungsfunktion die Fermifunktion abhängig von den Einteilchenenergien

$$\langle n_{\mathbf{p}\sigma} \rangle = \frac{1}{e^{\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma}/k_B T} + 1} \quad .$$

Die oben gegebenen Argumente sind die Grundlage der **Landau Theorie der Fermi-Flüssigkeiten**. Wie wir am Beispiel der Hartree-Fock Näherung gesehen haben, hängen die Gesamtenergie und Einteilchenenergien von der Zahl der anderen Quasiteilchen ab. Wenn wir

also die Besetzungszahlen um  $\delta n_{\mathbf{p}\sigma}$  ändern, erwarten wir (nach Landau) dass sich die Einteilchenenergien ändern,  $\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma}^{(0)} + \delta\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma}$ , wobei

$$\delta\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} f_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'} \delta n_{\mathbf{p}'\sigma'}$$

wobei  $f_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'}$  ein mikroskopisch berechenbarer bzw. phänomenologisch bestimmbarer Wechselwirkungsparameter ist. Er hängt wegen der Austauscheffekte vom Spin ab. Solange keine Spinrichtung ausgezeichnet ist (ohne Magnetfeld) gilt

$$f_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'} = f_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}^S + \sigma\sigma' f_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}^A$$

Gewöhnlich wird der dimensionslose Wechselwirkungsparameter  $F_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}^{S/A} = D(\varepsilon_F) f_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}^{S/A}$  betrachtet.

Außerdem, da  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{p}'$  in der Regel an der Fermikante liegen, hängt  $F_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}^{S/A}$  nur vom Winkel zwischen  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{p}'$  ab, und es bietet sich eine Entwicklung in Legendre Polynome an,

$$F^{S/A}(\cos \theta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) F_l^{S/A} P_l(\cos \theta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}),$$

sowie weitere darauf aufbauende Entwicklungen in Kugelflächenfunktionen.

Siehe Übungen für Beispiele.