
Warum gibt es Isolatoren?

Florian Gebhard



ARBEITSGRUPPE VIELTEILCHENTHEORIE
FACHBEREICH PHYSIK
PHILIPPS-UNIVERSITÄT MARBURG

Gliederung

Gliederung

I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?

Gliederung

- I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?
- II. Wie sind Isolatoren charakterisiert?

Gliederung

- I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?
- II. Wie sind Isolatoren charakterisiert?
- III. Wie kommt es zu Metall-Isolator Übergängen?

Gliederung

- I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?
- II. Wie sind Isolatoren charakterisiert?
- III. Wie kommt es zu Metall-Isolator Übergängen?
- IV. Bloch-Wilson Bandisolator

Gliederung

- I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?
- II. Wie sind Isolatoren charakterisiert?
- III. Wie kommt es zu Metall-Isolator Übergängen?
- IV. Bloch-Wilson Bandisolator
- V. Peierls Isolator

Gliederung

- I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?
- II. Wie sind Isolatoren charakterisiert?
- III. Wie kommt es zu Metall-Isolator Übergängen?
- IV. Bloch-Wilson Bandisolator
- V. Peierls Isolator
- VI. Anderson Isolator

Gliederung

- I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?
- II. Wie sind Isolatoren charakterisiert?
- III. Wie kommt es zu Metall-Isolator Übergängen?
- IV. Bloch-Wilson Bandisolator
- V. Peierls Isolator
- VI. Anderson Isolator
- VII. Mott Isolator

Gliederung

- I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?
- II. Wie sind Isolatoren charakterisiert?
- III. Wie kommt es zu Metall-Isolator Übergängen?
- IV. Bloch-Wilson Bandisolator
- V. Peierls Isolator
- VI. Anderson Isolator
- VII. Mott Isolator
- VIII. Zusammenfassung

Gliederung

- I. Das Drude-Problem: Warum gibt es Metalle?
- II. Wie sind Isolatoren charakterisiert?
- III. Wie kommt es zu Metall-Isolator Übergängen?
- IV. Bloch-Wilson Bandisolator
- V. Peierls Isolator
- VI. Anderson Isolator
- VII. Mott Isolator
- VIII. Zusammenfassung
- IX. Dank

I Das Drude-Problem

I Das Drude-Problem

1. Metallische Leitung in der klassischen Physik

I Das Drude-Problem

1. Metallische Leitung in der klassischen Physik
 - Drude-Konzept: die Elektronen bewegen sich frei zwischen zwei Stößen. Mittlere Zeit zwischen den Stößen ist τ (Streuzeit).

I Das Drude-Problem

1. Metallische Leitung in der klassischen Physik
 - Drude-Konzept: die Elektronen bewegen sich frei zwischen zwei Stößen. Mittlere Zeit zwischen den Stößen ist τ (Streuzeit).
 - Newtons Gesetz für die Geschwindigkeit $\vec{v}(\omega)$ der Elektronen mit Masse m und Ladung e im elektrischen Feld $\vec{E}(\omega)$:

$$e\vec{E}(\omega) = -i\omega m\vec{v}(\omega) + \frac{m}{\tau}\vec{v}(\omega) .$$

I Das Drude-Problem

1. Metallische Leitung in der klassischen Physik

- Drude-Konzept: die Elektronen bewegen sich frei zwischen zwei Stößen. Mittlere Zeit zwischen den Stößen ist τ (Streuzeit).
- Newtons Gesetz für die Geschwindigkeit $\vec{v}(\omega)$ der Elektronen mit Masse m und Ladung e im elektrischen Feld $\vec{E}(\omega)$:

$$e\vec{E}(\omega) = -i\omega m\vec{v}(\omega) + \frac{m}{\tau}\vec{v}(\omega) .$$

Ohms Gesetz für die Stromdichte $\vec{j}(\omega)$ als Funktion des elektrischen Feldes:

$$\vec{j}(\omega) = ne\vec{v}(\omega) = \sigma(\omega)\vec{E}(\omega) ,$$

n : Elektronendichte; $\sigma(\omega)$: Leitfähigkeit.

I Das Drude-Problem

- Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ im Drude-Modell: (Ideales Metall: $\tau \rightarrow 0$)

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2},$$
$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m} \tau.$$

I Das Drude-Problem

- Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ im Drude-Modell: (Ideales Metall: $\tau \rightarrow 0$)

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2},$$
$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m} \tau.$$

2. Probleme im klassischen Zugang

I Das Drude-Problem

- Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ im Drude-Modell: (Ideales Metall: $\tau \rightarrow 0$)

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2},$$
$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m} \tau.$$

2. Probleme im klassischen Zugang

- In der klassischen Betrachtung streuen die Elektronen an jedem Ion: die Streuzeiten sind zu kurz!

I Das Drude-Problem

- Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ im Drude-Modell: (Ideales Metall: $\tau \rightarrow 0$)

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2},$$
$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m} \tau.$$

2. Probleme im klassischen Zugang

- In der klassischen Betrachtung streuen die Elektronen an jedem Ion: die Streuzeiten sind zu kurz!
- Die typischen Transportgeschwindigkeiten sind falsch (Boltzmann-Statistik statt Fermi-Statistik)

I Das Drude-Problem

- Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ im Drude-Modell: (Ideales Metall: $\tau \rightarrow 0$)

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2},$$
$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m} \tau.$$

2. Probleme im klassischen Zugang

- In der klassischen Betrachtung streuen die Elektronen an jedem Ion: die Streuzeiten sind zu kurz!
- Die typischen Transportgeschwindigkeiten sind falsch (Boltzmann-Statistik statt Fermi-Statistik)
- Es fehlt eben die Quantenmechanik – diese zeigt aber, daß das Drude-Resultat für Metalle im Limes $\omega\tau \ll 1$ vernünftig ist.

I Das Drude-Problem

I Das Drude-Problem

Die Quantenmechanik lehrt uns:

I Das Drude-Problem

Die Quantenmechanik lehrt uns:

- Elektronen sind durch Bloch-Wellen zu beschreiben.

I Das Drude-Problem

Die Quantenmechanik lehrt uns:

- Elektronen sind durch Bloch-Wellen zu beschreiben.
- Für eine perfekt periodische Anordnung der Ionen sind die Bloch-Wellen über den ganzen Kristall ausgebreitet.

I Das Drude-Problem

Die Quantenmechanik lehrt uns:

- Elektronen sind durch Bloch-Wellen zu beschreiben.
- Für eine perfekt periodische Anordnung der Ionen sind die Bloch-Wellen über den ganzen Kristall ausgebreitet.
- Die Quantenmechanik 'kehrt die Beweislast um':

I Das Drude-Problem

Die Quantenmechanik lehrt uns:

- Elektronen sind durch Bloch-Wellen zu beschreiben.
- Für eine perfekt periodische Anordnung der Ionen sind die Bloch-Wellen über den ganzen Kristall ausgebreitet.
- Die Quantenmechanik 'kehrt die Beweislast um':

Warum gibt es Isolatoren?

II Charakterisierung von Isolatoren

II Charakterisierung von Isolatoren

1. Verschwinden der DC-Leitfähigkeit bei Temperatur $T = 0$

II Charakterisierung von Isolatoren

1. Verschwinden der DC-Leitfähigkeit bei Temperatur $T = 0$
 - Isolator: es fließt kein Strom, auch wenn wir eine (kleine) Spannung anlegen.

II Charakterisierung von Isolatoren

1. Verschwinden der DC-Leitfähigkeit bei Temperatur $T = 0$
 - Isolator: es fließt kein Strom, auch wenn wir eine (kleine) Spannung anlegen.
 - Etwas genauer: bei Temperatur $T = 0$ verschwindet der Realteil des Tensors der Gleichstrom-Leitfähigkeit,

II Charakterisierung von Isolatoren

1. Verschwinden der DC-Leitfähigkeit bei Temperatur $T = 0$
 - Isolator: es fließt kein Strom, auch wenn wir eine (kleine) Spannung anlegen.
 - Etwas genauer: bei Temperatur $T = 0$ verschwindet der Realteil des Tensors der Gleichstrom-Leitfähigkeit,

$$\sigma_{\alpha,\beta}^{\text{DC}}(T = 0) = \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{|\vec{q}| \rightarrow 0} \Re \{ \sigma_{\alpha,\beta}(\vec{q}, \omega; T) \} ;$$

$$\text{Isolator : } \sigma_{\alpha,\beta}^{\text{DC}}(T = 0) = 0 .$$

II Charakterisierung von Isolatoren

1. Verschwinden der DC-Leitfähigkeit bei Temperatur $T = 0$

- Isolator: es fließt kein Strom, auch wenn wir eine (kleine) Spannung anlegen.
- Etwas genauer: bei Temperatur $T = 0$ verschwindet der Realteil des Tensors der Gleichstrom-Leitfähigkeit,

$$\sigma_{\alpha,\beta}^{\text{DC}}(T = 0) = \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{|\vec{q}| \rightarrow 0} \Re \{ \sigma_{\alpha,\beta}(\vec{q}, \omega; T) \} ;$$

$$\text{Isolator : } \sigma_{\alpha,\beta}^{\text{DC}}(T = 0) = 0 .$$

- Die Unterscheidung zwischen Metall und Isolator ist nur bei $T = 0$ sinnvoll: alle Materialien leiten mehr oder weniger bei endlichen Temperaturen.

II Charakterisierung von Isolatoren

II Charakterisierung von Isolatoren

2. Klassen von Isolatoren

II Charakterisierung von Isolatoren

2. Klassen von Isolatoren

- Isolierendes Verhalten resultiert aus
 - I. der Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterionen
 - II. der Elektron-Elektron Wechselwirkung

II Charakterisierung von Isolatoren

2. Klassen von Isolatoren

- Isolierendes Verhalten resultiert aus
 - I. der Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterionen
 - II. der Elektron-Elektron Wechselwirkung
- Zur Kategorie I gehören Isolatoren aufgrund

II Charakterisierung von Isolatoren

2. Klassen von Isolatoren

- Isolierendes Verhalten resultiert aus
 - I. der Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterionen
 - II. der Elektron-Elektron Wechselwirkung
- Zur Kategorie I gehören Isolatoren aufgrund
 1. der Wechselwirkung mit dem perfekt periodischen Gitterpotential (Bloch-Wilson Bandisolatoren)

II Charakterisierung von Isolatoren

2. Klassen von Isolatoren

- Isolierendes Verhalten resultiert aus
 - I. der Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterionen
 - II. der Elektron-Elektron Wechselwirkung
- Zur Kategorie I gehören Isolatoren aufgrund
 1. der Wechselwirkung mit dem perfekt periodischen Gitterpotential (Bloch-Wilson Bandisolatoren)
 2. der Wechselwirkung mit einem periodisch modulierten Gitterpotential (Peierls Isolatoren)

II Charakterisierung von Isolatoren

2. Klassen von Isolatoren

- Isolierendes Verhalten resultiert aus
 - I. der Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterionen
 - II. der Elektron-Elektron Wechselwirkung
- Zur Kategorie I gehören Isolatoren aufgrund
 1. der Wechselwirkung mit dem perfekt periodischen Gitterpotential (Bloch-Wilson Bandisolatoren)
 2. der Wechselwirkung mit einem periodisch modulierten Gitterpotential (Peierls Isolatoren)
 3. der Streuung an Verunreinigungen und sonstigen unregelmäßigen Potentialfluktuationen (Anderson Isolatoren)

II Charakterisierung von Isolatoren

2. Klassen von Isolatoren

- Isolierendes Verhalten resultiert aus
 - I. der Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterionen
 - II. der Elektron-Elektron Wechselwirkung
- Zur Kategorie I gehören Isolatoren aufgrund
 1. der Wechselwirkung mit dem perfekt periodischen Gitterpotential (Bloch-Wilson Bandisolatoren)
 2. der Wechselwirkung mit einem periodisch modulierten Gitterpotential (Peierls Isolatoren)
 3. der Streuung an Verunreinigungen und sonstigen unregelmäßigen Potentialfluktuationen (Anderson Isolatoren)

Aufgabe: beschreibe unabhängige Elektronen in einem Potential!

II Charakterisierung von Isolatoren

- In der Kategorie II ist ein Vielteilchen-Problem zu lösen. Hierzu gehören Isolatoren aufgrund
 4. der Elektron-Elektron Wechselwirkung (Mott Isolatoren).

II Charakterisierung von Isolatoren

- In der Kategorie II ist ein Vielteilchen-Problem zu lösen. Hierzu gehören Isolatoren aufgrund
 4. der Elektron-Elektron Wechselwirkung (Mott Isolatoren).
- Die Klassifizierung ist rein theoretisch: in realen Materialien sind stets alle Wechselwirkungen präsent. Isolatoren werden benannt nach dem dominanten Mechanismus.

II Charakterisierung von Isolatoren

- In der Kategorie II ist ein Vielteilchen-Problem zu lösen. Hierzu gehören Isolatoren aufgrund
 4. der Elektron-Elektron Wechselwirkung (Mott Isolatoren).
- Die Klassifizierung ist rein theoretisch: in realen Materialien sind stets alle Wechselwirkungen präsent. Isolatoren werden benannt nach dem dominanten Mechanismus.
- ‘Gemischte Fälle’ werden mit Begriffen wie ‘Mott-Anderson Isolator’ belegt.

Beispiel: im ‘Mott-Anderson Isolator’ bewirken Elektron-Elektron Wechselwirkung und Verunreinigungsstreuung zusammen das isolierende Verhalten.

II Charakterisierung von Isolatoren

II Charakterisierung von Isolatoren

3. Kriterium der Energielücke

II Charakterisierung von Isolatoren

3. Kriterium der Energielücke

- Annahme:
schwache äußere elektrische Felder, die *verschwindend wenig* Anregungsenergie bereitstellen ($\omega \rightarrow 0$).

II Charakterisierung von Isolatoren

3. Kriterium der Energielücke

- Annahme:
schwache äußere elektrische Felder, die *verschwindend wenig* Anregungsenergie bereitstellen ($\omega \rightarrow 0$).
- Resultat:
lineare Antwort-Theorie ist anwendbar, es gilt das Fluktuations-Dissipations-Theorem:

II Charakterisierung von Isolatoren

3. Kriterium der Energielücke

- Annahme:

schwache äußere elektrische Felder, die *verschwindend wenig* Anregungsenergie bereitstellen ($\omega \rightarrow 0$).

- Resultat:

lineare Antwort-Theorie ist anwendbar, es gilt das Fluktuations-Dissipations-Theorem:

die Leitfähigkeit (Transport-Größe!) ist gegeben durch eine Strom-Strom Korrelationsfunktion *im Gleichgewicht*.

II Charakterisierung von Isolatoren

3. Kriterium der Energielücke

- Annahme:
schwache äußere elektrische Felder, die *verschwindend wenig* Anregungsenergie bereitstellen ($\omega \rightarrow 0$).
- Resultat:
lineare Antwort-Theorie ist anwendbar, es gilt das Fluktuations-Dissipations-Theorem:
die Leitfähigkeit (Transport-Größe!) ist gegeben durch eine Strom-Strom Korrelationsfunktion *im Gleichgewicht*.
- Problem:
die Strom-Strom Korrelationsfunktion ist eine Zweiteilchen-Größe. Sie beschreibt die Propagation einer Teilchen-Loch Anregung des Systems.

II Charakterisierung von Isolatoren

- Lösung:

Für Stromtransport müssen sowohl das Teilchen als auch das Loch (Einteilchenzustände) zu Kathode bzw. Anode propagieren. Daher muß das Kriterium der Energielücke gelten:

II Charakterisierung von Isolatoren

- Lösung:

Für Stromtransport müssen sowohl das Teilchen als auch das Loch (Einteilchenzustände) zu Kathode bzw. Anode propagieren. Daher muß das Kriterium der Energielücke gelten:

Die *Einteilchenanregungen* Teilchen bzw. Loch müssen makroskopisch ausgedehnt sein, ihre Anregungsenergie muß verschwindend gering sein.

II Charakterisierung von Isolatoren

- Lösung:

Für Stromtransport müssen sowohl das Teilchen als auch das Loch (Einteilchenzustände) zu Kathode bzw. Anode propagieren. Daher muß das Kriterium der Energielücke gelten:

Die *Einteilchenanregungen* Teilchen bzw. Loch müssen makroskopisch ausgedehnt sein, ihre Anregungsenergie muß verschwindend gering sein.

- Für ein System mit $N \pm 1$ -Teilchen, Grundzustandsenergie $E_0(N)$ und minimaler Energie $E_0^{\text{ext}}(N \pm 1)$ für ausgedehnte Zustände:

$$\mu^\pm(N) := E_0^{\text{ext}}(N \pm 1) - E_0(N) ,$$

$$\Delta := \mu^+(N) - \mu^-(N) ,$$

$$\Delta > 0 \quad : \quad \text{Isolator (Lückenkriterium)} .$$

II Charakterisierung von Isolatoren

II Charakterisierung von Isolatoren

4. Endliche Temperaturen

II Charakterisierung von Isolatoren

4. Endliche Temperaturen

- Vorteile der Energielücke:

1. leichter zu berechnen (Einteilchen-Größe!);
2. relevante Energieskala, die mit thermischen Energien $k_B T$ verglichen werden kann.

II Charakterisierung von Isolatoren

4. Endliche Temperaturen

- Vorteile der Energielücke:
 1. leichter zu berechnen (Einteilchen-Größe!);
 2. relevante Energieskala, die mit thermischen Energien $k_B T$ verglichen werden kann.
- Ist die Energielücke groß gegen die Temperatur, so zeigt die Leitfähigkeit ein aktiviertes Verhalten,

$$\sigma_{\alpha,\beta}^{\text{DC}}(k_B T \ll \Delta) \sim \exp\left(-\frac{\Delta}{2k_B T}\right).$$

(Experimentell zugängliches Kriterium für einen Isolator)

II Charakterisierung von Isolatoren

4. Endliche Temperaturen

- Vorteile der Energielücke:

1. leichter zu berechnen (Einteilchen-Größe!);
2. relevante Energieskala, die mit thermischen Energien $k_B T$ verglichen werden kann.

- Ist die Energielücke groß gegen die Temperatur, so zeigt die Leitfähigkeit ein aktiviertes Verhalten,

$$\sigma_{\alpha,\beta}^{\text{DC}}(k_B T \ll \Delta) \sim \exp\left(-\frac{\Delta}{2k_B T}\right).$$

(Experimentell zugängliches Kriterium für einen Isolator)

- Die so bestimmte Energielücke kann selbst von der Temperatur und anderen Systemvariablen λ abhängen, $\Delta = \Delta(T, \lambda)$.

III Metall-Isolator Übergänge

Wie kann man Übergänge zwischen Metall und Isolator induzieren?

III Metall-Isolator Übergänge

Wie kann man Übergänge zwischen Metall und Isolator induzieren?

1. Thermodynamische Phasenübergänge

III Metall-Isolator Übergänge

Wie kann man Übergänge zwischen Metall und Isolator induzieren?

1. Thermodynamische Phasenübergänge

- Die innere Energie U wird in manchen Systemen optimiert in Zuständen mit gebrochener Symmetrie und langreichweitiger Ordnung: Magnetismus, Supraleitung, Gitterverzerrungen usw.

III Metall-Isolator Übergänge

Wie kann man Übergänge zwischen Metall und Isolator induzieren?

1. Thermodynamische Phasenübergänge

- Die innere Energie U wird in manchen Systemen optimiert in Zuständen mit gebrochener Symmetrie und langreichweitiger Ordnung: Magnetismus, Supraleitung, Gitterverzerrungen usw.
- Die Entropie S wirkt geordneten Phasen entgegen.

III Metall-Isolator Übergänge

Wie kann man Übergänge zwischen Metall und Isolator induzieren?

1. Thermodynamische Phasenübergänge

- Die innere Energie U wird in manchen Systemen optimiert in Zuständen mit gebrochener Symmetrie und langreichweitiger Ordnung: Magnetismus, Supraleitung, Gitterverzerrungen usw.
- Die Entropie S wirkt geordneten Phasen entgegen.
- Der Parameter Temperatur T kontrolliert die Konkurrenz zwischen U und S .

Zu optimieren ist die freie Energie: $F = U - TS$.

III Metall-Isolator Übergänge

Wie kann man Übergänge zwischen Metall und Isolator induzieren?

1. Thermodynamische Phasenübergänge

- Die innere Energie U wird in manchen Systemen optimiert in Zuständen mit gebrochener Symmetrie und langreichweitiger Ordnung: Magnetismus, Supraleitung, Gitterverzerrungen usw.
- Die Entropie S wirkt geordneten Phasen entgegen.
- Der Parameter Temperatur T kontrolliert die Konkurrenz zwischen U und S .

Zu optimieren ist die freie Energie: $F = U - TS$.

- Konsequenz:
thermodynamischer Phasenübergang bei T_c mit geordnetem Zustand für $T < T_c$ und ungeordnetem Zustand bei $T > T_c$.

III Metall-Isolator Übergänge

- In manchen Systemen öffnet sich beim thermodynamischen Phasenübergang eine Lücke für stromtragende Anregungen,

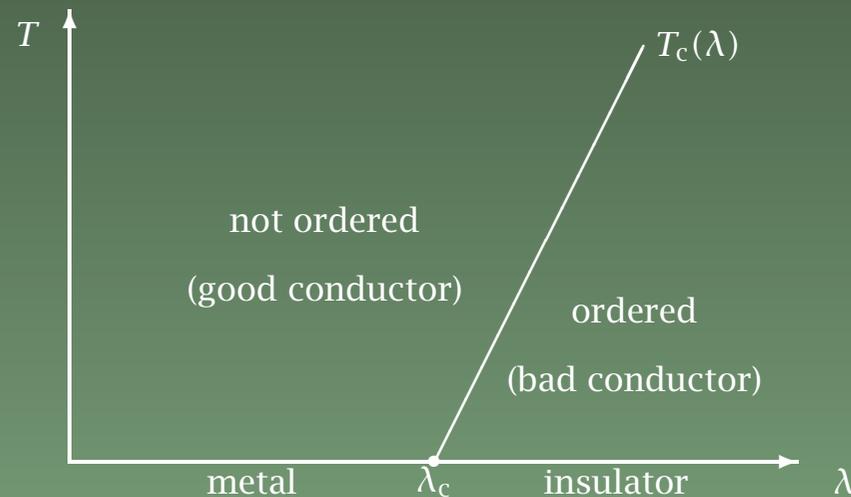
‘weiche Lücke’: $\Delta(T < T_c) > 0$, $\Delta(T \geq T_c) = 0$.

III Metall-Isolator Übergänge

- In manchen Systemen öffnet sich beim thermodynamischen Phasenübergang eine Lücke für stromtragende Anregungen,

‘weiche Lücke’: $\Delta(T < T_c) > 0$, $\Delta(T \geq T_c) = 0$.

- Phasendiagramm:

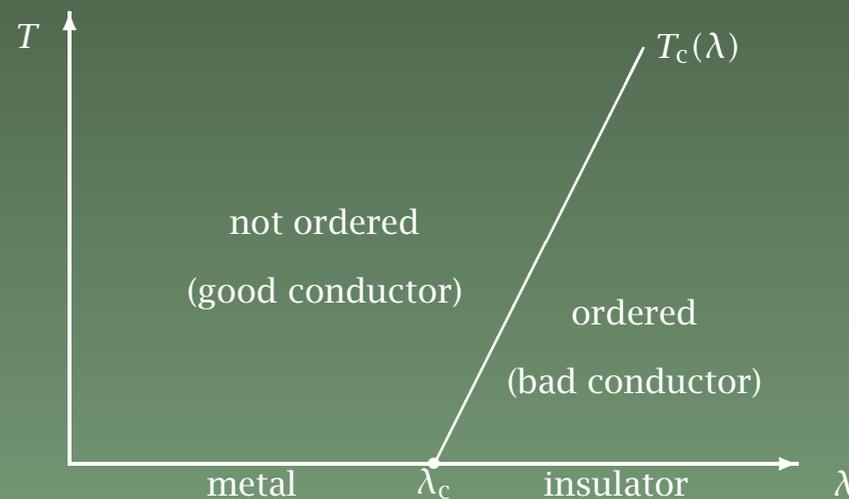


III Metall-Isolator Übergänge

- In manchen Systemen öffnet sich beim thermodynamischen Phasenübergang eine Lücke für stromtragende Anregungen,

‘weiche Lücke’: $\Delta(T < T_c) > 0$, $\Delta(T \geq T_c) = 0$.

- Phasendiagramm:



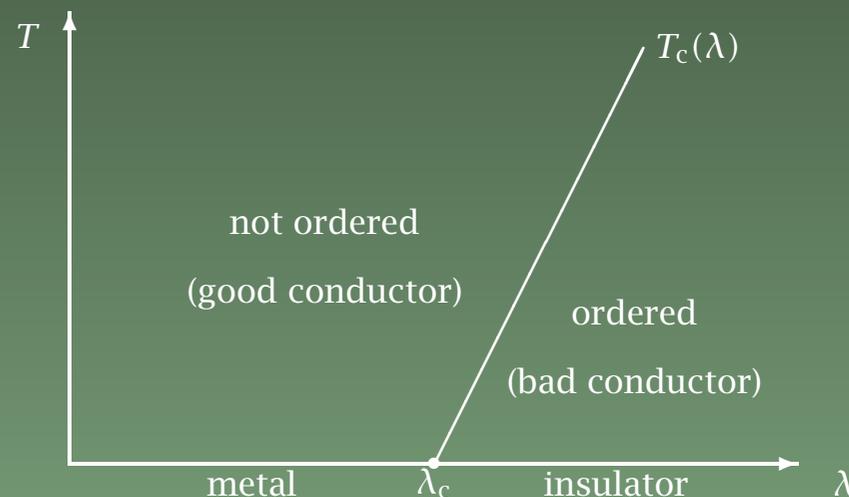
- Der Punkt $(T = 0, \lambda_c)$ ist ein quanten-kritischer Punkt.

III Metall-Isolator Übergänge

- In manchen Systemen öffnet sich beim thermodynamischen Phasenübergang eine Lücke für stromtragende Anregungen,

‘weiche Lücke’: $\Delta(T < T_c) > 0$, $\Delta(T \geq T_c) = 0$.

- Phasendiagramm:



- Der Punkt $(T = 0, \lambda_c)$ ist ein quanten-kritischer Punkt. Der Übergang als Funktion von λ bei $(T = 0, \lambda_c)$ heißt ‘Quanten-Phasenübergang’.

III Metall-Isolator Übergänge

III Metall-Isolator Übergänge

2. Quanten-Phasenübergänge bei Temperatur $T = 0$

III Metall-Isolator Übergänge

2. Quanten-Phasenübergänge bei Temperatur $T = 0$

- Die kinetische Energie \hat{T} bevorzugt eine homogene Verteilung der Elektronen im Grundzustand des Systems.

III Metall-Isolator Übergänge

2. Quanten-Phasenübergänge bei Temperatur $T = 0$

- Die kinetische Energie \hat{T} bevorzugt eine homogene Verteilung der Elektronen im Grundzustand des Systems.
- Die potentielle Energie \hat{V} bevorzugt in manchen Systemen einen Grundzustand mit Lücke für stromtragende Anregungen. Dieser Zustand kann geordnet sein, muß es aber nicht!

III Metall-Isolator Übergänge

2. Quanten-Phasenübergänge bei Temperatur $T = 0$

- Die kinetische Energie \hat{T} bevorzugt eine homogene Verteilung der Elektronen im Grundzustand des Systems.
- Die potentielle Energie \hat{V} bevorzugt in manchen Systemen einen Grundzustand mit Lücke für stromtragende Anregungen. Dieser Zustand kann geordnet sein, muß es aber nicht!
- Der Systemparameter λ (zum Beispiel Druck, Elektronendichte) kontrolliert die Konkurrenz zwischen \hat{T} und \hat{V} .
Zu optimieren ist die Grundzustandsenergie: $E_0 = \langle \hat{T} + \hat{V} \rangle_0$.

III Metall-Isolator Übergänge

2. Quanten-Phasenübergänge bei Temperatur $T = 0$

- Die kinetische Energie \hat{T} bevorzugt eine homogene Verteilung der Elektronen im Grundzustand des Systems.
- Die potentielle Energie \hat{V} bevorzugt in manchen Systemen einen Grundzustand mit Lücke für stromtragende Anregungen. Dieser Zustand kann geordnet sein, muß es aber nicht!
- Der Systemparameter λ (zum Beispiel Druck, Elektronendichte) kontrolliert die Konkurrenz zwischen \hat{T} und \hat{V} .
Zu optimieren ist die Grundzustandsenergie: $E_0 = \langle \hat{T} + \hat{V} \rangle_0$.
- Konsequenz: der Quanten-Phasenübergang kann zu einem Metall-Isolator Übergang führen,
Metall für $\lambda < \lambda_c \iff$ Isolator für $\lambda > \lambda_c$.

III Metall-Isolator Übergänge

- Für einen Übergang *ohne* Symmetriebrechung erwartet man eine

‘harte Lücke’: $\Delta(T, \lambda > \lambda_c) > 0$,

die *nicht* wesentlich von der Temperatur abhängt.

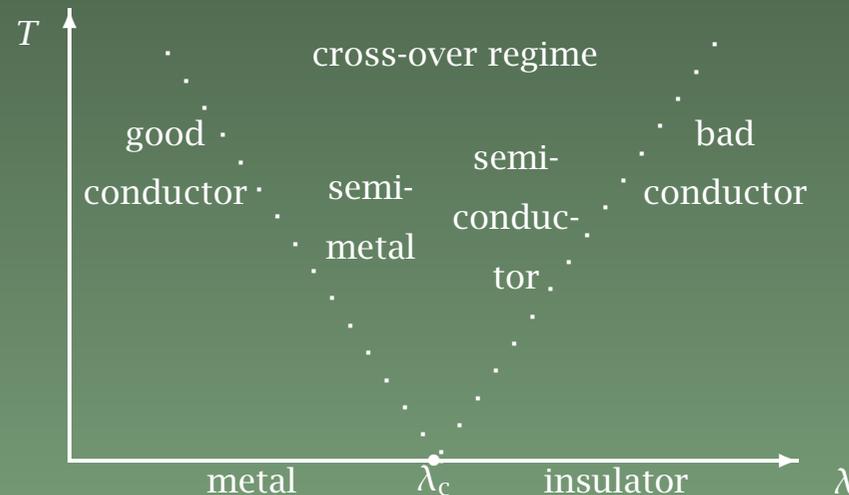
III Metall-Isolator Übergänge

- Für einen Übergang *ohne* Symmetriebrechung erwartet man eine

$$\text{'harte Lücke': } \Delta(T, \lambda > \lambda_c) > 0 ,$$

die *nicht* wesentlich von der Temperatur abhängt.

- Idealisieretes Phasendiagramm:



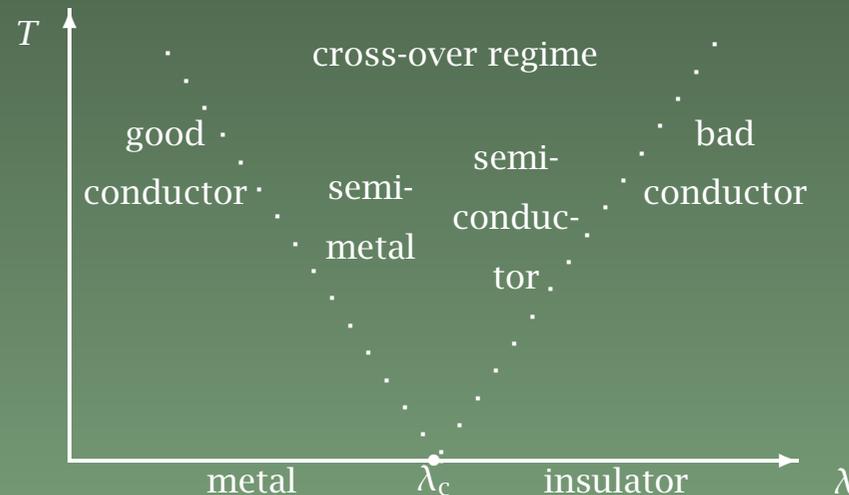
III Metall-Isolator Übergänge

- Für einen Übergang *ohne* Symmetriebrechung erwartet man eine

$$\text{'harte Lücke': } \Delta(T, \lambda > \lambda_c) > 0 ,$$

die *nicht* wesentlich von der Temperatur abhängt.

- Idealisieretes Phasendiagramm:



- Der Quanten-Phasenübergang bei $(T = 0, \lambda_c)$ induziert ein 'cross-over' Verhalten der Leitfähigkeit bei endlichen Temperaturen, keine Singularitäten.

III Metall-Isolator Übergänge

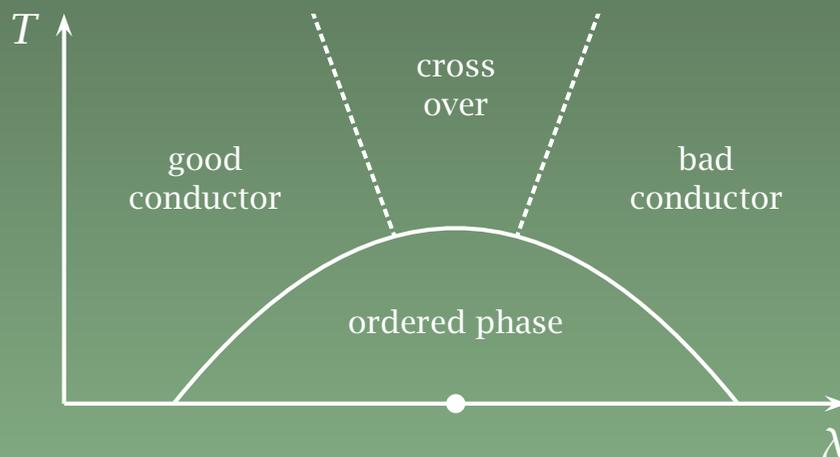
- Wechselwirkungen \hat{V}_1 , die 'klein' gegen \hat{T} und \hat{V} sind, werden in der Nähe des Quanten-Phasenübergangs wichtig:
 $|\lambda - \lambda_c|$ wird zum kleinen Parameter der *Summe* $\hat{T} + \hat{V}$.

III Metall-Isolator Übergänge

- Wechselwirkungen \hat{V}_1 , die 'klein' gegen \hat{T} und \hat{V} sind, werden in der Nähe des Quanten-Phasenübergangs wichtig:
 $|\lambda - \lambda_c|$ wird zum kleinen Parameter der *Summe* $\hat{T} + \hat{V}$.
- Konsequenz:
geordnete Phasen 'verbergen' den Quanten-Phasenübergang.

III Metall-Isolator Übergänge

- Wechselwirkungen \hat{V}_1 , die 'klein' gegen \hat{T} und \hat{V} sind, werden in der Nähe des Quanten-Phasenübergangs wichtig:
 $|\lambda - \lambda_c|$ wird zum kleinen Parameter der *Summe* $\hat{T} + \hat{V}$.
- Konsequenz:
geordnete Phasen 'verbergen' den Quanten-Phasenübergang.
- Vollständiges Phasendiagramm
(Übergänge können erster oder zweiter Ordnung sein):



IV Bloch-Wilson Bandisolator

IV Bloch-Wilson Bandisolator

1. Prinzip

IV Bloch-Wilson Bandisolator

1. Prinzip

- Annahmen:

1. perfekt periodisches Gitterpotential der Ionen
2. keine Elektron-Elektron Wechselwirkung

IV Bloch-Wilson Bandisolator

1. Prinzip

- Annahmen:
 1. perfekt periodisches Gitterpotential der Ionen
 2. keine Elektron-Elektron Wechselwirkung
- Konsequenz: Einteilchen-Problem

$$\hat{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$$

mit dem Hamilton-Operator (in zweiter Quantisierung)

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_{\vec{R}_i} U(\vec{r} - \vec{R}_i) \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r})$$

IV Bloch-Wilson Bandisolator

IV Bloch-Wilson Bandisolator

- Resultat: Energiebänder $E_n(\vec{k})$ mit Bandindex n für Bloch-Wellen mit Kristallimpuls $\hbar\vec{k}$ aus der ersten Brillouin-Zone.

IV Bloch-Wilson Bandisolator

- Resultat: Energiebänder $E_n(\vec{k})$ mit Bandindex n für Bloch-Wellen mit Kristallimpuls $\hbar\vec{k}$ aus der ersten Brillouin-Zone.
- Bandisolator:
 1. vollständig gefüllte Valenzbänder $E_n^v(\vec{k})$,
 2. leere Leitungsbänder $E_n^c(\vec{k})$.

IV Bloch-Wilson Bandisolator

- Resultat: Energiebänder $E_n(\vec{k})$ mit Bandindex n für Bloch-Wellen mit Kristallimpuls $\hbar\vec{k}$ aus der ersten Brillouin-Zone.
- Bandisolator:
 1. vollständig gefüllte Valenzbänder $E_n^v(\vec{k})$,
 2. leere Leitungsbänder $E_n^c(\vec{k})$.
 3. Energielücke für Einteilchen-Anregungen

$$\Delta = \text{Min}_{\vec{k}, m, n} \left[E_n^c(\vec{k}) - E_m^v(\vec{k}) \right] .$$

IV Bloch-Wilson Bandisolator

- Resultat: Energiebänder $E_n(\vec{k})$ mit Bandindex n für Bloch-Wellen mit Kristallimpuls $\hbar\vec{k}$ aus der ersten Brillouin-Zone.
- Bandisolator:
 1. vollständig gefüllte Valenzbänder $E_n^v(\vec{k})$,
 2. leere Leitungsbänder $E_n^c(\vec{k})$.
 3. Energielücke für Einteilchen-Anregungen

$$\Delta = \text{Min}_{\vec{k}, m, n} \left[E_n^c(\vec{k}) - E_m^v(\vec{k}) \right] .$$

- Bedingung für einen Bandisolator:
pro Einheitszelle muß eine *gerade* Anzahl von Elektronen vorliegen, denn die Elektronen haben Spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$!

IV Bloch-Wilson Bandisolator

- Energielücke für Einteilchen-Anregungen

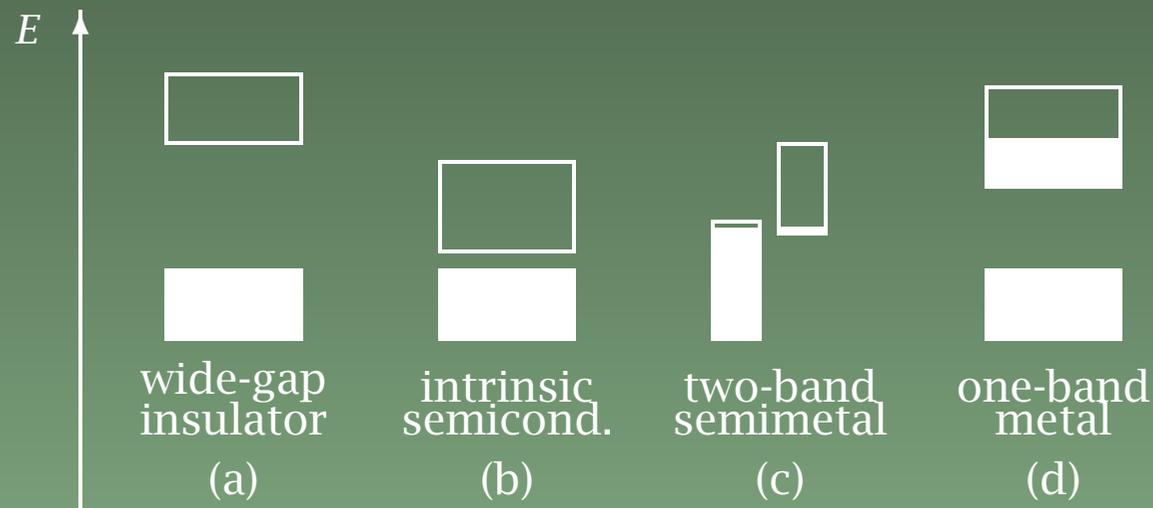
$$\Delta = \text{Min}_{\vec{k}, m, n} \left[E_n^c(\vec{k}) - E_m^v(\vec{k}) \right] .$$

IV Bloch-Wilson Bandisolator

- Energielücke für Einteilchen-Anregungen

$$\Delta = \text{Min}_{\vec{k}, m, n} \left[E_n^c(\vec{k}) - E_m^v(\vec{k}) \right] .$$

- Schematische Zustandsdichten



IV Bloch-Wilson Bandisolator

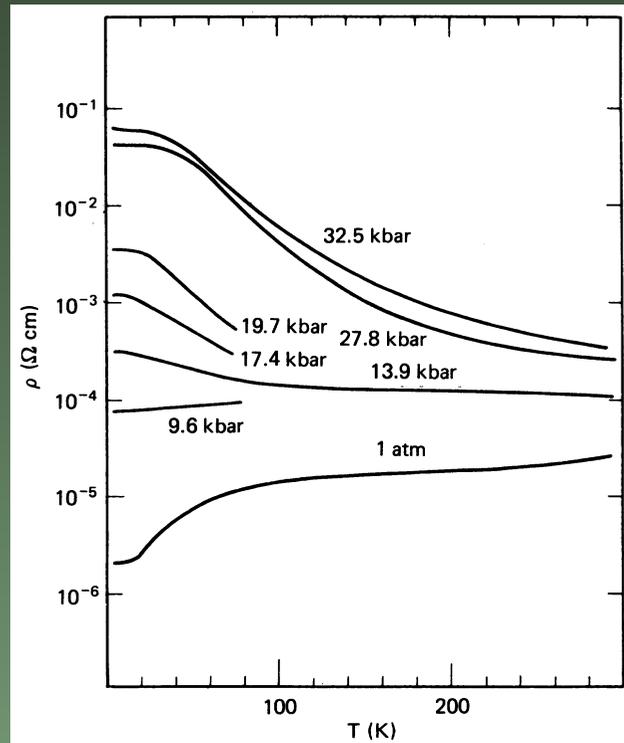
IV Bloch-Wilson Bandisolator

2. Bloch-Wilson Übergang in Ytterbium unter Druck

IV Bloch-Wilson Bandisolator

2. Bloch-Wilson Übergang in Ytterbium unter Druck

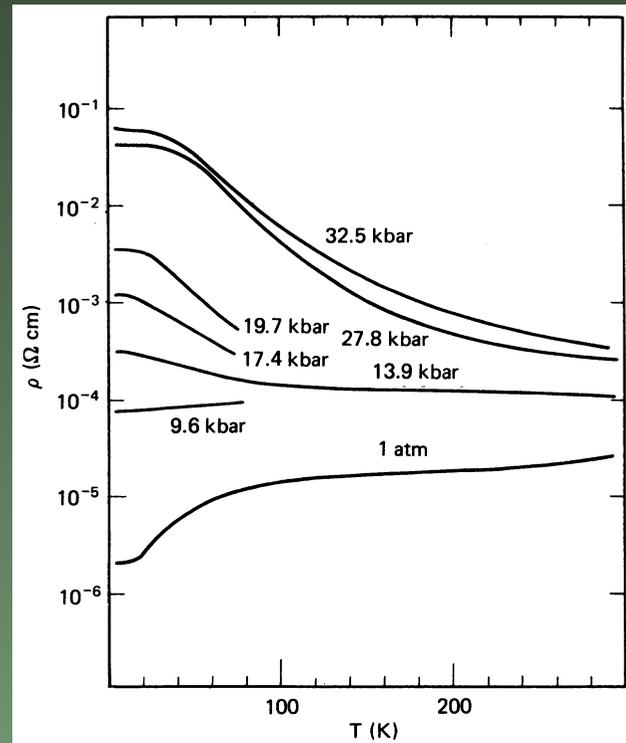
- Leitfähigkeit bei einem Quanten-Phasenübergang



IV Bloch-Wilson Bandisolator

2. Bloch-Wilson Übergang in Ytterbium unter Druck

- Leitfähigkeit bei einem Quanten-Phasenübergang



- Aufgrund des Drucks verändern sich Matrixelemente der Hybridisierung zwischen d und f Elektronen, ein Loch-Ellipsoid verschwindet unter Druck.

V Peierls Isolator

V Peierls Isolator

1. Prinzip

V Peierls Isolator

1. Prinzip

■ Annahmen:

1. statisch deformierbares Gitter
2. stark anisotrop: quasi-eindimensional
3. einzelnes Band am Fermi-Wellenvektor k_F
4. keine Elektron-Elektron Wechselwirkung

V Peierls Isolator

1. Prinzip

■ Annahmen:

1. statisch deformierbares Gitter
2. stark anisotrop: quasi-eindimensional
3. einzelnes Band am Fermi-Wellenvektor k_F
4. keine Elektron-Elektron Wechselwirkung

■ Konsequenz: Einteilchen-Problem mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int dx \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \delta \sin(2k_F x) \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(x) + C \delta^2$$

V Peierls Isolator

1. Prinzip

■ Annahmen:

1. statisch deformierbares Gitter
2. stark anisotrop: quasi-eindimensional
3. einzelnes Band am Fermi-Wellenvektor k_F
4. keine Elektron-Elektron Wechselwirkung

■ Konsequenz: Einteilchen-Problem mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int dx \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \delta \sin(2k_F x) \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(x) + C \delta^2$$

- ### ■ selbstkonsistent zu lösen für die wellenförmige Modulation δ des Gitters mit Wellenzahl $2k_F$ (Ladungsdichtewelle)

V Peierls Isolator

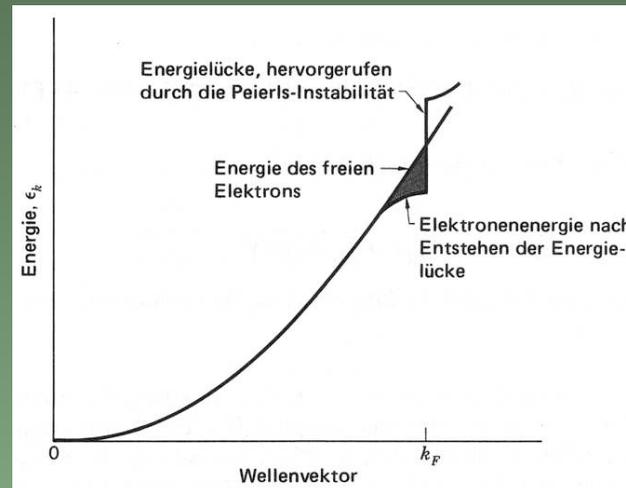
- Die Ladungsdichtewelle
 - ◆ kostet elastische Energie proportional zu δ^2
 - ◆ bringt kinetische Energie proportional zu $\delta^2 \ln(\delta)$

V Peierls Isolator

- Die Ladungsdichtewelle
 - ◆ kostet elastische Energie proportional zu δ^2
 - ◆ bringt kinetische Energie proportional zu $\delta^2 \ln(\delta)$
- Die geordnete Phase existiert nur bei tiefen Temperaturen (thermodynamischer Phasenübergang).
Die Ladungsdichtewelle zeigt eine Einteilchen-Lücke.

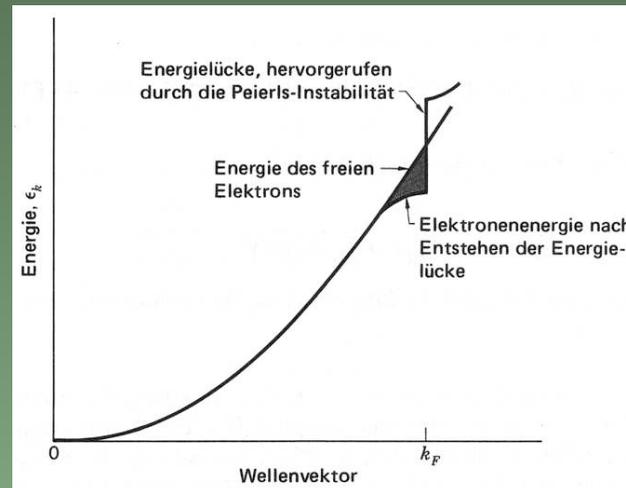
V Peierls Isolator

- Die Ladungsdichtewelle
 - ◆ kostet elastische Energie proportional zu δ^2
 - ◆ bringt kinetische Energie proportional zu $\delta^2 \ln(\delta)$
- Die geordnete Phase existiert nur bei tiefen Temperaturen (thermodynamischer Phasenübergang).
Die Ladungsdichtewelle zeigt eine Einteilchen-Lücke.
- Bandstruktur des Peierls Isolators bei Temperatur $T = 0$



V Peierls Isolator

- Die Ladungsdichtewelle
 - ◆ kostet elastische Energie proportional zu δ^2
 - ◆ bringt kinetische Energie proportional zu $\delta^2 \ln(\delta)$
- Die geordnete Phase existiert nur bei tiefen Temperaturen (thermodynamischer Phasenübergang).
Die Ladungsdichtewelle zeigt eine Einteilchen-Lücke.
- Bandstruktur des Peierls Isolators bei Temperatur $T = 0$



- Die Lücke ist proportional zu δ .

V Peierls Isolator

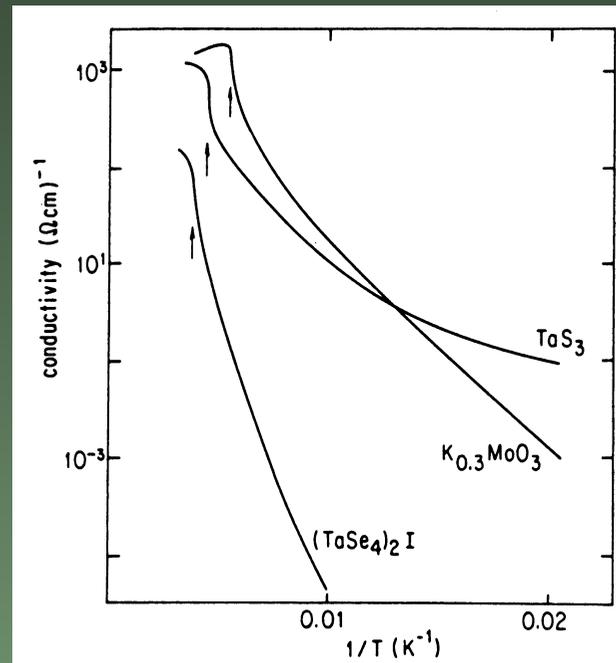
V Peierls Isolator

2. Peierls Übergang in $\text{K}_3\text{Mo}_{10}\text{O}_{30}$ (blaue Bronze)

V Peierls Isolator

2. Peierls Übergang in $K_3Mo_{10}O_{30}$ (blaue Bronze)

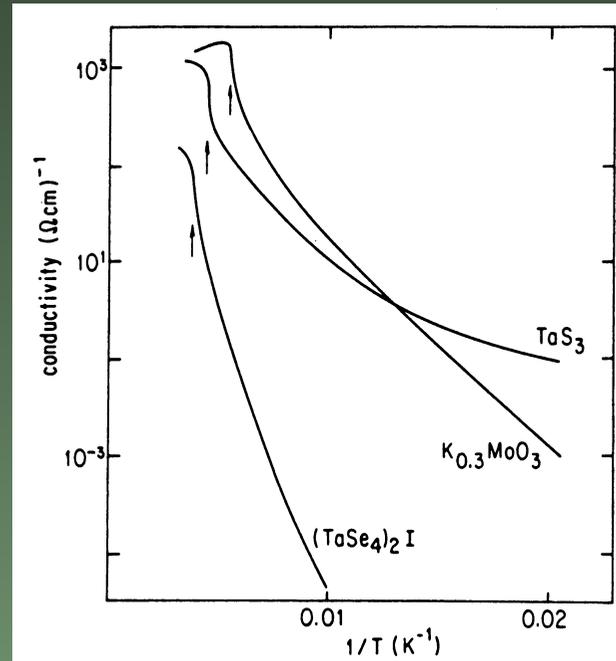
- Leitfähigkeit bei einem thermodynamischen Phasenübergang



V Peierls Isolator

2. Peierls Übergang in $\text{K}_3\text{Mo}_{10}\text{O}_{30}$ (blaue Bronze)

- Leitfähigkeit bei einem thermodynamischen Phasenübergang



- Bei tiefen Temperaturen ist die Gitterverzerrung stabil, die Ladungsdichtewelle zeigt eine Lücke für stromtragende Einteilchen-Anregungen.

VI Anderson Isolator

VI Anderson Isolator

1. Prinzip

VI Anderson Isolator

1. Prinzip

■ Annahmen:

1. stark fluktuierendes Gitterpotential
2. einzelnes Band an der Fermienergie E_F
3. keine Elektron-Elektron Wechselwirkung

VI Anderson Isolator

1. Prinzip

- Annahmen:
 1. stark fluktuierendes Gitterpotential
 2. einzelnes Band an der Fermienergie E_F
 3. keine Elektron-Elektron Wechselwirkung
- Konsequenz: Anderson-Modell mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_{\vec{l} \neq \vec{m}; \sigma} t_{\vec{l}, \vec{m}} \hat{c}_{\vec{l}, \sigma}^+ \hat{c}_{\vec{m}, \sigma} + \sum_{\vec{l}; \sigma} U_{\vec{l}} \hat{c}_{\vec{l}, \sigma}^+ \hat{c}_{\vec{l}, \sigma}$$

$t_{i,j}$: Amplituden für den Elektronentransfer von Gitterplatz \vec{R}_i zu Gitterplatz \vec{R}_j (L Gitterplätze)

U_i : lokal fluktuierendes Potential, z.B. gleichverteilt im Interval $[-\delta, \delta]$.

VI Anderson Isolator

- Streuung an einer *einzelnen* Verunreinigung ($U_{\vec{l} \neq \vec{l}_0} = 0$) liefert:
($L - 2$) makroskopisch ausgedehnte Streuzustände,
zwei lokalisierte 'bonding' und 'anti-bonding' Zustände

VI Anderson Isolator

- Streuung an einer *einzelnen* Verunreinigung ($U_{\vec{l} \neq \vec{l}_0} = 0$) liefert:
($L - 2$) makroskopisch ausgedehnte Streuzustände,
zwei lokalisierte 'bonding' und 'anti-bonding' Zustände
- Streuung an vielen Verunreinigungen liefert:
lokalisierte und ausgedehnte Zustände,
separiert durch die *Mobilitätskanten* $E_M^{(1,2)}$

VI Anderson Isolator

- Streuung an einer *einzelnen* Verunreinigung ($U_{\vec{l} \neq \vec{l}_0} = 0$) liefert: $(L - 2)$ makroskopisch ausgedehnte Streuzustände, zwei lokalisierte 'bonding' und 'anti-bonding' Zustände
- Streuung an vielen Verunreinigungen liefert: lokalisierte und ausgedehnte Zustände, separiert durch die *Mobilitätskanten* $E_M^{(1,2)}$
- Anderson-Isolator: endliche Lücke zwischen der Mobilitätskante und der Fermi-Energie,

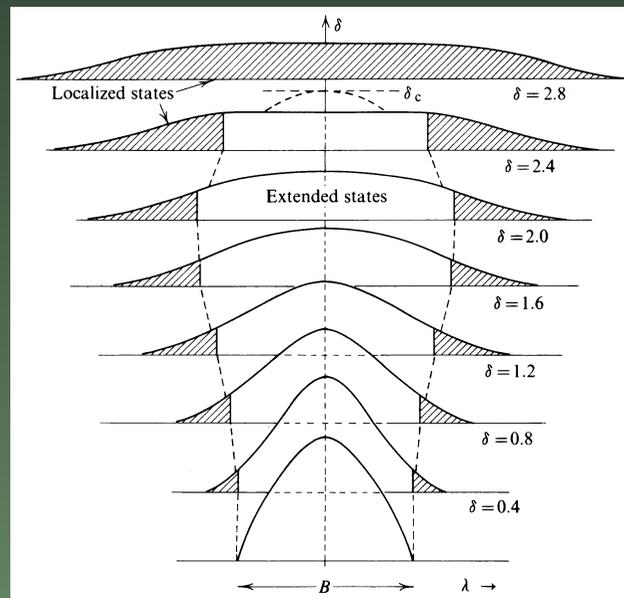
$$\Delta = E_M^{(1)} - E_F > 0$$

oder

$$\Delta = E_F - E_M^{(2)} > 0$$

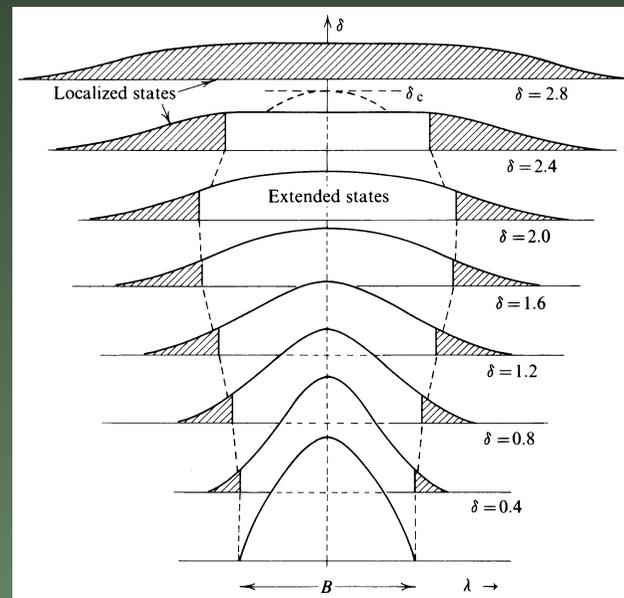
VI Anderson Isolator

- Schema der Zustandsdichte als Funktion der Stärke der Verunreinigungsstreuung



VI Anderson Isolator

- Schema der Zustandsdichte als Funktion der Stärke der Verunreinigungsstreuung



- Ein Quanten-Phasenübergang kann induziert werden
 - ◆ durch Variation der Stärke der Verunreinigungsstreuung δ im Verhältnis zur Bandbreite B (schwierig)
 - ◆ durch Auffüllen des Bandes (Dotierung ändert E_F)

VI Anderson Isolator

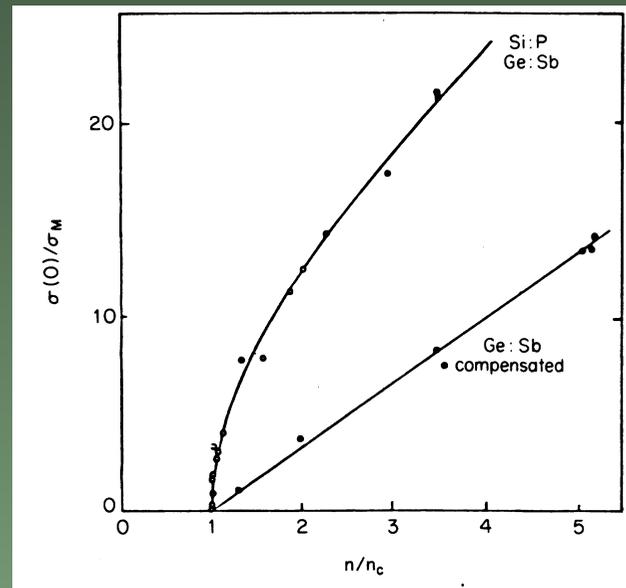
2. Anderson-Übergang in dotiertem Silizium (Si)/Germanium (Ge)

VI Anderson Isolator

2. Anderson-Übergang in dotiertem Silizium (Si)/Germanium (Ge)
 - P/Sb Atome: Donatoren für Elektronen *und* Streuzentren.
Die Zahl der Streuzentren kann erhöht werden durch Hinzufügen von gleichen Mengen P/Sb und Bor (B) ('Kompensation').

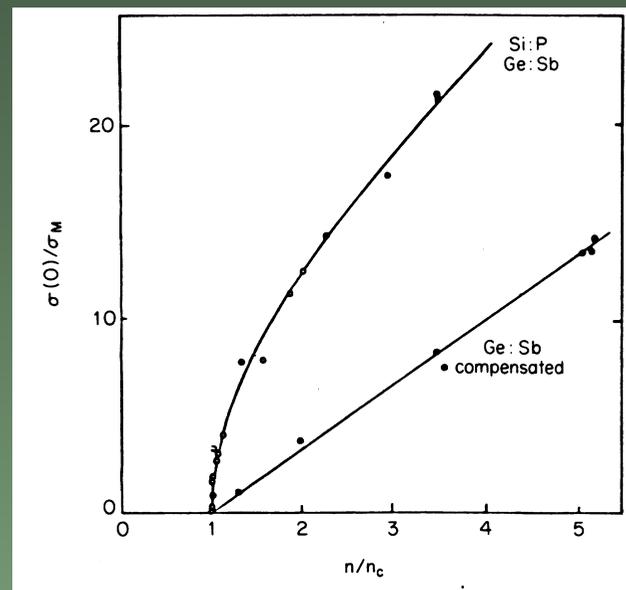
VI Anderson Isolator

- Anderson-Übergang in dotiertem Silizium (Si)/Germanium (Ge)
 - P/Sb Atome: Donatoren für Elektronen *und* Streuzentren. Die Zahl der Streuzentren kann erhöht werden durch Hinzufügen von gleichen Mengen P/Sb und Bor (B) ('Kompensation').



VI Anderson Isolator

- Anderson-Übergang in dotiertem Silizium (Si)/Germanium (Ge)
 - P/Sb Atome: Donatoren für Elektronen *und* Streuzentren. Die Zahl der Streuzentren kann erhöht werden durch Hinzufügen von gleichen Mengen P/Sb und Bor (B) ('Kompensation').



- Problematisch: kritischer Exponent ν in $\sigma \propto (n - n_c)^\nu$ ist schwer zu bestimmen – experimentell *und* theoretisch!

VI Anderson Isolator

3. Exponentenpuzzle (Theorie)

VI Anderson Isolator

3. Exponentenpuzzle (Theorie)

- Theoretische Vorhersage für ν aus der Entwicklung in $\epsilon = d - 2$:

$$\nu(d) = \frac{1}{\epsilon} - \frac{9}{4}\zeta(3)\epsilon^3 + \mathcal{O}(\epsilon^4)$$

Leider ist $\zeta(3) \approx 1.2$ und $\epsilon = 1$ in $d = 3$ Dimensionen!

VI Anderson Isolator

3. Exponentenpuzzle (Theorie)

- Theoretische Vorhersage für ν aus der Entwicklung in $\epsilon = d - 2$:

$$\nu(d) = \frac{1}{\epsilon} - \frac{9}{4}\zeta(3)\epsilon^3 + \mathcal{O}(\epsilon^4)$$

Leider ist $\zeta(3) \approx 1.2$ und $\epsilon = 1$ in $d = 3$ Dimensionen!

- Chayes-Grenze für Anderson-Modell:

$$\nu(d = 3) \geq 2/3$$

scheint verletzt zu sein für unkompensierte Materialien!

VI Anderson Isolator

3. Exponentenpuzzle (Theorie)

- Theoretische Vorhersage für ν aus der Entwicklung in $\epsilon = d - 2$:

$$\nu(d) = \frac{1}{\epsilon} - \frac{9}{4}\zeta(3)\epsilon^3 + \mathcal{O}(\epsilon^4)$$

Leider ist $\zeta(3) \approx 1.2$ und $\epsilon = 1$ in $d = 3$ Dimensionen!

- Chayes-Grenze für Anderson-Modell:

$$\nu(d = 3) \geq 2/3$$

scheint verletzt zu sein für unkompensierte Materialien!

- Numerische Rechnungen auf 'großen' Systemen liefern

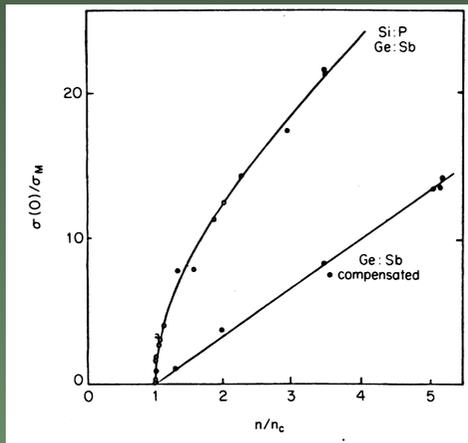
$$\nu(d = 3) = 1.4 \pm 0.2$$

VI Anderson Isolator

3. Exponentenpuzzle (Experiment)

VI Anderson Isolator

3. Exponentenpuzzle (Experiment)

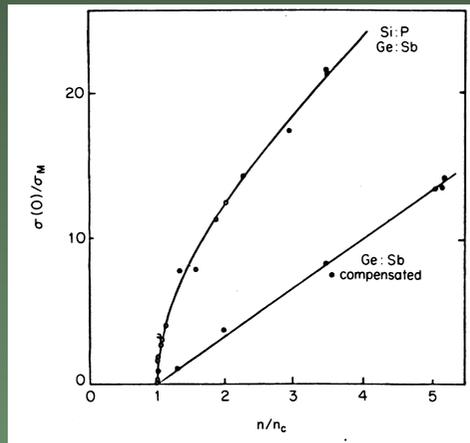


Resultate der Thomas-Gruppe

$$\nu \approx 0.5$$

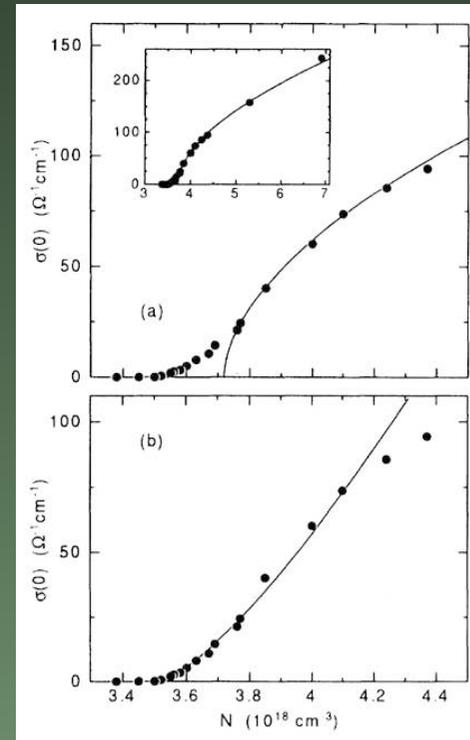
VI Anderson Isolator

3. Exponentenpuzzle (Experiment)



Resultate der Thomas-Gruppe

$$\nu \approx 0.5$$



Resultate der Löhneysen-Gruppe

$$\nu \approx 1.3$$

VII Mott Isolator

VII Mott Isolator

1. Prinzip

VII Mott Isolator

1. Prinzip

- Stark vereinfachende Annahmen:
 1. perfekt periodisches Gitter mit L Plätzen
 2. ein Band an der Fermienergie E_F mit Bandbreite W
 3. rein lokale Elektron-Elektron Wechselwirkung der Stärke U

VII Mott Isolator

1. Prinzip

- Stark vereinfachende Annahmen:
 1. perfekt periodisches Gitter mit L Plätzen
 2. ein Band an der Fermienergie E_F mit Bandbreite W
 3. rein lokale Elektron-Elektron Wechselwirkung der Stärke U
- Hamilton-Operator des *Hubbard Modells*

$$\hat{H} = \hat{T} + U\hat{D} - (U/2)\hat{N} + UL/4 ,$$

$$\hat{T} = \sum_{\vec{l}, \vec{m}; \sigma} t(\vec{l} - \vec{m}) \hat{c}_{\vec{l}, \sigma}^+ \hat{c}_{\vec{m}, \sigma} ,$$

$$\hat{D} = \sum_{\vec{l}} \hat{n}_{\vec{l}, \uparrow} \hat{n}_{\vec{l}, \downarrow} , \quad \hat{N} = \sum_{\vec{l}; \sigma} \hat{n}_{\vec{l}, \sigma} .$$

VII Mott Isolator

1. Prinzip

- Stark vereinfachende Annahmen:
 1. perfekt periodisches Gitter mit L Plätzen
 2. ein Band an der Fermienergie E_F mit Bandbreite W
 3. rein lokale Elektron-Elektron Wechselwirkung der Stärke U
- Hamilton-Operator des *Hubbard Modells*

$$\hat{H} = \hat{T} + U\hat{D} - (U/2)\hat{N} + UL/4 ,$$

$$\hat{T} = \sum_{\vec{l}, \vec{m}; \sigma} t(\vec{l} - \vec{m}) \hat{c}_{\vec{l}, \sigma}^+ \hat{c}_{\vec{m}, \sigma} ,$$

$$\hat{D} = \sum_{\vec{l}} \hat{n}_{\vec{l}, \uparrow} \hat{n}_{\vec{l}, \downarrow} , \quad \hat{N} = \sum_{\vec{l}; \sigma} \hat{n}_{\vec{l}, \sigma} .$$

- NEU: echtes Vielteilchen-Problem!

VII Mott Isolator

VII Mott Isolator

2. Mott-Übergang bei halber Bandfüllung, $N = L$

VII Mott Isolator

2. Mott-Übergang bei halber Bandfüllung, $N = L$

i. Schwache Wechselwirkung ($U \ll W$)

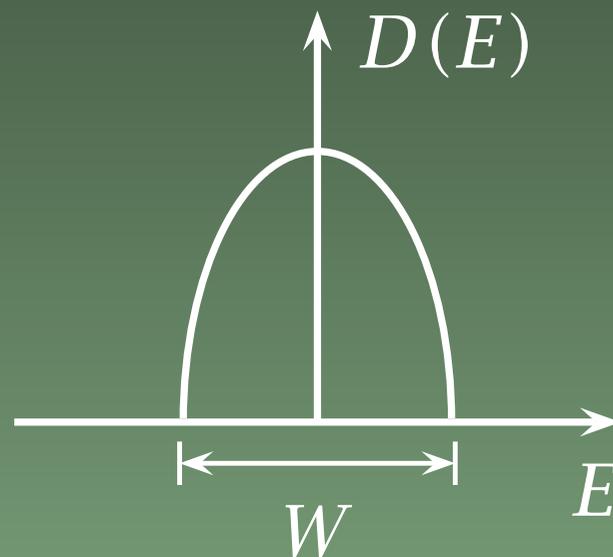
Die Zustände an der Fermikante $E_F = 0$ sind ausgedehnt,
es gibt keine Energielücke

VII Mott Isolator

2. Mott-Übergang bei halber Bandfüllung, $N = L$

i. Schwache Wechselwirkung ($U \ll W$)

Die Zustände an der Fermikante $E_F = 0$ sind ausgedehnt,
es gibt keine Energielücke



Metallischer Grundzustand

VII Mott Isolator

ii. Starke Wechselwirkung ($U \gg W$):

VII Mott Isolator

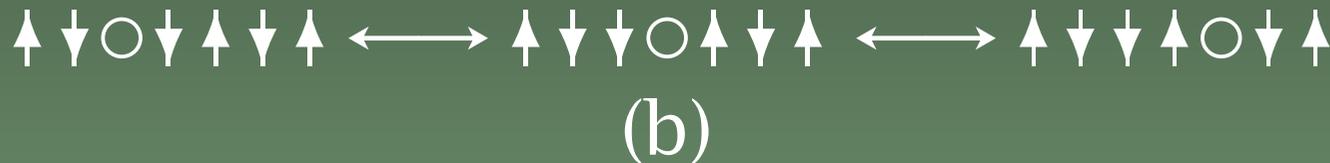
- ii. Starke Wechselwirkung ($U \gg W$):
 - (a) Band für Doppelbesetzungen: oberes Hubbard-Band
 - (b) Band für Lochanregungen: unteres Hubbard-Band

VII Mott Isolator

ii. Starke Wechselwirkung ($U \gg W$):

(a) Band für Doppelbesetzungen: oberes Hubbard-Band

(b) Band für Lochanregungen: unteres Hubbard-Band



VII Mott Isolator

ii. Starke Wechselwirkung ($U \gg W$):

(a) Band für Doppelbesetzungen: oberes Hubbard-Band

(b) Band für Lochanregungen: unteres Hubbard-Band



(a)



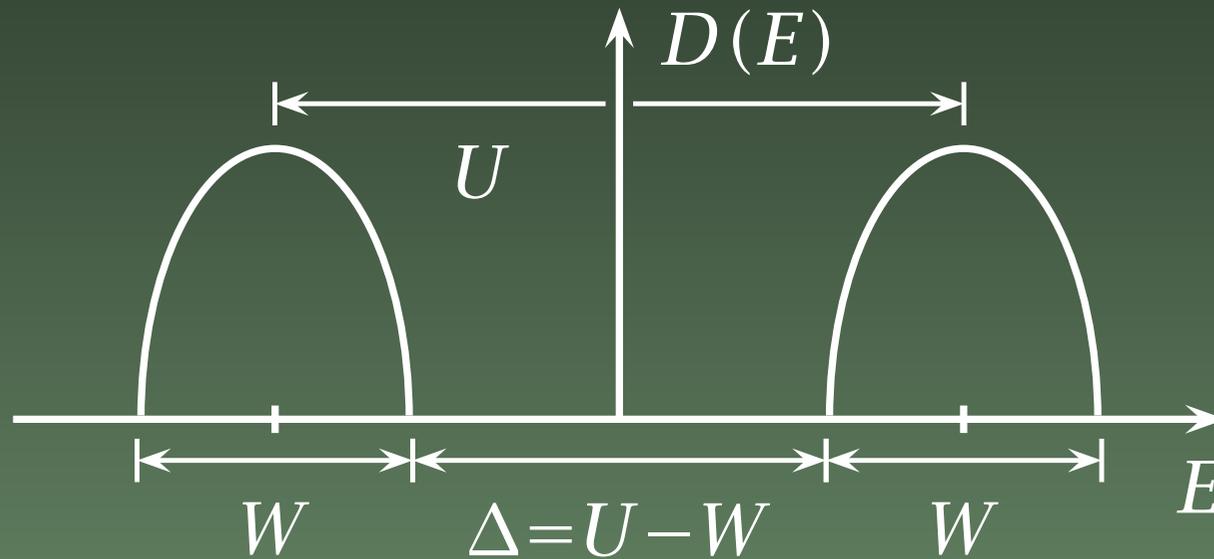
(b)

Energielücke

$$\Delta(U \gg W) \approx U - W > 0 \quad : \quad \text{Isolator}$$

VII Mott Isolator

Einteilchen-Zustandsdichte



Isolierender Grundzustand

VII Mott Isolator

- Die beiden Bänder für Ladungsanregungen sind durch die Energielücke $\Delta(U \gg W) \approx U - W > 0$ getrennt.

VII Mott Isolator

- Die beiden Bänder für Ladungsanregungen sind durch die Energielücke $\Delta(U \gg W) \approx U - W > 0$ getrennt.
- Die beiden Bänder verschmelzen bei $U_c \approx W$:
Mott-Hubbard Metall-Isolator Übergang

VII Mott Isolator

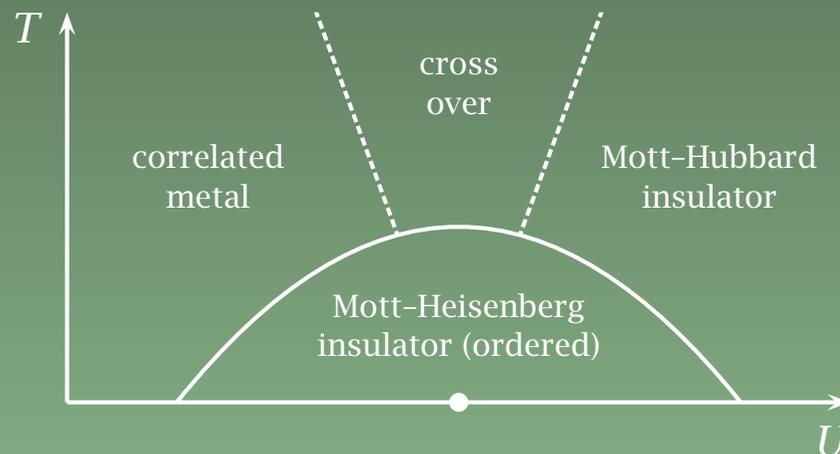
- Die beiden Bänder für Ladungsanregungen sind durch die Energielücke $\Delta(U \gg W) \approx U - W > 0$ getrennt.
- Die beiden Bänder verschmelzen bei $U_c \approx W$:
Mott-Hubbard Metall-Isolator Übergang
- Der Mott-Hubbard Übergang ist ein Quanten-Phasenübergang, er erfordert keine Symmetriebrechung

VII Mott Isolator

- Die beiden Bänder für Ladungsanregungen sind durch die Energielücke $\Delta(U \gg W) \approx U - W > 0$ getrennt.
- Die beiden Bänder verschmelzen bei $U_c \approx W$:
Mott-Hubbard Metall-Isolator Übergang
- Der Mott-Hubbard Übergang ist ein Quanten-Phasenübergang, er erfordert keine Symmetriebrechung
- Der Mott-Hubbard Übergang wird überdeckt durch die Ordnung der magnetischen Momente: Mott-Heisenberg Isolator

VII Mott Isolator

- Die beiden Bänder für Ladungsanregungen sind durch die Energielücke $\Delta(U \gg W) \approx U - W > 0$ getrennt.
- Die beiden Bänder verschmelzen bei $U_c \approx W$:
Mott-Hubbard Metall-Isolator Übergang
- Der Mott-Hubbard Übergang ist ein Quanten-Phasenübergang, er erfordert keine Symmetriebrechung
- Der Mott-Hubbard Übergang wird überdeckt durch die Ordnung der magnetischen Momente: Mott-Heisenberg Isolator



VII Mott Isolator

VII Mott Isolator

3. Qualitatives Phasendiagramm des Hubbard-Modells

VII Mott Isolator

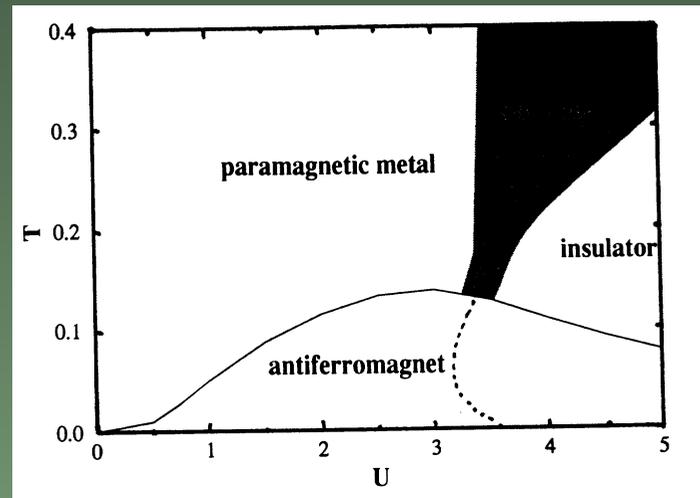
3. Qualitatives Phasendiagramm des Hubbard-Modells

- Nur im Limes hoher Dimensionen kann das Phasendiagramm quantitativ studiert werden – schwieriges Problem!

VII Mott Isolator

3. Qualitatives Phasendiagramm des Hubbard-Modells

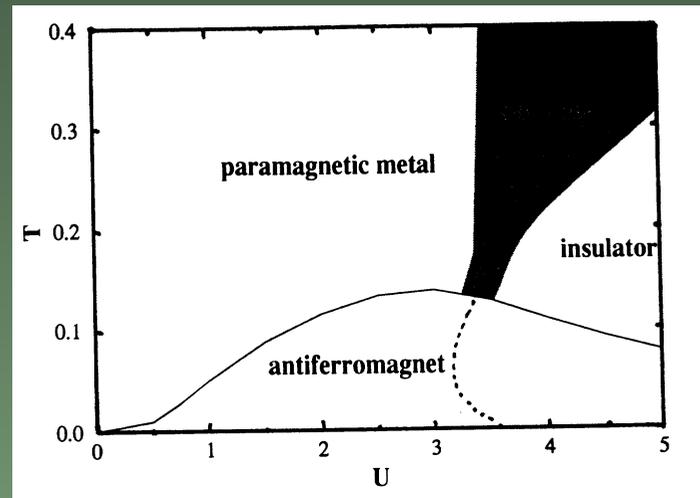
- Nur im Limes hoher Dimensionen kann das Phasendiagramm quantitativ studiert werden – schwieriges Problem!
- Phasendiagramm der Dynamischen Molekularfeld-Theorie



VII Mott Isolator

3. Qualitatives Phasendiagramm des Hubbard-Modells

- Nur im Limes hoher Dimensionen kann das Phasendiagramm quantitativ studiert werden – schwieriges Problem!
- Phasendiagramm der Dynamischen Molekularfeld-Theorie



- Alle qualitativen Phasen sind vorhanden
- Viele Gruppen finden auch Phasenübergänge erster Ordnung bei endlichen Temperaturen

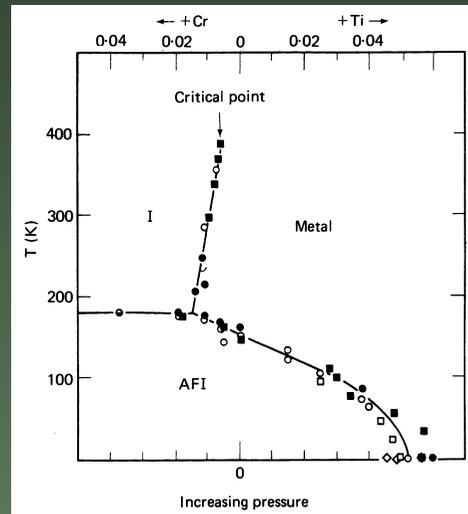
VII Mott Isolator

VII Mott Isolator

4. Phasendiagramm von Vanadium-Sesquioxid (V_2O_3) unter Druck

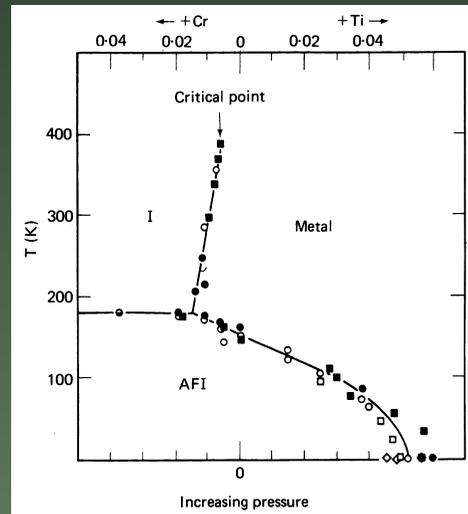
VII Mott Isolator

4. Phasendiagramm von Vanadium-Sesquioxid (V_2O_3) unter Druck



VII Mott Isolator

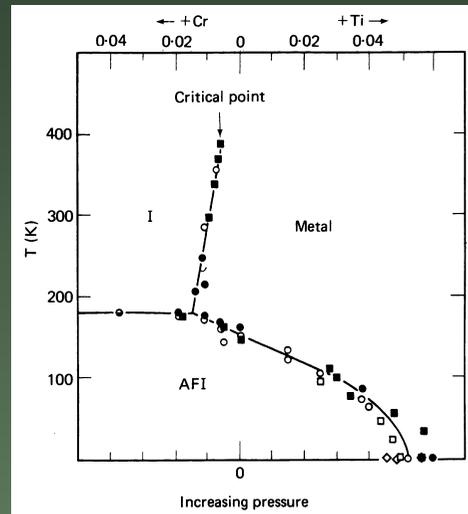
4. Phasendiagramm von Vanadium-Sesquioxid (V_2O_3) unter Druck



Reales Material, kein Hubbard-Modell:

VII Mott Isolator

4. Phasendiagramm von Vanadium-Sesquioxid (V_2O_3) unter Druck



Reales Material, kein Hubbard-Modell:

1. es gibt mehrere $3d$ -Bänder an der Fermikante
2. die Elektron-Gitter Wechselwirkung ist relevant, nahe der Übergänge treten starke Volumenänderungen auf
3. die Elektron-Elektron Wechselwirkung ist langreichweitig, eine konsistente Beschreibung der Abschirmung fehlt

VII Mott Isolator

All das ist (noch) zu kompliziert für heutige theoretisch/numerische Verfahren, aber:

VII Mott Isolator

All das ist (noch) zu kompliziert für heutige theoretisch/numerische Verfahren, aber:

Wir machen Fortschritte!

VIII Zusammenfassung

VIII Zusammenfassung

- Isolatoren gibt es nur am absoluten Temperaturnullpunkt

VIII Zusammenfassung

- Isolatoren gibt es nur am absoluten Temperaturnullpunkt
- Festkörper können Isolatoren sein

VIII Zusammenfassung

- Isolatoren gibt es nur am absoluten Temperaturnullpunkt
- Festkörper können Isolatoren sein
 - ◆ aufgrund der Wechselwirkung mit dem periodischen Gitterpotential (Bandisolatoren)

VIII Zusammenfassung

- Isolatoren gibt es nur am absoluten Temperaturnullpunkt
- Festkörper können Isolatoren sein
 - ◆ aufgrund der Wechselwirkung mit dem periodischen Gitterpotential (Bandisolatoren)
 - ◆ aufgrund einer statischen Gitterdeformation (Peierls-Isolatoren)

VIII Zusammenfassung

- Isolatoren gibt es nur am absoluten Temperaturnullpunkt
- Festkörper können Isolatoren sein
 - ◆ aufgrund der Wechselwirkung mit dem periodischen Gitterpotential (Bandisolatoren)
 - ◆ aufgrund einer statischen Gitterdeformation (Peierls-Isolatoren)
 - ◆ aufgrund (starker) Unordnung im Gitterpotential (Anderson-Isolatoren)

VIII Zusammenfassung

- Isolatoren gibt es nur am absoluten Temperaturnullpunkt
- Festkörper können Isolatoren sein
 - ◆ aufgrund der Wechselwirkung mit dem periodischen Gitterpotential (Bandisolatoren)
 - ◆ aufgrund einer statischen Gitterdeformation (Peierls-Isolatoren)
 - ◆ aufgrund (starker) Unordnung im Gitterpotential (Anderson-Isolatoren)
 - ◆ aufgrund der Elektron-Elektron Wechselwirkung (Mott-Isolatoren)

VIII Zusammenfassung

- Isolatoren gibt es nur am absoluten Temperaturnullpunkt
- Festkörper können Isolatoren sein
 - ◆ aufgrund der Wechselwirkung mit dem periodischen Gitterpotential (Bandisolatoren)
 - ◆ aufgrund einer statischen Gitterdeformation (Peierls-Isolatoren)
 - ◆ aufgrund (starker) Unordnung im Gitterpotential (Anderson-Isolatoren)
 - ◆ aufgrund der Elektron-Elektron Wechselwirkung (Mott-Isolatoren)

In der Natur lassen sich die Effekte nicht so sauber trennen ...!

VIII Zusammenfassung

- Metall-Isolator Übergänge passieren

VIII Zusammenfassung

- Metall-Isolator Übergänge passieren
 - ◆ in Folge von thermodynamischen Phasenübergängen (Kontrollparameter Temperatur T)

VIII Zusammenfassung

- Metall-Isolator Übergänge passieren
 - ◆ in Folge von thermodynamischen Phasenübergängen (Kontrollparameter Temperatur T)
 - ◆ in Folge von Quanten-Phasenübergängen bei $T = 0$ (Kontrollparameter Druck, Dotierung, etc.)

VIII Zusammenfassung

- Metall-Isolator Übergänge passieren
 - ◆ in Folge von thermodynamischen Phasenübergängen (Kontrollparameter Temperatur T)
 - ◆ in Folge von Quanten-Phasenübergängen bei $T = 0$ (Kontrollparameter Druck, Dotierung, etc.)
- Bandisolatoren und Peierls Isolatoren und ihre Metall-Isolator Übergänge sind gut verstanden

VIII Zusammenfassung

- Metall-Isolator Übergänge passieren
 - ◆ in Folge von thermodynamischen Phasenübergängen (Kontrollparameter Temperatur T)
 - ◆ in Folge von Quanten-Phasenübergängen bei $T = 0$ (Kontrollparameter Druck, Dotierung, etc.)
- Bandisolatoren und Peierls Isolatoren und ihre Metall-Isolator Übergänge sind gut verstanden
- Übergänge vom Metall zum Anderson Isolator oder zum Mott Isolator sind harte Nüsse für die Festkörperphysiker

VIII Zusammenfassung

- Metall-Isolator Übergänge passieren
 - ◆ in Folge von thermodynamischen Phasenübergängen (Kontrollparameter Temperatur T)
 - ◆ in Folge von Quanten-Phasenübergängen bei $T = 0$ (Kontrollparameter Druck, Dotierung, etc.)
- Bandisolatoren und Peierls Isolatoren und ihre Metall-Isolator Übergänge sind gut verstanden
- Übergänge vom Metall zum Anderson Isolator oder zum Mott Isolator sind harte Nüsse für die Festkörperphysiker

Es bleibt schwierig ...

VIII Zusammenfassung

- Metall-Isolator Übergänge passieren
 - ◆ in Folge von thermodynamischen Phasenübergängen (Kontrollparameter Temperatur T)
 - ◆ in Folge von Quanten-Phasenübergängen bei $T = 0$ (Kontrollparameter Druck, Dotierung, etc.)
- Bandisolatoren und Peierls Isolatoren und ihre Metall-Isolator Übergänge sind gut verstanden
- Übergänge vom Metall zum Anderson Isolator oder zum Mott Isolator sind harte Nüsse für die Festkörperphysiker

Es bleibt schwierig ...
– und spannend!

IX Dank

Mein besonderer Dank gilt Martin Paech für das Layout und seine Hilfe mit den Abbildungen!