

Beschreibung persistenter Ströme mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie

Diplomarbeit

von

Marc André Siegmund

Lehrstuhl für Theoretische Festkörperphysik
Institut für Technische Physik III
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Juli 2004

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Orbitaler Magnetismus in der Stromdichtefunktionaltheorie	3
2.1. Grundlagen der Stromdichtefunktionaltheorie	3
2.2. Universeller Zusammenhang zwischen Strom und Dichte	5
2.3. Homogenes Elektronengas im Magnetfeld: Landau-Niveaus	8
2.4. Diskussion der Funktion $\gamma(n, B)$	11
2.4.1. Ein besetztes Landau-Niveau	11
2.4.2. Zwei besetzte Landau-Niveaus	11
2.4.3. Allgemeines Verhalten der Funktion $\gamma_k(n, B)$	11
2.5. Magnetisierung des homogenen Elektronengases	12
2.5.1. Allgemeiner Zusammenhang zwischen Magnetisierung und Dichte	12
2.5.2. Stromdichte und Magnetisierung des homogenen beschränkten Elektronengases	13
2.5.3. Thermodynamische Berechnung der Magnetisierung	14
2.5.4. Diskussion	16
3. Magnetisierung und persistenter Strom in harmonisch begrenzten Systemen	19
3.1. Einteilchenzustände und -energien	19
3.2. Dichte und Stromdichte der Einteilchenzustände	21
3.3. Grundzustand des nicht wechselwirkenden Vielteilchensystems	23
3.3.1. Struktur des Grundzustandes	24
3.3.2. Grundzustandsdichte	29
3.3.3. Stromdichteverteilung im Grundzustand	30
3.3.4. Grundzustandsenergie und Fermienergie	34
3.4. Exakte Beschreibung der magnetischen Eigenschaften	37
3.5. Beschreibung der magnetischen Eigenschaften mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie	38
3.5.1. Stromdichte	38
3.5.2. Magnetisierung	44
3.6. Diskussion	47
4. Zusammenfassung und Ausblick	49

A. Mathematischer Anhang	51
A.1. Definition der konfluenten hypergeometrischen Funktion und Beweis der Summe über die Einteilchendichten	51
A.2. Ableitung der konfluenten hypergeometrischen Funktion	53
B. Danksagung	55
Literaturverzeichnis	57

1. Einleitung

Die Beschreibung der elektronischen und magnetischen Eigenschaften inhomogener Elektronensysteme in starken magnetischen Feldern ist sowohl von einem fundamentalen theoretischen Standpunkt aus als auch in Bezug auf vielfältige Anwendungen von Interesse.

In den letzten Jahren standen vor allem künstliche Systeme wie Quantenpunkte [1] und Quantenringe [2, 3] im Mittelpunkt der Aufmerksamkeit. Dabei handelt es sich um Halbleiter-Heterostrukturen, in denen Ladungsträger in allen drei Raumrichtungen eingeschlossen sind. Solche Systeme besitzen eine Reihe von Gemeinsamkeiten mit (natürlichen) Atomen, zum Beispiel weisen sie diskrete Energieniveaus auf. Darüberhinaus können die äußeren Parameter dieser künstlichen Systeme kontrolliert werden, etwa die Zahl der eingeschlossenen Elektronen oder die Form des einschließenden Potentials. Man erhält also ein Labormodell, an dem man sowohl das Verhalten einer kontrollierbaren Zahl wechselwirkender Teilchen, als auch den Einfluss externer Felder untersuchen kann. Besondere Aufmerksamkeit fanden dabei die magnetischen Eigenschaften solcher Systeme [3, 4] und insbesondere die Existenz persistenter Ströme [3, 5].

Auch die Beschreibung natürlicher Systeme in extrem starken Magnetfeldern ist von Interesse. Anwendungen ergeben sich dabei sowohl im Bereich der Physik kondensierter Materie soweit sie im Labor zugänglich ist, als auch bei astrophysikalischen Fragestellungen, etwa nach der Struktur der Materie auf Neutronensternoberflächen [6].

Allen realistischen Systemen ist gemeinsam, dass es sich um wechselwirkende, inhomogene Vielteilchensysteme handelt. Ein vielversprechender theoretischer Ansatz zur Beschreibung solcher Systeme in magnetischen Feldern ist die Stromdichtefunktionaltheorie [7], die alle Grundzustandseigenschaften des wechselwirkenden Systems als Funktionale der Dichte und Stromdichte darstellt. Dabei wird das inhomogene wechselwirkende System häufig lokal durch ein homogenes System gleicher Dichte und paramagnetischer Stromdichte genähert. In Anwesenheit eines magnetischen Feldes kann eine solche Näherung auch für ein nicht wechselwirkendes System problematisch sein. Wir werden sehen, dass gerade in Bereichen, in denen sich die Dichte stark ändert, starke Ströme fließen. Das wird vor allem an den Systemgrenzen der Fall sein. Das heißt, dass die induzierten Ströme eine makroskopische Ausdehnung besitzen, die von der gleichen Größenordnung ist wie das System selbst oder wie die Skala der Phasenkohärenz im Fall von mesoskopischen Systemen wie Quantenpunkten und -ringen. Daher stellt sich zunächst die Frage, inwiefern eine Beschreibung dieser persistenten Ströme und der orbitalen magnetischen Eigenschaften solcher Systeme lokal sein kann.

Wir wollen in dieser Arbeit untersuchen, ob die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie geeignet ist, die Magnetisierung und Stromdichteverteilung eines

nicht wechselwirkenden inhomogenen Systems im starken Magnetfeld zu beschreiben. Besondere Aufmerksamkeit werden wir dabei dem gemeinsamen Einfluss von magnetischem Feld und externem Potential auf die Grundzustandseigenschaften des Systems widmen und welche Auswirkungen sich daraus auf die Beschreibung des Systems im Rahmen der Stromdichtefunktionaltheorie ergeben.

Diese Arbeit ist wie folgt aufgebaut.

In *Kapitel 2* geben wir zunächst einen kurzen Überblick über den Formalismus der Stromdichtefunktionaltheorie. Wir diskutieren dann ausgehend von ihrer lokalen Näherung einen universellen Zusammenhang zwischen Strom und Dichte in inhomogenen Systemen. Dabei beschränken wir uns auf extrem starke Magnetfelder. Wir erwarten, dass dann eine lokale Beschreibung möglich ist, da der Zyklotronradius kleiner ist als die typische Längenskala der Inhomogenität. Der Zusammenhang zwischen Strom und Dichte wird es uns gestatten, die Verteilung der Stromdichte ohne Kenntnis der Wellenfunktion zu beschreiben. Dazu benötigen wir die Abhängigkeit des chemischen Potentials von der Stärke des Magnetfeldes. Wir diskutieren also den Grundzustand des homogenen Elektronengases im Magnetfeld. Schließlich geben wir einen Ausdruck für die Magnetisierung als Funktional der Dichte für Systeme an, die auf das unterste Landau-Niveau beschränkt sind. Wir überprüfen diesen Zusammenhang, indem wir die Magnetisierung des räumlich beschränkten homogenen Elektronengases im starken Magnetfeld mit Hilfe dieses Funktionals und im Rahmen einer thermodynamischen Rechnung bestimmen und die Ergebnisse vergleichen. Dabei werden wir finden, dass die Berechnung der Magnetisierung ausgehend von der Stromdichteverteilung für das homogene nicht-wechselwirkende Elektronengas exakt möglich ist.

In *Kapitel 3* untersuchen wir, inwiefern es möglich ist, mit Hilfe des universellen Zusammenhanges zwischen Strom und Dichte sowie mit Hilfe des daraus abgeleiteten Ausdrucks für die Magnetisierung des Systems ein einfaches inhomogenes System zu beschreiben. Dazu diskutieren wir den nicht wechselwirkenden Vielteilchen-Grundzustand des dreidimensionalen harmonischen Oszillators im Magnetfeld. Wir bestimmen die Dichteverteilung, die Verteilung der Stromdichte sowie die Grundzustandsenergie und erhalten daraus exakte Ausdrücke für die Magnetisierung in verschiedenen Bereichen der magnetischen Feldstärke. Mit Hilfe der in Kapitel 2 diskutierten Zusammenhänge zwischen Strom und Dichte sowie zwischen Magnetisierung und Dichte können wir die magnetischen Eigenschaften im Rahmen der Stromdichtefunktionaltheorie beschreiben. Wir bestimmen zunächst die Verteilung der Stromdichte und vergleichen sie mit den exakten Ergebnissen, die wir aus den Einteilchen-Wellenfunktionen erhalten haben. Dabei werden wir finden, dass die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie die Verteilung der Ströme richtig beschreibt, ihre Stärke aber zu gering angibt. Ein ähnliches Verhalten wird die Magnetisierung zeigen, die wir mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie aus der Dichteverteilung des Systems bestimmen. Auch hier wird die exakte Magnetisierung etwas stärker sein als die genäherte. Wir erklären dieses Verhalten schließlich ausgehend von den Ergebnissen, die wir in Kapitel 2 für das homogene Elektronengas erhalten haben.

In *Kapitel 4* fassen wir unsere Ergebnisse zusammen und geben einen kurzen Ausblick auf neue Fragestellungen, die sich daraus ergeben.

2. Orbitaler Magnetismus in der Stromdichtefunktionaltheorie

2.1. Grundlagen der Stromdichtefunktionaltheorie

Die Beschreibung inhomogener wechselwirkender Vielteilchensysteme in magnetischen Feldern ist Ziel der Stromdichtefunktionaltheorie (CDFT) [7]. Sie ist eine Erweiterung der ursprünglichen Dichtefunktionaltheorie (DFT), die auf dem Hohenberg-Kohn-Theorem aufbaut [8]. Beide können durch ein Variationsprinzip bewiesen werden. Zentraler Punkt einer Dichtefunktionaltheorie ist die Darstellung der Grundzustandsgrößen, insbesondere der Grundzustandsenergie, als ein Funktional der Dichte und – im Fall der CDFT – der (paramagnetischen) Stromdichte:

$$E[n, \mathbf{j}_p] = F[n, \mathbf{j}_p] + \int d^3r n(\mathbf{r})V(\mathbf{r}) + \frac{e}{c} \int d^3r \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2m_e c^2} \int d^3r n(\mathbf{r})A^2(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

Dabei ist $F[n, \mathbf{j}_p]$ ein universelles Funktional der Dichte n und der paramagnetischen Stromdichte \mathbf{j}_p , das die äußeren Felder nicht enthält. Die übrigen Terme beschreiben die Kopplung der Dichte und Stromdichte an ein äußeres skalares Potential $V(\mathbf{r})$ bzw. Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, e ist die Elementarladung, m_e die (effektive) Elektronenmasse und c die Lichtgeschwindigkeit. Das Funktional

$$F[n, \mathbf{j}_p] = T[n, \mathbf{j}_p] + E_H[n, \mathbf{j}_p] + E_{xc}[n, \mathbf{j}_p] \quad (2.2)$$

wird weiter zerlegt in einen nicht wechselwirkenden kinetischen Anteil $T[n, \mathbf{j}_p]$, den Hartree-Term $E_H[n, \mathbf{j}_p]$, der die direkte elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Teilchen beschreibt, und einen Term $E_{xc}[n, \mathbf{j}_p]$, der alle quantenmechanischen Vielteilcheneffekte enthält. Die Austausch-Korrelationsenergie E_{xc} ist der einzige Term, der genähert werden muss.

Dieses Energiefunktional enthält die paramagnetische Stromdichte, die keine eichinvariante Größe ist. Daher muss die Eichinvarianz durch die Form gewährleistet werden, in der das Funktional die paramagnetische Stromdichte enthält [7]. Wir finden durch Vergleich der Energiefunktionale für das ursprüngliche Vektorpotential \mathbf{A} und für das transformierte Vektorpotential, dass die Austausch-Korrelations-Energie von der paramagnetischen Stromdichte nur in der Kombination $\mathbf{v} = \nabla \times \mathbf{j}_p/n$ abhängen darf [7]. Die Größe \mathbf{v} heißt Vortizität des Systems und ist eichinvariant.

Das Energiefunktional nimmt für die richtigen Werte der Dichte und Stromdichte ein Minimum an. Diese Bedingung lässt sich in ein selbstkonsistent zu lösendes effektives Einteilchenproblem für N nicht wechselwirkende Teilchen überführen. Wir erhalten so das Kohn-Sham-System [9] der Stromdichtefunktionaltheorie [7]:

$$\left\{ \frac{1}{2m_e} \left[-i\hbar\nabla + \frac{e}{c} [\mathbf{A}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_{xc}(\mathbf{r})] \right]^2 + \frac{e^2}{2m_e c^2} \left[A^2(\mathbf{r}) - [\mathbf{A}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_{xc}(\mathbf{r})]^2 \right] + V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.3)$$

Dabei sind das Hartree-Potential $V_H(\mathbf{r})$, das skalare Austausch-Korrelations-Potential $V_{xc}(\mathbf{r})$ und das Austausch-Korrelations-Vektorpotential $\mathbf{A}_{xc}(\mathbf{r})$ Funktionale der Dichte und Stromdichte:

$$V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int d^3 r' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.4a)$$

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \left. \frac{\delta E_{xc}[n, \mathbf{j}_p]}{\delta n(\mathbf{r})} \right|_{\mathbf{j}_p} \quad (2.4b)$$

$$\frac{e}{c} \mathbf{A}_{xc}(\mathbf{r}) = \left. \frac{\delta E_{xc}[n, \mathbf{j}_p]}{\delta \mathbf{j}_p(\mathbf{r})} \right|_n. \quad (2.4c)$$

Die notwendigen Größen Dichte und Stromdichte werden aus den Einteilchenwellenfunktionen $\psi_i(\mathbf{r})$ berechnet:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.5)$$

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m_e} \sum_{i=1}^N \{ \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla \psi_i(\mathbf{r}) - [\nabla \psi_i^*(\mathbf{r})] \psi_i(\mathbf{r}) \}. \quad (2.6)$$

Aus den Kohn-Sham-Energien ε_i lässt sich schließlich die Grundzustandsenergie berechnen:

$$\begin{aligned} E &= \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - \frac{1}{2} \iint d^3 r d^3 r' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &\quad - \int d^3 r n(\mathbf{r}) V_{xc}(\mathbf{r}) \\ &\quad - \frac{e}{c} \int d^3 r \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_{xc}(\mathbf{r}) + E_{xc}[n, \mathbf{j}_p]. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Die Kohn-Sham-Eigenwerte ε_i besitzen keine physikalische Bedeutung. Eine Ausnahme ist der Eigenwert zum höchsten besetzten Niveau. Er entspricht dem chemischen Potential des Systems.

2.2. Universeller Zusammenhang zwischen Strom und Dichte

Vignale und Skudlarski haben gezeigt, dass es im Rahmen einer lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie möglich ist, einen universellen Zusammenhang zwischen Strom und Dichte herzustellen [10]:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m_e} \gamma(n, B) \nabla n(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{z}}. \quad (2.8)$$

Dabei ist $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ die (physikalische) Stromdichte, $n(\mathbf{r})$ die Dichte und $\hat{\mathbf{z}}$ ein Einheitsvektor in Richtung des Magnetfeldes. Die Funktion $\gamma(n, B)$ ist proportional zur Ableitung des chemischen Potentials μ nach der Stärke des Magnetfeldes B :

$$\gamma(n, B) = \frac{2m_e c}{\hbar e} \frac{\partial \mu}{\partial B}. \quad (2.9)$$

Wir diskutieren den nicht wechselwirkenden Teil der Funktion $\gamma(n, B)$ in Abschnitt 2.4 genauer.

Bevor wir die Herleitung von Gleichung (2.8) ausführlich darstellen, soll sie qualitativ erläutert werden. Dazu betrachten wir zunächst ein Elektronengas im homogenen Magnetfeld. Bei konstanter Dichte kompensieren sich die durch das Magnetfeld induzierten mikroskopischen Kreisströme überall. Ist dagegen die Dichte räumlich nicht konstant, das heißt, der Gradient der Dichte verschwindet nicht überall, so können sich dort die Kreisströme nicht kompensieren und ein Strom fließt.

Formal erhalten wir diesen Zusammenhang durch Minimierung des Energiefunctionals in lokaler Näherung nach der Stromdichte bei festgehaltener Dichte. Dazu müssen die Austausch-Korrelations-Energie und die kinetische Energie lokal genähert werden. E_{xc} wird dabei einfach durch die Austausch-Korrelations-Energie pro Teilchen ϵ_{xc} in einem homogenen System der Dichte n und Stromdichte \mathbf{j}_p ausgedrückt. Die Stromdichte lässt sich durch ein fiktives Magnetfeld \mathbf{B}_f darstellen. Wir erhalten das Vektorpotential \mathbf{A}_f , das dieses Feld erzeugt, aus der Bedingung, dass im homogenen System die physikalische Stromdichte überall identisch Null ist

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) + \frac{e}{m_e c} \mathbf{A}_f(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.10)$$

und finden

$$\mathbf{A}_f(\mathbf{r}) = -\frac{m_e c}{e} \frac{\mathbf{j}_p(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})}. \quad (2.11)$$

Das fiktive Magnetfeld ist dann die Rotation des so definierten Vektorpotentials

$$\mathbf{B}_f(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}_f(\mathbf{r}) = -\frac{m_e c}{e} \nabla \times \frac{\mathbf{j}_p(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} = -\frac{m_e c}{e} \mathbf{v}(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

Wir erkennen, dass dieses Feld der Vortizität \mathbf{v} des Systems entspricht und erhalten damit für die Austausch-Korrelations-Energie:

$$E_{xc}[n(\mathbf{r}), \mathbf{j}_p(\mathbf{r})] = \int d^3r n(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}(n(\mathbf{r}), |\mathbf{B}_f(\mathbf{r})|). \quad (2.13)$$

Mit Hilfe des fiktiven Magnetfeldes und Vektorpotentials lässt sich auch das Funktional der kinetischen Energie nicht wechselwirkender Teilchen ausdrücken:

$$\begin{aligned}
 T_s[n(\mathbf{r}), \mathbf{j}_p(\mathbf{r})] &= \int d^3r n(\mathbf{r}) \epsilon_k(n(\mathbf{r}), |\mathbf{B}_f(\mathbf{r})|) \\
 &\quad - \frac{e}{c} \int d^3r \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_f(\mathbf{r}) \\
 &\quad - \frac{e^2}{2m_e c^2} \int d^3r n(\mathbf{r}) A_f^2(\mathbf{r}).
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

Dabei ist $\epsilon_k(n(\mathbf{r}), |\mathbf{B}_f(\mathbf{r})|)$ die Energie pro Teilchen eines nicht-wechselwirkenden Elektronengases der Dichte n im fiktiven Magnetfeld \mathbf{B}_f . Die davon zu subtrahierenden Terme drücken die Kopplung von Strom und Dichte des Elektronengases an das fiktive Magnetfeld aus. Wir haben also die kinetische Energie nicht wechselwirkender Teilchen lokal durch die Energie des nicht-wechselwirkenden homogenen Elektronengases genähert. Diese Beschreibung ist daher eine Thomas-Fermi-artige Näherung.

Insgesamt können wir das Energiefunktional schreiben:

$$\begin{aligned}
 E[n(\mathbf{r}), \mathbf{j}_p(\mathbf{r})] &= \int d^3r n(\mathbf{r}) \epsilon(n(\mathbf{r}), |\mathbf{B}_f(\mathbf{r})|) + E_H[n(\mathbf{r})] + \int d^3r n(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \\
 &\quad + \frac{e}{c} \int d^3r \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2m_e c^2} \int d^3r n(\mathbf{r}) A^2(\mathbf{r}) \\
 &\quad - \frac{e}{c} \int d^3r \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_f(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{2m_e c^2} \int d^3r n(\mathbf{r}) A_f^2(\mathbf{r})
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

mit $\epsilon = \epsilon_k + \epsilon_{xc}$.

Wir verwenden nun noch den Zusammenhang zwischen der paramagnetischen und der physikalischen Stromdichte sowie zwischen dem fiktiven Magnetfeld und dem tatsächlich Vorhandenen

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{r}) = \mathbf{j}(\mathbf{r}) - \frac{e}{m_e c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) \tag{2.16a}$$

$$\mathbf{A}_f(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \frac{m_e c}{e} \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \tag{2.16b}$$

und erhalten für das Energiefunktional:

$$\begin{aligned}
 E[n(\mathbf{r}), \mathbf{j}_p(\mathbf{r})] &= \int d^3r n(\mathbf{r}) \epsilon(n(\mathbf{r}), |\mathbf{B}_f(\mathbf{r})|) + \frac{m_e}{2} \int d^3r \frac{|\mathbf{j}(\mathbf{r})|^2}{n(\mathbf{r})} \\
 &\quad + E_H[n(\mathbf{r})] + \int d^3r n(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}).
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Hier ist die mikroskopische Kopplung von Strom und Magnetfeld durch die (makroskopische) kinetische Energie $m_e/2 \int d^3r |\mathbf{j}(\mathbf{r})|^2/n(\mathbf{r})$ ersetzt worden.

Dieses Funktional kann nun bei festgehaltenem Dichteprofil bezüglich der Stromdichte minimiert werden. Dabei ist die Minimierung nach der physikalischen Stromdichte äquivalent zur Minimierung nach der paramagnetischen Stromdichte, da Dichte

und äußeres Magnetfeld konstant gehalten werden. Durch Variation des Energiefunktionals nach der Stromdichte erhalten wir:

$$\begin{aligned}\delta E[n, \mathbf{j}_p] &= \int d^3r n(\mathbf{r}) \left\{ \epsilon(n, |\mathbf{B}_f(\mathbf{j}_p + \delta \mathbf{j}_p)|) - \epsilon(n, |\mathbf{B}_f(\mathbf{j}_p)|) \right\} + m_e \int d^3r \frac{\mathbf{j}}{n} \delta \mathbf{j}_p \\ &= \int d^3r \left\{ n(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon(n, |\mathbf{B}_f|)}{\partial \mathbf{B}_f} \left(-\frac{m_e c}{e} \nabla \times \frac{\delta \mathbf{j}_p}{n} \right) + \frac{m_e}{n} \mathbf{j} \delta \mathbf{j}_p \right\}.\end{aligned}\quad (2.18)$$

Der erste Summand der zweiten Zeile lässt sich umformen:

$$\begin{aligned}\int d^3r n(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon(n, |\mathbf{B}_f|)}{\partial \mathbf{B}_f} \left(\nabla \times \frac{\delta \mathbf{j}_p}{n} \right) &= \\ \int d^3r \frac{\delta \mathbf{j}_p}{n} \left(\nabla \times n(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon(n, |\mathbf{B}_f|)}{\partial \mathbf{B}_f} \right) &- \int d^3r \nabla \cdot \left(n(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon(n, |\mathbf{B}_f|)}{\partial \mathbf{B}_f} \times \frac{\delta \mathbf{j}_p}{n} \right).\end{aligned}\quad (2.19)$$

Der zweite Term auf der rechten Seite der Gleichung verschwindet als Oberflächenterm und damit können wir die Variation des Energiefunktionals schreiben:

$$\delta E[n, \mathbf{j}_p] = - \int d^3r \left\{ \frac{m_e c}{e} \frac{1}{n(\mathbf{r})} \left(\nabla \times n(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon(n, |\mathbf{B}_f|)}{\partial \mathbf{B}_f} \right) - \frac{m_e}{n(\mathbf{r})} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \right\} \delta \mathbf{j}_p.\quad (2.20)$$

Die Bedingung für ein Minimum ist $\delta E[n, \mathbf{j}_p] \stackrel{!}{=} 0$ und wir erhalten einen Satz von Euler-Lagrange-Gleichungen für dieses Funktional:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{c}{e} \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r})\quad (2.21a)$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = -n(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon(n(\mathbf{r}), |\mathbf{B}(\mathbf{r})|)}{\partial B} \hat{\mathbf{z}}\quad (2.21b)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}_0 - \frac{m_e c}{e} \nabla \times \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})}.\quad (2.21c)$$

Hier ist $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ die lokale thermodynamische Magnetisierung und \mathbf{B}_0 das äußere Magnetfeld. Grundsätzlich stellen diese Gleichungen ein selbstkonsistent zu lösendes System dar. Sie lassen sich jedoch deutlich vereinfachen, wenn die Dichte räumlich nur langsam variiert. In diesem Fall kann man annehmen, dass sich auch die Stromdichte nur langsam ändert. Dann gilt:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{B}_0(\mathbf{r})\quad (2.22)$$

und die beiden Gleichungen (2.21a) und (2.21b) geben geschlossen die Stromdichte als Funktional der Dichte an.

Ist zudem das äußere Magnetfeld homogen, so wirkt die Ableitung in Gleichung (2.21a) nur auf die Dichte und wir können schreiben:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}) &= -\nabla \times n(\mathbf{r}) \frac{\partial \epsilon(n(\mathbf{r}), \mathbf{B})}{\partial B} \hat{\mathbf{z}} \\ &= -\nabla n(\mathbf{r}) \left(\frac{\partial \epsilon(n(\mathbf{r}), B)}{\partial B} + n(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 \epsilon(n(\mathbf{r}), B)}{\partial n \partial B} \right) \times \hat{\mathbf{z}}.\end{aligned}\quad (2.23)$$

Eingesetzt in (2.21a) erhalten wir den gesuchten Zusammenhang zwischen Strom und Dichte:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m_e} \gamma(n, B) \nabla n(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{z}} \quad (2.24a)$$

$$\gamma(n, B) = \frac{2m_e c}{\hbar e} \left(1 + n(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial n} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial B} = \frac{2m_e c}{\hbar e} \frac{\partial \mu}{\partial B}. \quad (2.24b)$$

Entscheidend für die Stärke und Richtung des Stromes im Punkt \mathbf{r} ist also neben dem Gradient der Dichte an diesem Ort auch der Wert der Dichte selbst sowie die Stärke des Magnetfeldes.

2.3. Homogenes Elektronengas im Magnetfeld: Landau-Niveaus

Zum Verständnis des nicht wechselwirkenden Anteils der Funktion $\gamma(n, B)$ betrachten wir ein homogenes nicht wechselwirkendes Elektronengas der Dichte n in einem homogenen Magnetfeld \mathbf{B} . In einem nicht wechselwirkenden System ist der Vielteilchenzustand ein (antisymmetrisiertes) Produkt der besetzten Einteilchenzustände. Wir können daher mit Hilfe des vollständigen Einteilchenspektrums und der Entartung der Einteilchenzustände das System vollständig beschreiben.

Ein Elektron der Masse m_e und Ladung e wird in einem homogenen Magnetfeld $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ mit Vektorpotential \mathbf{A} durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left[-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right]^2 \quad (2.25)$$

beschrieben. Die Form der Eigenfunktionen hängt von der verwendeten Eichung für das Vektorpotential \mathbf{A} ab. Wir wählen die symmetrische Eichung, bei der \mathbf{A} durch

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (2.26)$$

gegeben ist und verwenden im Folgenden Zylinderkoordinaten zur Beschreibung unseres Systems. Dabei ist ρ der Abstand von der Symmetrieachse (z -Achse), z die Koordinate entlang dieser Achse und φ der Azimutalwinkel. Wenn wir die Richtung des Magnetfeldes als Richtung der z -Achse unseres Systems wählen, erhalten wir für das Vektorpotential

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}\rho\mathbf{e}_\varphi \quad (2.27)$$

und damit für den Hamiltonoperator (2.25)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m_e}\nabla^2 - i\frac{eB}{2m_e c}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e^2 B^2}{8m_e c^2}\rho^2. \quad (2.28)$$

Der von der Koordinate ρ abhängige Anteil dieses Hamilton-Operators entspricht einem harmonischen Oszillator mit Frequenz $eB/2m_e c$. Die Eigenfunktionen dieses Systems sind durch

$$\psi_{lmk}(\rho, \varphi, z) \propto \left(\frac{\rho}{\sqrt{2\lambda}}\right)^{|m|} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4\lambda^2}\right) L_l^{|m|}\left(\frac{\rho^2}{2\lambda^2}\right) \exp(im\varphi) \exp(ikz) \quad (2.29)$$

gegeben. Hier ist L_l^m ein assoziiertes Laguerre-Polynom und $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ die magnetische Länge. Ein Zustand wird also durch die drei Quantenzahlen l , m und k beschrieben. Dabei bezeichnet l das Oszillatorniveau, m die Komponente des Drehimpulses in Richtung des Magnetfeldes und k den Impuls entlang des Magnetfeldes. Die Zustände mit gleicher (Haupt-)Quantenzahl l , aber verschiedenen Quantenzahlen m und k , bezeichnen wir als das l -te Landau-Niveau.

Wir betrachten im Folgenden nur Zustände mit $m \geq 0$. Die Zustände mit l und $m < 0$ liegen energetisch jeweils im nächsthöheren Landau-Niveau $l + 1$ und wir wollen uns später auf Systeme beschränken, bei denen sich alle Teilchen im untersten Landau-Niveau befinden.

Die Energieeigenwerte des Systems setzen sich aus denen eines eindimensionalen harmonischen Oszillators mit der Zyklotronfrequenz $\omega_c = \frac{eB}{m_e c}$ als Oszillatorfrequenz und der Energie der freien Bewegung mit Impuls $\hbar k$ in Richtung des Magnetfeldes zusammen:

$$\epsilon_{lk} = \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}. \quad (2.30)$$

Diese Energieeigenwerte sind bezüglich der Drehimpuls-Quantenzahl m entartet. Für die Anzahl der Zustände ν im Ortsraumvolumen V und Intervall dk erhält man [11]:

$$\nu dk = \frac{eB}{4\pi^2 \hbar c} dk. \quad (2.31)$$

Wir betrachten nun den aus N nicht wechselwirkenden Teilchen bestehenden Vielteilchenzustand bei Temperatur $T = 0$. Die N Teilchen werden dabei so auf die verfügbaren Zustände verteilt, dass die Gesamtenergie, also die Summe der Einteilchenenergien, minimal ist. Die größte Einteilchenenergie ist das chemische Potential μ im Magnetfeld. Um in einem System mit konstanter Teilchenzahl die Abhängigkeit des chemischen Potentials vom Magnetfeld zu beschreiben, drücken wir es durch die Stärke des Magnetfeldes und die Teilchenzahl aus.

Die verschiedenen Landau-Niveaus werden jeweils bis zum chemischen Potential besetzt, das heißt die Einteilchenenergien im l -ten Landau-Niveau liegen im Intervall

$$\hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2}\right) \leq \epsilon_{lk} \leq \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_{Fl}^2}{2m_e}. \quad (2.32)$$

Insbesondere ist also das chemische Potential des homogenen Elektronengases im Magnetfeld durch

$$\mu = \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_{Fl}^2}{2m_e} = \frac{\hbar\omega_c}{2} + \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} \quad (2.33)$$

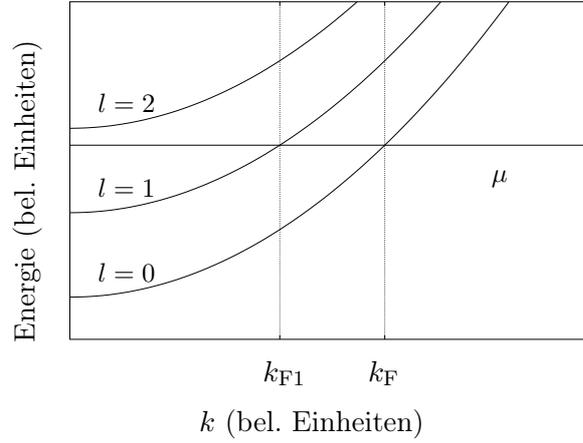


Abbildung 2.1.: Einteilchenenergie in den Landau-Niveaus $l = 0, 1, 2$ als Funktion des Impulses k .

mit $k_F \equiv k_{F0}$ gegeben. Der Fermiimpuls des l -ten Landau-Niveaus k_{Fl} ist also durch

$$k_{Fl} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e \left(\mu - \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2} \right) \right)} \quad (2.34)$$

mit dem chemischen Potential des Systems verknüpft. Diese Beziehung gilt ebenso für den Fermiimpuls des untersten Landau-Niveaus (mit $l = 0$) und damit folgt die Beziehung zwischen k_F und k_{Fl} (vgl. [10]):

$$k_{Fl} = \sqrt{k_F^2 - \frac{2\omega_c m_e}{\hbar} l}. \quad (2.35)$$

Wir können nun den Zusammenhang zwischen der Teilchendichte und dem Fermiimpuls im l -ten Landau-Niveau angeben und damit das chemische Potential durch die gesamte Teilchendichte und das Magnetfeld ausdrücken. Die Anzahl der Teilchen im l -ten Landau-Niveau ist durch

$$N_l = \int_V d^3r \int_{-k_{Fl}}^{+k_{Fl}} dk \nu = \frac{eBV}{2\pi^2 \hbar c} k_{Fl} \quad (2.36)$$

gegeben. Die gesamte Teilchenzahl N ist gleich der Summe der Teilchenzahlen N_l in den besetzten Landau-Niveaus. Damit gilt für die gesamte Teilchendichte der Zusammenhang

$$n = \sum_l n_l = \sum_l \frac{eB}{2\pi^2 \hbar c} k_{Fl} = \sum_l \frac{k_{Fl}}{2\pi^2 \lambda^2}. \quad (2.37)$$

Unter Verwendung der Gleichungen (2.34) und (2.35) kann man damit das chemische Potential durch die Dichte ausdrücken. Das Magnetfeld ist über die magnetische Länge λ enthalten.

2.4. Diskussion der Funktion $\gamma(n, B)$

Entsprechend der Definition in Gleichung (2.24b) teilen wir die Funktion $\gamma(n, B)$ in einen (nicht wechselwirkenden) kinetischen Anteil $\gamma_k(n, B)$ und einen Austausch-Korrelations-Term $\gamma_{xc}(n, B)$ auf, da sich auch $\epsilon = \epsilon_k + \epsilon_{xc}$ aus diesen beiden Teilen zusammensetzt [10]. Mit Hilfe des im vorhergehenden Kapitel gefundenen Zusammenhangs zwischen Fermienergie, Dichte und Magnetfeld in einem System nicht wechselwirkender Elektronen beschreiben wir nun den kinetischen Anteil der Funktion $\gamma(n, B)$. Für ein System mit einem oder zwei besetzten Landau-Niveaus läßt sich $\gamma_k(n, B)$ geschlossen formulieren.

2.4.1. Ein besetztes Landau-Niveau

Ist nur das unterste Landau-Niveau besetzt, so ist der Zusammenhang zwischen gesamter Teilchendichte und Fermiimpuls des untersten Niveaus direkt durch Gleichung (2.37) gegeben. Damit ist das chemische Potential ausgedrückt durch die Dichte und das Magnetfeld

$$\mu = \frac{\hbar\omega_c}{2} + \frac{\hbar^2}{2m_e} 4\pi^4 \lambda^4 n^2. \quad (2.38)$$

Daraus erhalten wir durch Ableitung nach der Stärke des Magnetfeldes $\gamma_k(n, B)$ gemäß Gleichung (2.24b):

$$\gamma_k(n, B) = 1 - 8\pi^4 \lambda^6 n^2. \quad (2.39)$$

2.4.2. Zwei besetzte Landau-Niveaus

Sind die beiden untersten Landau-Niveaus besetzt, so kann man $\gamma_k(n, B)$ ebenfalls geschlossen durch n und B ausdrücken.

Die Dichte des Systems ist nun durch die Summe der Teilchendichten im 0. und 1. Landau-Niveau gegeben und kann durch den Fermiimpuls des untersten Niveaus ausgedrückt werden:

$$n = \frac{1}{2\pi^2 \lambda^2} \left(k_F + \sqrt{k_F^2 - \frac{2m_e \omega_c}{\hbar}} \right). \quad (2.40)$$

Daraus erhalten wir k_F und schließlich μ . Durch Ableitung nach B können wir wiederum $\gamma_k(n, B)$ berechnen und bekommen:

$$\gamma_k(n, B) = 2 - 2\pi^4 \lambda^6 n^2 + \frac{1}{\pi^4 \lambda^6 n^2}. \quad (2.41)$$

2.4.3. Allgemeines Verhalten der Funktion $\gamma_k(n, B)$

Wir erkennen bereits an den beiden oben diskutierten Fällen, dass γ_k positiv ist, wenn das höchste besetzte Landau-Niveau nur schwach besetzt ist. Bei steigender Dichte (oder schwächer werdendem Magnetfeld) sinkt γ_k ab und ändert schließlich das Vorzeichen. Steigt die Dichte weiter an (oder wird das Magnetfeld noch schwächer),

so wird das nächsthöhere Landau-Niveau besetzt und $\gamma_{\mathbf{k}}$ springt auf einen (höheren) positiven Wert. Verantwortlich dafür ist das Verhalten des chemischen Potentials, das sich nach Gleichung (2.33) aus der Oszillatorenergie im l -ten Landau-Niveau und der Energie der Bewegung parallel zum Magnetfeld zusammensetzt.

Wir betrachten nun ein freies Elektronengas konstanter Dichte im Magnetfeld variabler Stärke. Dabei soll die Zahl der besetzten Landau-Niveaus konstant bleiben. Wenn wir die Stärke des Magnetfeldes verändern treten zwei konkurrierende Effekte auf. Zum einen ändert sich die Oszillatorenergie eines Teilchens, sie wächst mit ansteigendem Magnetfeld proportional zu dessen Stärke. Zum anderen steigt die Entartung eines Zustandes, das heißt die Anzahl der Zustände im Ortsraumvolumen V und Impulsintervall dk , mit wachsender Stärke des Magnetfeldes. Damit sinkt die mittlere kinetische Energie der Bewegung parallel zum Magnetfeld proportional zu B^{-2} . Welcher der beiden Effekte überwiegt, hängt von der Stärke des Magnetfeldes ab. Offenbar dominiert für große Feldstärken der erste Effekt und $\gamma_{\mathbf{k}}$ ist positiv, für kleine Feldstärken überwiegt die Absenkung der mittleren kinetischen Energie und $\gamma_{\mathbf{k}}$ wird negativ.

2.5. Magnetisierung des homogenen Elektronengases

Wir können den in Abschnitt 2.2 diskutierten Zusammenhang zwischen Strom und Dichte verwenden, um die Magnetisierung eines homogenen Elektronengases endlicher Ausdehnung zu berechnen. Die so gewonnene Magnetisierung pro Teilchen vergleichen wir dann mit dem Resultat der thermodynamischen Berechnung. In beiden Fällen betrachten wir nur den Fall, dass für gegebene Dichte das Magnetfeld so stark ist, dass nur das unterste Landau-Niveau besetzt wird.

2.5.1. Allgemeiner Zusammenhang zwischen Magnetisierung und Dichte

Wir suchen zunächst einen allgemeinen Zusammenhang zwischen der Magnetisierung und der Dichte für ein System, bei dem sich alle Teilchen im untersten Landau-Niveau befinden. Dazu gehen wir von Gleichung (2.24a) aus, die uns den Zusammenhang zwischen Strom und Dichte angibt. Wir erhalten also für die Magnetisierung \mathbf{M} am Ort \mathbf{r}

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = -\frac{e}{2c} \mathbf{r} \times \left(\frac{\hbar}{2m_e} \gamma(n, B) \nabla n(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{z}} \right). \quad (2.42)$$

Unter Verwendung der Rechenregeln für das doppelte Vektorprodukt können wir diesen Ausdruck umformulieren:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = -\frac{e\hbar}{4m_e c} \gamma(n, B) [\nabla n(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{z}}) - \hat{\mathbf{z}} (\mathbf{r} \cdot \nabla n(\mathbf{r}))]. \quad (2.43)$$

Daraus erhalten wir für die Komponente der Magnetisierung entlang des (äußeren) Magnetfeldes (in kartesischen Koordinaten)

$$M_z(\mathbf{r}) = -\frac{e\hbar}{4m_e c} \gamma(n, B) \left(-x \frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial x} - y \frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial y} \right). \quad (2.44)$$

Die gesamte Magnetisierung lässt sich daraus durch Integration über das vom System eingenommene Volumen gewinnen. Für das nicht wechselwirkende System ist $\gamma(n, B)$ durch $\gamma_k(n, B)$ gegeben, das sich für ein auf das unterste Landau-Niveau beschränkte System gemäß Gleichung (2.39) durch die Dichte und das Magnetfeld ausdrücken lässt. Damit erhalten wir für die gesamte Magnetisierung entlang des Magnetfeldes

$$M_z = \int d^3r M_z(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar e}{4m_e c} \int d^3r (1 - 8\pi^4 \lambda^6 n^2(\mathbf{r})) \left(-x \frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial x} - y \frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial y} \right). \quad (2.45)$$

Durch partielle Integration erhalten wir schließlich die Magnetisierung als Funktional der Dichte

$$M_z = -\mu_B N + \frac{8\pi^4 \lambda^6}{3} \mu_B \int d^3r n^3(\mathbf{r}) \quad (2.46)$$

mit dem Bohrschen Magneton $\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_e c}$.

2.5.2. Stromdichte und Magnetisierung des homogenen beschränkten Elektronengases

Die Magnetisierung eines homogenen Elektronengases wird meist durch Ableitung eines thermodynamischen Potentials nach dem Magnetfeld berechnet [12]. Wir können in einem endlichen homogenen System (das wir durch eine würfelförmige Dichteverteilung mit Kantenlänge $2a$ darstellen) aber auch direkt die Stromverteilung mit Hilfe von Gleichung (2.24a) aus der Dichte bestimmen. Damit können wir die Magnetisierung als das magnetische Moment beschreiben, das von den Strömen erzeugt wird, die im System fließen.

Wir können eine solche Dichteverteilung durch ein Produkt von Fermi-Funktionen modellieren:

$$n(x, y, z) = \frac{n_0}{\left(\exp\left(\frac{|x|-a}{b}\right) + 1 \right) \left(\exp\left(\frac{|y|-a}{b}\right) + 1 \right) \left(\exp\left(\frac{|z|-a}{b}\right) + 1 \right)}. \quad (2.47)$$

Dabei ist n_0 die Dichte im Inneren, a ist die halbe Kantenlänge der würfelförmigen Dichteverteilung und b die Längenskala der Dichteänderung. Im Grenzfall $b \rightarrow 0$ geht diese Dichteverteilung in ein Produkt von Heaviside-Stufenfunktionen über:

$$n(x, y, z) = n_0 \Theta(a - |x|) \Theta(a - |y|) \Theta(a - |z|). \quad (2.48)$$

Wir beschränken uns im Folgenden auf $x, y, z \geq 0$, betrachten also nur ein Achtel des

Systems. Die Stromverteilung ist dann nach Gleichung (2.24a) und unter Verwendung des Ausdrucks (2.39) für $\gamma_{\mathbf{k}}$ durch

$$\mathbf{j}(x, y, z) = -\frac{\hbar}{2m_e} \left(n(x, y, z) - 8\pi^4 \lambda^6 n^3(x, y, z) \right) \frac{1}{b} \begin{pmatrix} (1 + \exp(-\frac{y-a}{b}))^{-1} \\ -(1 + \exp(-\frac{x-a}{b}))^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

gegeben. Sie geht im Grenzfall $b \rightarrow 0$ in ein δ -förmige Verteilung über. Im homogenen Inneren der Dichteverteilung werden keine Ströme fließen. Die gesamte Magnetisierung des Systems wird durch den starken Strom an seinem Rand verursacht.

Wir verwenden die Darstellung von Strom und Dichte durch glatte Funktionen aus den Gleichungen (2.47) und (2.49) und berechnen die Magnetisierung des Systems nach Gleichung (2.45). Nach der Integration erhalten wir im Grenzfall $b \rightarrow 0$

$$M_z = -\frac{\hbar e}{2m_e c} \left[n_0 a^3 - \frac{8}{3} \pi^4 \lambda^6 n_0^3 a^3 \right]. \quad (2.50)$$

Damit erhalten wir die Magnetisierung pro Teilchen μ_M :

$$\mu_M = -\mu_B \left(1 - \frac{8}{3} \pi^4 \lambda^6 n_0^2 \right). \quad (2.51)$$

Wenn wir die Dichte n durch die Fermienergie ϵ_F des nicht wechselwirkenden dreidimensionalen Elektronengases ohne Magnetfeld ausdrücken, erhalten wir

$$\mu_M = -\mu_B \left(1 - \frac{16}{27} \left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_c} \right)^3 \right) \quad (2.52)$$

mit der Zyklotronenergie $\epsilon_c = \hbar\omega_c = 2\mu_B B$. Wir bekommen dieses Ergebnis ebenso nur aus der Dichteverteilung mit Hilfe von Gleichung (2.46)

2.5.3. Thermodynamische Berechnung der Magnetisierung

Wir wollen die oben berechnete Magnetisierung mit dem Resultat einer thermodynamischen Berechnung vergleichen. Da wir ein System mit konstanter Teilchenzahl (also variablem chemischen Potential) betrachten, ist die Magnetisierung durch die Ableitung der freien Energie F nach der Stärke des Magnetfeldes B gegeben [12]:

$$M_z = - \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_N. \quad (2.53)$$

Wir betrachten das System bei Temperatur $T = 0$. Dann ist die freie Energie $F = U - TS$ (S ist die Entropie) gleich der inneren Energie U [12] und wir können schreiben:

$$\begin{aligned} F &= \int d^3r \int dk \nu \epsilon(k) \\ &= \int_V d^3r \int_{-k_F}^{+k_F} dk \frac{eB}{4\pi^2 \hbar c} \left(\frac{\hbar\omega_c}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right) \\ &= \frac{eBV}{4\pi^2 \hbar c} \left(\hbar\omega_c k_F + \frac{\hbar^2}{3m_e} k_F^3 \right). \end{aligned} \quad (2.54)$$

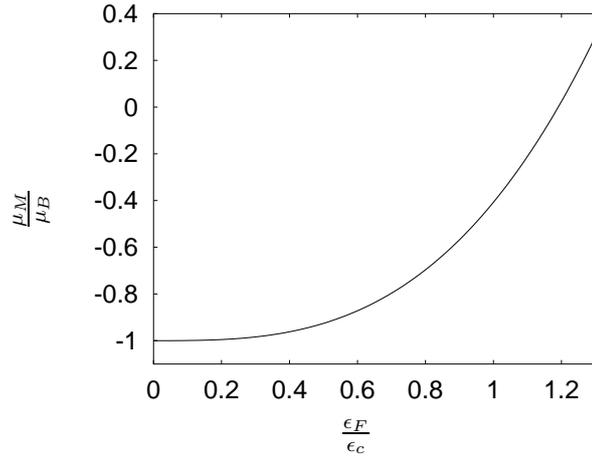


Abbildung 2.2.: Magnetisierung des homogenen Elektronengases pro Teilchen als Funktion des Verhältnisses der Fermienergie des dreidimensionalen Elektronengases ohne Magnetfeld zur Zyklotronenergie. Bei konstanter Dichte ist dieses Verhältnis umgekehrt proportional zur magnetischen Feldstärke B .

Der Zusammenhang zwischen Fermiimpuls und Dichte ist in Gleichung (2.37) angegeben. Damit können wir die freie Energie durch die Dichte und die Stärke des Magnetfeldes ausdrücken:

$$F = \frac{\hbar\omega_c}{2}nV + \frac{1}{24m_e} \frac{(2\pi\hbar)^4 c^2}{e^2 B^2} n^3 V. \quad (2.55)$$

Durch Ableiten nach B und Division durch die Teilchenzahl $N = nV$ erhalten wir damit die Magnetisierung pro Teilchen:

$$\mu_M = -\mu_B \left(1 - \frac{8}{3} \pi^4 \lambda^6 n^2 \right). \quad (2.56)$$

Wir können die Dichte n wie im vorhergehenden Abschnitt durch die Fermienergie des dreidimensionalen Elektronengases ohne Magnetfeld ausdrücken und erhalten

$$\mu_M = -\mu_B \left(1 - \frac{16}{27} \left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_c} \right)^3 \right). \quad (2.57)$$

Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Er stimmt mit dem Ergebnis überein, das wir aus der Berechnung der Magnetisierung durch die Stromdichte erhalten haben.

Wir haben bisher den Spin der Elektronen nicht berücksichtigt. Sein Beitrag zur Energie eines Elektrons im homogenen Magnetfeld ist durch

$$\epsilon_S = \mp \frac{\hbar\omega_c}{2} \quad (2.58)$$

gegeben. Dabei ist das Vorzeichen negativ, wenn der Spin parallel zum Magnetfeld ausgerichtet ist, bei antiparalleler Ausrichtung ist es positiv. Das heißt, wir erhalten für die Gesamtenergie eines Elektrons im l -ten Landau-Niveau mit Impuls k

$$\epsilon_{l,k} = \left(l + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \mp \frac{\hbar\omega_c}{2}. \quad (2.59)$$

Daraus erkennen wir, dass die Energie eines Elektrons im $l+1$ -ten Landau-Niveau mit Impuls k und parallel zum Magnetfeld ausgerichtetem Spin gleich der Energie eines Elektrons im l -ten Landau-Niveau mit Impuls k und antiparallel zum Magnetfeld ausgerichtetem Spin ist.

Wir wollen wieder nur den Fall eines sehr starken Magnetfeldes betrachten, so dass sich alle Elektronen im untersten Landau-Niveau befinden, diesmal aber den Spin der Elektronen berücksichtigen. Wir haben oben gesehen, dass dann die Spins aller Elektronen parallel zum Magnetfeld ausgerichtet sind. Insbesondere bleibt daher die Zustandsdichte unverändert gleich der Zustandsdichte, die wir ohne Berücksichtigung des Elektronenspins erhalten haben, da ja den Teilchen der Spinfreiheitsgrad nicht zur Verfügung steht. Wir erhalten dann für die Energie eines Elektrons mit Impuls k

$$\epsilon_{l=0,k}^S = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \epsilon_{l=0,k} + \epsilon_{S,\text{parallel}} = \epsilon_{l=0,k} - \frac{\hbar\omega_c}{2}. \quad (2.60)$$

Dabei ist $\epsilon_{l=0,k}$ die Energie eines Elektrons im untersten Landau-Niveau mit Impuls k ohne den Spin-Anteil und $\epsilon_{S,\text{parallel}}$ ist der Spin-Anteil der Energie für parallel zum Magnetfeld ausgerichteten Spin.

Wenn wir, ausgehend von diesem Ausdruck für die Einteilchenenergien, wiederum die Magnetisierung pro Teilchen berechnen, so erhalten wir aufgrund des Spin-Anteils der Einteilchenenergien einen zusätzlichen Beitrag $+\mu_B$ und damit insgesamt

$$\mu_M = \frac{16}{27} \left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_c} \right)^3 \mu_B. \quad (2.61)$$

Dabei ist wiederum ϵ_F die Fermienergie des spinpolarisierten Elektronengases ohne Magnetfeld und ϵ_c ist die Zyklotronenergie.

2.5.4. Diskussion

Wir haben in diesem Abschnitt gesehen, dass die orbitale Magnetisierung \mathbf{M} des homogenen, endlichen Elektronengases von den Strömen erzeugt wird, die in diesem System fließen. Das heißt, die orbitale Magnetisierung ist das magnetische Feld, das von der Stromdichte \mathbf{j} induziert wird. Dabei ist der Zusammenhang zwischen Magnetisierung und Stromdichte durch

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{c}{e} \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (2.62)$$

gegeben. Wir haben daraus für die Magnetisierung

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = -\frac{e}{2c} \mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (2.63)$$

erhalten. Die gesamte orbitale Magnetisierung ergibt sich dann durch Integration dieses Ausdrucks über das gesamte vom System eingenommene Volumen. Die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ stellt dabei den widerstandsfreien, persistenten Strom dar. Wir können im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie diese Stromdichte mit Hilfe des universellen Strom-Dichte-Zusammenhanges (2.24a) allein aus der Dichteverteilung des Systems bestimmen. Damit war es uns möglich, die Magnetisierung als ein explizites Funktional der Dichte anzugeben. Dem so erhaltenen Zusammenhang zwischen Magnetisierung und Dichte liegt also zugrunde, dass die Magnetisierung des Systems das Magnetfeld ist, das von den Strömen die im System fließen induziert wird .

Andererseits ist die gesamte Magnetisierung gleich der negativen Ableitung der freien Energie des Systems nach der Stärke des äußeren Magnetfeldes bei festgehaltener Dichte:

$$\mathbf{M} = - \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_n . \quad (2.64)$$

Die Magnetisierung drückt also aus, wie sich die freie Energie in Abhängigkeit eines externen Magnetfeldes verhält. Mit Hilfe dieses Ausdrucks können wir verstehen, warum sich die Magnetisierung eines homogenen, auf das unterste Landau-Niveau beschränkten Elektronengases (ohne Berücksichtigung des Elektronenspins) aus zwei Teilen zusammensetzt. Der diamagnetische Anteil ($-\mu_B$) wird durch die Erhöhung der Zyklotronenergie mit wachsendem Magnetfeld bewirkt. Insbesondere ist er von der Stärke des Magnetfeldes unabhängig, da die Zyklotronenergie proportional zur Stärke des äußeren Magnetfeldes ist. Ursache für den paramagnetischen Anteil ist die wachsende Entartung (2.31) mit stärker werdendem Magnetfeld, da dadurch der Fermiimpuls k_F sinkt, also auch der Anteil der mittleren Energie pro Teilchen, der dem Zustand parallel zum Magnetfeld entspricht.

Ob sich das Elektronengas insgesamt diamagnetisch oder paramagnetisch verhält, das heißt, ob die gesamte Magnetisierung negativ oder positiv ist, hängt davon ab, welcher der beiden Effekte überwiegt. Für starkes Magnetfeld überwiegt das Ansteigen der Zyklotronenergie mit stärker werdendem Magnetfeld und die Magnetisierung ist insgesamt negativ. Im Grenzfall $B \rightarrow \infty$ strebt sie gegen $-\mu_B$. Für schwächeres Magnetfeld überwiegt dagegen das Ansteigen der Entartung mit stärker werdendem Magnetfeld und die mittlere Energie pro Teilchen sinkt proportional zu B^{-2} . Damit wird die Magnetisierung positiv. Der minimale Wert, den die Stärke des Magnetfeldes annehmen darf, ist durch die Bedingung gegeben, dass bei gegebener Dichte nur das unterste Landau-Niveau besetzt sein soll. Für das Verhältnis von Fermienergie ϵ_F und Zyklotronenergie ϵ_c heißt das

$$\left(\frac{\epsilon_F}{\epsilon_c} \right)^3 \leq \frac{9}{4} . \quad (2.65)$$

Für den so gegebenen Wert der Stärke des Magnetfeldes nimmt die Magnetisierung den Wert $\frac{1}{3}\mu_B$ an.

Wenn wir zudem den Spin der Elektronen berücksichtigen, so ist die Magnetisierung pro Teilchen durch Gleichung (2.61) gegeben. Das heißt, der Wert der Magnetisierung

liegt verglichen mit dem für spinlose Elektronen immer um μ_B höher. Im Grenzfall $B \rightarrow \infty$ (das entspricht dem Fall $\frac{\epsilon_F}{\epsilon_c} \rightarrow 0$) geht die Magnetisierung pro Teilchen gegen Null. Für den kleinsten erlaubten Wert der magnetischen Feldstärke finden wir, dass die Magnetisierung pro Teilchen $\frac{4}{3}\mu_B$ beträgt.

Insgesamt erkennen wir durch Vergleich der Ergebnisse (2.52) und (2.57), dass sich die Magnetisierung des endlichen homogenen (nicht wechselwirkenden) Elektronengases (in dem alle Teilchen auf das unterste Landau-Niveau beschränkt sind) mit Hilfe der Thomas-Fermi-artigen Näherung, die wir in Abschnitt 2.2 diskutiert haben, exakt beschreiben lässt.

3. Magnetisierung und persistenter Strom in harmonisch begrenzten Systemen

Wir untersuchen in diesem Kapitel, ob sich die mit Hilfe der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie gefundenen Zusammenhänge auf ein einfaches inhomogenes System anwenden lassen. Dabei müssen wir den Geltungsbereich der lokalen Näherung beachten, die wir benötigt haben, um den universellen Zusammenhang (2.24a) zwischen Strom und Dichte zu bekommen. Diese Näherung ist dann gerechtfertigt, wenn die magnetische Länge λ sehr viel kleiner ist als die typische Längenskala des Systems ohne äußeres Magnetfeld. Als einfaches Modellsystem betrachten wir N nicht wechselwirkende Elektronen ohne Spin in einem dreidimensionalen harmonischen Oszillator-Potential. Wir werden finden, dass wir die Forderung, die wir für die magnetische Länge formuliert haben, auch durch die Zyklotronfrequenz und die Oszillatorfrequenz des einschließenden Potentials ausdrücken können und erhalten damit eine Bedingung für die Stärke des externen Magnetfeldes in Abhängigkeit von der Stärke des einschließenden Potentials.

Im Folgenden bestimmen wir aus den exakt bekannten Einteilchenzuständen und -energien nicht-wechselwirkender Teilchen im dreidimensionalen harmonischen Oszillator-Potential und im homogenen Magnetfeld die Strom- und Dichteverteilung sowie die Magnetisierung des Systems als Funktion des externen Magnetfeldes. Aus der Dichteverteilung können wir im Rahmen der Stromdichtefunktionaltheorie die Stromverteilung und Magnetisierung bestimmen und die so erhaltenen Werte mit den exakten Größen vergleichen. Unser Ziel ist dabei zu verstehen, ob und in welchen Bereichen die Thomas-Fermi-artige Näherung aus Abschnitt 2.2 die Verteilung der Stromdichte sowie die Magnetisierung eines inhomogenen, in allen drei Raumrichtungen beschränkten Systems beschreiben kann. Wir werden die Abweichungen der durch diese Näherung erhaltenen Größen von den exakten Ergebnissen mit Hilfe der Unterschiede zwischen einem zweidimensionalen und einem dreidimensionalen Elektronengas im homogenen Magnetfeld erklären.

3.1. Einteilchenzustände und -energien

Ein einfaches Modellpotential, für das sich in beliebig starken Magnetfeldern die Einteilchenwellenfunktionen und -energien exakt bestimmen lassen, ist der dreidimensionale harmonische Oszillator. Ein ähnliches Modell in zwei Dimensionen findet zum Beispiel bei der Beschreibung von Quantenpunkten Anwendung [3]. Wir charakteri-

sieren ein solches Potential durch die Oszillatorfrequenzen ω_ρ und ω_z senkrecht beziehungsweise parallel zum Magnetfeld.

$$V = \frac{1}{2}m_e (\omega_\rho^2 \rho^2 + \omega_z^2 z^2). \quad (3.1)$$

Dabei haben wir Zylinderkoordinaten gewählt und die z -Achse zeigt in Richtung des äußeren Magnetfeldes.

Den kinetischen Anteil des Hamilton-Operators kennen wir bereits aus den Gleichungen (2.25) und (2.28) und wir erhalten

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - i\hbar\frac{eB}{2m_e c}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e^2 B^2}{8m_e c^2}\rho^2 + \frac{1}{2}m_e (\omega_\rho^2 \rho^2 + \omega_z^2 z^2). \quad (3.2)$$

Wir erkennen, dass die Teilchen senkrecht zum Magnetfeld einem effektiven Potential mit der Oszillatorfrequenz

$$\Omega_\rho = \sqrt{\omega_\rho^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2} \quad (3.3)$$

ausgesetzt sind. Damit erhalten wir schließlich für den Hamiltonoperator eines im Potential (3.1) eingeschlossenen Elektrons im homogenen Magnetfeld der Stärke B

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m_e}\left(\hbar^2\nabla^2 + i\hbar\frac{eB}{c}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{1}{2}m_e (\Omega_\rho^2 \rho^2 + \omega_z^2 z^2). \quad (3.4)$$

Die Eigenfunktionen dieses Hamiltonoperators setzen sich aus den Landaufunktionen und den Wellenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators parallel zum Magnetfeld zusammen. Wir beschränken uns auf das unterste Oszillator-Niveau senkrecht zum Magnetfeld und können damit jeden Zustand durch zwei Quantenzahlen charakterisieren: zum einen durch die Komponente des Drehimpulses entlang der z -Achse m , zum anderen durch das Oszillator-Niveau parallel zum Magnetfeld k . Damit erhalten wir für die Wellenfunktion im Zustand $|m, k\rangle$ in der Ortsdarstellung

$$\psi_{m,k}(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi^3}\rho_0^2 z_0 |m|! k! 2^k}} \left(\frac{\rho}{\sqrt{2}\rho_0}\right)^{|m|} \mathrm{H}_k\left(\frac{\sqrt{2}z}{z_0}\right) \exp\left(-\frac{\rho^2}{4\rho_0^2}\right) \exp(im\varphi) \exp\left(-\frac{z^2}{z_0^2}\right). \quad (3.5)$$

Dabei ist H_k ein Hermite-Polynom vom Grad k und ρ_0 sowie z_0 sind die charakteristischen Längenskalen des (effektiven) Potentials

$$\rho_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_e\Omega_\rho}} \quad (3.6a)$$

$$z_0 = \sqrt{\frac{2\hbar}{m_e\omega_z}}. \quad (3.6b)$$

Wir betrachten im Folgenden ausschließlich Zustände mit $m \geq 0$, da solche mit $m < 0$ energetisch höher liegen als die Kante zwischen dem nullten und dem ersten Oszillator-Niveau senkrecht zum Magnetfeld. Die Energie eines Teilchens im Zustand $|m, k\rangle$ ist durch

$$\epsilon_{m,k} = \frac{\hbar}{2} \left(m(2\Omega_\rho - \omega_c) + 2\Omega_\rho + \omega_z(2k+1) \right) \quad (3.7)$$

gegeben. Wir bemerken, dass die Entartung der Landau-Niveaus bezüglich des Drehimpulses aufgehoben ist. Der Grund dafür ist die Anwesenheit des äußeren Oszillatorpotentials, durch das die Translationsinvarianz gegenüber dem freien Elektronengas im Magnetfeld gebrochen wird.

Wenn, wie in unserem Fall, das Magnetfeld so stark ist, dass die magnetische Länge λ sehr viel kleiner als die charakteristische Länge des äußeren Potentials $\sqrt{\frac{2\hbar}{m_e\omega_\rho}}$ ist, so gilt auch für die Zyklotronfrequenz $\omega_c \gg \omega_\rho$ und wir können die Frequenz Ω_ρ um $\omega_\rho = 0$ entwickeln:

$$\Omega_\rho \approx \frac{1}{2}\omega_c + \frac{\omega_\rho^2}{\omega_c}. \quad (3.8)$$

Wir erhalten damit für die Einteilchenenergien

$$\begin{aligned} \epsilon_{m,k} &\approx \frac{\hbar}{2} \left(2\frac{\omega_\rho^2}{\omega_c} + \omega_c + \omega_z \right) + \hbar \left(m\frac{\omega_\rho^2}{\omega_c} + k\omega_z \right) \\ &=: \epsilon_0 + \epsilon'_{m,k}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Die Energie jedes Teilchens enthält also eine von seinem Zustand unabhängige Nullpunktsenergie ϵ_0 und eine vom Zustand abhängige Energie $\epsilon'_{m,k}$. Im Grenzfall eines unendlich starken Magnetfeldes ($\omega_c \rightarrow \infty$) wird die Energie des Teilchens unabhängig von m und ω_ρ , das heißt, das Teilchen verhält sich bezogen auf die Ebene senkrecht zum Magnetfeld wie ein freies Teilchen im Magnetfeld.

3.2. Dichte und Stromdichte der Einteilchenzustände

Um die gesamte Dichte und Stromdichte berechnen zu können, benötigen wir den Beitrag des Zustandes $|m, k\rangle$ dazu. Die Dichteverteilung in diesem Einteilchenzustand ist dabei durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion (3.5) gegeben:

$$\begin{aligned} n_{m,k}(\rho, z) &= |\psi_{m,k}(\rho, \varphi, z)|^2 = \psi_{m,k}^*(\rho, \varphi, z)\psi_{m,k}(\rho, \varphi, z) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}\rho_0^2 z_0} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^m \left[H_k \left(\frac{\sqrt{2}z}{z_0} \right) \right]^2 \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\rho_0^2}\right) \exp\left(-\frac{2z^2}{z_0^2}\right). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Die Dichte ist bezüglich des Abstandes von der z -Achse um $\rho_m = \sqrt{2m+1}\rho_0$ zentriert [6] und die Ausdehnung der Dichteverteilung um ρ_m ist von der Größenordnung ρ_0 [6]. Sie ist in der (ρ, φ) -Ebene in Abbildung 3.1 für den Einteilchenzustand $|m=10, k=0\rangle$ skizziert. Parallel zum Magnetfeld ist Ausdehnung der Dichteverteilung durch z_0 charakterisiert, hängt aber noch von der Quantenzahl k ab. Für $k=0$

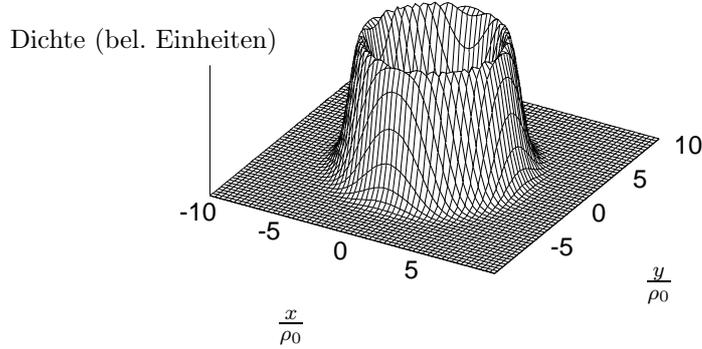


Abbildung 3.1.: Dichteverteilung (in beliebigen Einheiten) im Zustand $|k = 0, m = 10\rangle$ in der Ebene $z = 0$

erhalten wir eine einfache Gauß-Verteilung, für $k \neq 0$ ist diese Verteilung durch das Quadrat des Hermite-Polynoms moduliert und weist k Minima und $k + 1$ Maxima auf. Für drei Werte von k ist die Dichteverteilung entlang der z -Achse in Abbildung 3.2 gezeigt.

Die Verteilung der Stromdichte im Zustand $|m, k\rangle$ erhalten wir ebenso direkt aus der Wellenfunktion (3.5). Ihr paramagnetischer Anteil ist für $m \neq 0$ gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{p_{m,k}}(\rho, \varphi, z) &= -\frac{i\hbar}{2m_e} (\psi_{m,k}^* \nabla \psi_{m,k} - \psi_{m,k} \nabla \psi_{m,k}^*) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m_e \rho} \left(\psi_{m,k}^* \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{m,k} - \psi_{m,k} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{m,k}^* \right) \mathbf{e}_\varphi \\ &= \frac{\hbar}{2m_e} \frac{\rho}{\rho_0^2} n_{m-1,k}(\rho, z) \mathbf{e}_\varphi. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Ein Zustand mit $m = 0$ trägt nicht zur paramagnetischen Stromdichte bei: $\mathbf{j}_{p_{m=0,k}} = \mathbf{0}$. Die physikalische Stromdichte setzt sich aus diesem paramagnetischen Anteil und dem diamagnetischen Anteil

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{d_{m,k}}(\rho, \varphi, z) &= -\frac{e}{m_e c} n_{m,k}(\rho, z) \mathbf{A}(\rho, \varphi) \\ &= -\frac{\hbar}{2m_e} \frac{\rho}{\lambda^2} n_{m,k}(\rho, z) \mathbf{e}_\varphi \end{aligned} \quad (3.12)$$

zusammen. Wir erhalten

$$\mathbf{j}_{m,k}(\rho, \varphi, z) = \frac{\hbar}{2m_e} \left(\frac{\rho}{\rho_0^2} n_{m-1,k}(\rho, z) (1 - \delta_{m,0}) - \frac{\rho}{\lambda^2} n_{m,k}(\rho, z) \right) \mathbf{e}_\varphi. \quad (3.13)$$

Dabei ist das Kronecker-Symbol $\delta_{m,0}$ nur für $m = 0$ eins, ansonsten null. Dieser Term drückt aus, dass die Stromdichte für einen Zustand mit $m = 0$ nur den diamagnetischen Anteil enthält.

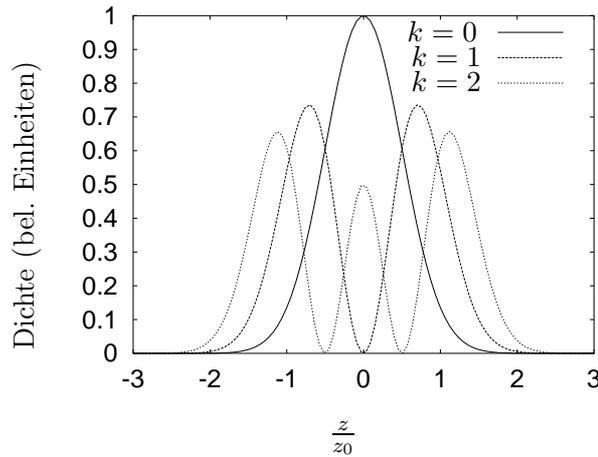


Abbildung 3.2.: Dichteverteilung in den Zuständen $|m, k \in \{0, 1, 2\}\rangle$ parallel zum Magnetfeld bei $\rho = \text{const.} \neq 0$. Die Dichte ist bezüglich $n_{m,k=0}(\rho, z=0) = 1$ normiert.

Wenn wir annehmen, dass wiederum $\omega_c \gg \omega_\rho$ gilt, können wir mit Hilfe der Näherung (3.8) für Ω_ρ einen Zusammenhang zwischen der magnetischen Länge λ und der charakteristischen Länge des effektiven Potentials ρ_0 finden

$$\rho_0 \approx \frac{\lambda}{\sqrt{1 + 2 \left(\frac{\omega_\rho}{\omega_c}\right)^2}} \quad (3.14)$$

und erhalten für die Stromdichte

$$\mathbf{j}_{m,k}(\rho, \varphi, z) \approx \frac{\hbar}{2m_e} \frac{\rho}{\rho_0^2} \left(n_{m-1,k}(\rho, z)(1 - \delta_{m,0}) - \frac{1}{1 + 2 \left(\frac{\omega_\rho}{\omega_c}\right)^2} n_{m,k}(\rho, z) \right) \mathbf{e}_\varphi. \quad (3.15)$$

Diese Stromdichte ist in Abbildung 3.3 für den Zustand $|m = 10, k = 0\rangle$ als Funktion von ρ bei $z = 0$ skizziert. Als Funktion von z nimmt lediglich die Stärke des Stromes verglichen mit ihrem Wert bei $z = 0$ ab, da Dichte des Systems zum Rand hin abnimmt. Für $k \neq 0$ und beliebiges z ändert sich die Stromdichte als Funktion des Abstandes von der z -Achse nicht qualitativ, lediglich die Stärke des Stromes variiert. Allerdings gibt es für $k \neq 0$ Knoten in der Dichteverteilung entlang des Magnetfeldes. Für diese Werte von z verschwindet die Stromdichte für alle Werte von ρ .

3.3. Grundzustand des nicht wechselwirkenden Vielteilchensystems

Wir wollen in diesem Abschnitt den Grundzustand eines Systems von nicht wechselwirkenden Teilchen im dreidimensionalen harmonischen Oszillator im homogenen

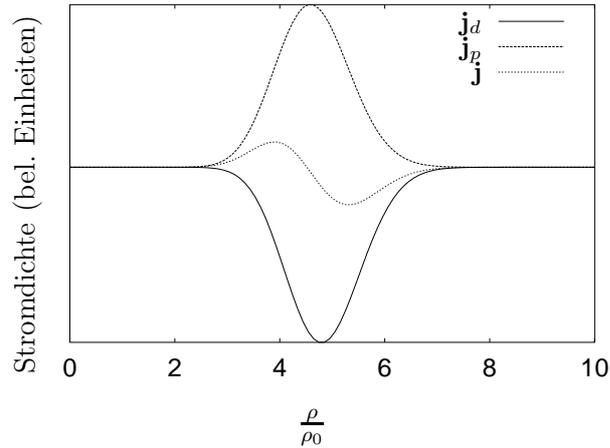


Abbildung 3.3.: Stromdichteverteilung (in beliebigen Einheiten) im Zustand $|m = 10, k = 0\rangle$ als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse ($\omega_\rho/\omega_c = 1/10$).

Magnetfeld beschreiben. Dazu diskutieren wir zunächst die Struktur des Grundzustandes, das heißt die Besetzung der Einteilchenzustände für konstante Teilchenzahl in Abhängigkeit von der Stärke des Magnetfeldes. Wir können schließlich die Dichte- und Stromdichteverteilung bestimmen sowie die innere Energie und das Verhalten der Fermikante als Funktionen der magnetischen Feldstärke beschreiben. Dabei beschränken wir uns auf Magnetfelder, die so stark sind, dass parallel zum Magnetfeld nur ein, zwei oder drei Oszillatorniveaus besetzt sind.

3.3.1. Struktur des Grundzustandes

Wir bestimmen zunächst, welche Zustände bei konstanter Teilchenzahl und gegebener Magnetfeldstärke besetzt sind. Dazu definieren wir eine für das einschließende Potential charakteristische magnetische Feldstärke

$$B_\star = \frac{m_e c \omega_\rho^2}{e \omega_z}. \quad (3.16)$$

Nun können wir die Stärke des externen Magnetfeldes in Einheiten von B_\star ausdrücken und definieren

$$\beta = \frac{B}{B_\star}. \quad (3.17)$$

Ein sehr starkes Magnetfeld bedeutet dann $\beta \gg 1$. Mit Hilfe des so definierten effektiven Magnetfeldes schreiben wir den konfigurationsabhängigen Teil der Einteilchenenergien (3.9)

$$\epsilon'_{m,k} = \hbar \omega_z \left(\frac{m}{\beta} + k \right). \quad (3.18)$$

Die Nullpunktenergie ϵ_0 ist für alle Teilchen gleich, und wir brauchen sie bei der Konstruktion des Grundzustandes nicht zu beachten. Bei der Abhängigkeit der Grundzustandsenergie vom Magnetfeld und insbesondere bei der Beschreibung der Magnetisierung spielt sie jedoch eine wichtige Rolle.

In einem im obigen Sinn starken Magnetfeld werden zunächst mehrere Drehimpulszustände m besetzt, bevor ein weiteres Oszillatorniveau k parallel zum Magnetfeld besetzt wird. Das erkennen wir aus dem Vergleich der Abstände zwischen zwei Energieniveaus $\Delta\epsilon_m \equiv \epsilon_{m+1,k} - \epsilon_{m,k}$ und $\Delta\epsilon_k \equiv \epsilon_{m,k+1} - \epsilon_{m,k}$. Denn es gilt

$$\Delta\epsilon_m = \hbar \frac{\omega_z}{\beta} \ll \hbar\omega_z = \Delta\epsilon_k. \quad (3.19)$$

Wir sehen also, dass in jedem Oszillatorniveau k zunächst die Drehimpulszustände $m = 0 \dots m_{\max}$ bis zu einem gewissen Maximalwert m_{\max} besetzt werden, bevor auch Zustände im nächsthöheren Niveau $k + 1$ besetzt werden. Dabei ist m_{\max} durch die Bedingungen

$$\epsilon_{m_{\max},k} \leq \epsilon_{0,k+1} \quad \text{und} \quad (3.20)$$

$$\epsilon_{m_{\max}+1,k} > \epsilon_{0,k+1} \quad (3.21)$$

gegeben. Wir finden mit Hilfe der Einteilchenenergien, dass m_{\max} der ganzzahlige Anteil des effektiven Magnetfeldes β ist

$$m_{\max} = \lfloor \beta \rfloor. \quad (3.22)$$

Der Wert der Floor-Funktion $\lfloor \cdot \rfloor$ ist der ganzzahlige Anteil ihres Arguments.

Dieses eben diskutierte Einteilchenspektrum ist für $\beta = 10,45$, also $m_{\max} = 10$ in Abbildung 3.4 skizziert. Dort ist der konfigurationsabhängige Anteil der Energie für verschiedene Werte von k gegen den Drehimpuls m aufgetragen. Wir erkennen deutlich, dass in jedem Oszillatorniveau k die Energien der Drehimpulszustände $m \leq m_{\max}$ unter der Energie des am tiefsten liegenden Zustandes im nächsthöheren Niveau $k + 1$ liegen. Damit können wir schon bestimmen, ab welcher Stärke des Magnetfeldes sich alle N Teilchen im untersten Oszillatorniveau parallel zum Magnetfeld befinden. In diesem Fall müssen mindestens N Zustände mit Drehimpulsen $m \leq m_{\max}$ zur Verfügung stehen. Also ist das effektive Magnetfeld durch die Bedingung

$$\beta \geq N - 1 \quad (3.23)$$

nach unten beschränkt. Die Teilchen besetzen dann die Zustände $|m = 0, k = 0\rangle$ bis $|m = N - 1, k = 0\rangle$.

Ist das Magnetfeld schwächer als dieser Wert, so werden auch Zustände mit $k = 1$ besetzt. Dabei werden nacheinander die Zustände $|m = M, k = 1\rangle$, $|m = m_{\max} + M, k = 0\rangle$, $|m = M + 1, k = 1\rangle$ und so weiter besetzt, bis insgesamt N Zustände besetzt sind, denn für die Energien dieser Zustände gilt

$$\epsilon_{M,k=1} \leq \epsilon_{m_{\max}+M,k=0} < \epsilon_{M+1,k=1}. \quad (3.24)$$

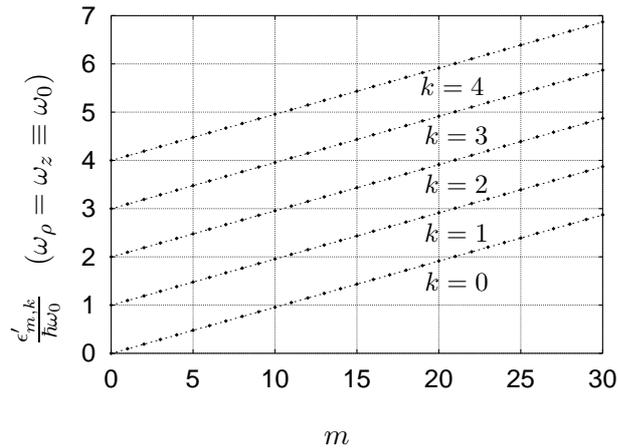


Abbildung 3.4.: Einteilchenenergie $\epsilon'_{m,k}$ als Funktion des Drehimpulses m in den Niveaus $k = 0 \dots 4$. In der Abbildung ist $m_{\max} = 10$ und $\beta = 10, 45$.

Das erste Gleichheitszeichen gilt, wenn die Zustände $|m = m_{\max}, k = 0\rangle$ und $|m = 0, k = 1\rangle$ entartet sind. Das ist der Fall, wenn β ganzzahlig ist. Dann sind alle Zustände $|M, k = 1\rangle$ und $|m = m_{\max} + M, k = 0\rangle$ entartet, da je zwei aufeinanderfolgende Drehimpulsniveaus den selben Abstand voneinander haben. Wir wollen im Folgenden den Spezialfall entarteter Zustände nicht diskutieren.

Sind diese Zustände nicht entartet, ist also β nicht ganzzahlig, dann werden sie mit kleiner werdender magnetischer Feldstärke abwechselnd besetzt. Ob der höchste besetzte Zustand dann im Oszillatorniveau $k = 0$ oder $k = 1$ liegt, hängt davon ab, ob die Teilchenzahl N und der ganzzahlige Wert von β , m_{\max} , gerade oder ungerade sind. Wir führen später alle Rechnungen mit $N = 100$ Teilchen durch und nehmen deshalb schon jetzt an, dass die Teilchenzahl gerade ist. Die Argumentation für ungerade Teilchenzahl ist vollkommen analog zu führen.

Sei also zunächst m_{\max} gerade. Dann ist die Anzahl der Teilchen in den Zuständen $|m = 0, k = 0\rangle$ bis $|m = m_{\max}, k = 0\rangle$ ungerade. Das heißt, die Anzahl aller anderen besetzten Zustände muss auch ungerade sein. Da die höheren Zustände beginnend mit dem Zustand $|m = 0, k = 1\rangle$ abwechselnd in den Oszillatorniveaus $k = 1$ und $k = 0$ besetzt werden, muss der höchste besetzte Zustand die Quantenzahl $k = 1$ besitzen. Wir bezeichnen den zugehörigen Drehimpuls mit M , so dass der energetisch am höchsten liegende besetzte Zustand $|m = M, k = 1\rangle$ ist. Insgesamt sind alle Zustände $|m = 0 \dots m_{\max} + M, k = 0\rangle$ und $|m = 0 \dots M, k = 1\rangle$ besetzt. Die Summe all dieser Zustände muss gleich der Teilchenzahl N sein, so dass wir finden

$$N = \sum_{m=0}^{m_{\max}+M} 1 + \sum_{m=0}^M 1 = m_{\max} + M + 1 + M + 1 = m_{\max} + 2M + 2. \quad (3.25)$$

Schließlich erhalten wir daraus für den höchsten besetzten Drehimpuls im Oszillatorniveau $k = 1$

$$M = \frac{N - m_{\max} - 2}{2}. \quad (3.26)$$

Dieser Wert ist wie gefordert nicht negativ und ganzzahlig, da N und m_{\max} gerade sind und $N > m_{\max} - 1$ ist (andernfalls würden sich ja in Zuständen mit $k = 1$ keine Teilchen befinden).

Ist dagegen m_{\max} ungerade, so ist die Anzahl der Teilchen in den Zuständen $|m = 0, k = 0\rangle$ bis $|m = m_{\max}, k = 0\rangle$ gerade und entsprechend muss auch die Summe aller anderen besetzten Zustände gerade sein. Das heißt, dass in diesem Fall der höchste besetzte Zustand $|m = m_{\max} + M + 1, k = 0\rangle$ ist. Durch Addition aller besetzter Zustände finden wir schließlich analog

$$N = \sum_{m=0}^{m_{\max}+M+1} 1 + \sum_{m=0}^M 1 = m_{\max} + M + 2 + M + 1 = m_{\max} + 2M + 3. \quad (3.27)$$

Damit erhalten wir für den höchsten besetzten Drehimpuls im Niveau $k = 1$

$$M = \frac{N - m_{\max} - 3}{2}. \quad (3.28)$$

Auch hier ist M ganzzahlig, da N gerade, m_{\max} ungerade und damit $N - m_{\max} - 3$ gerade ist. Schließlich ist M auch nicht negativ, da der größte ungerade Wert, für den sich noch nicht alle Teilchen im untersten Oszillatorniveau $k = 0$ befinden gerade $m_{\max} = N - 3$ ist.

Wir geben schließlich noch den Wertebereich für die Stärke des Magnetfeldes an, in dem der N -Teilchen Grundzustand diese Struktur besitzt. Nach oben ist β dabei durch die Bedingung beschränkt, dass sich mindestens ein Teilchen in einem Zustand mit $k = 1$ befinden soll. Den kleinsten Wert, den das Magnetfeld annehmen darf, erhalten wir aus der Bedingung

$$M \leq m_{\max}. \quad (3.29)$$

Das bedeutet, dass sich gerade kein Teilchen in einem Zustand mit $k = 2$ befinden soll. Wir finden also

$$\frac{N}{3} - 1 \leq \beta \leq N - 1. \quad (3.30)$$

Ist das Magnetfeld noch schwächer, so werden schließlich auch Zustände mit $k = 2$ besetzt. Wir können auch hier durch abzählen bestimmen, in welchem Oszillatorniveau für konstante Teilchenzahl und gegebenes Magnetfeld der höchste besetzte Zustand liegt. Wir müssen nun unterscheiden, ob für die Teilchenzahl

$$\frac{N}{3} \in \mathbb{N}, \quad (3.31a)$$

$$\frac{N+1}{3} \in \mathbb{N} \text{ oder} \quad (3.31b)$$

$$\frac{N+2}{3} \in \mathbb{N} \quad (3.31c)$$

gilt. Eine solche Bedingung benötigen wir aber nicht für den ganzzahligen Anteil des Magnetfeldes, da sich gleichzeitig mit der Besetzung der Zustände mit $k = 2$ auch die Besetzung solcher Zustände mit $k = 0$ und $k = 1$ ändert. In unserem Fall ($N = 100$) gilt $\frac{N+2}{3} \in \mathbb{N}$ und wir finden, dass $|m = 2m_{\max} + M, k = 0\rangle$ der höchste besetzte Zustand ist. Damit sind insgesamt die Zustände $|m = 0 \dots 2m_{\max} + M, k = 0\rangle$, $|m = 0 \dots m_{\max} + M - 1, k = 1\rangle$ und $|m = 0 \dots M - 1, k = 2\rangle$ besetzt. Mit der Bedingung, dass die Summe aller besetzten Zustände gleich der Teilchenzahl sein muss, gilt dann

$$M = \frac{N - 1}{3} - m_{\max}. \quad (3.32)$$

Wieder ist M ganzzahlig und nicht negativ, da mit $\frac{N+2}{3} \in \mathbb{N}$ auch $\frac{N-1}{3} \in \mathbb{N}$ gilt und das Magnetfeld schwächer sein muss als $\frac{N}{3} - 1$, damit sich überhaupt Teilchen in einem Zustand mit $k = 2$ befinden.

Wir geben schließlich noch den zu diesem Grundzustand gehörenden Bereich für die magnetische Feldstärke an, den wir ganz analog zum Fall zweier besetzter Niveaus bestimmen.

$$\frac{N - 1}{6} \leq \beta \leq \frac{N}{3} - 1. \quad (3.33)$$

Wir müssen uns noch davon überzeugen, dass in allen drei Fällen ($k \in \{0, 1, 2\}$) nur das unterste Oszillator-Niveau senkrecht zum Magnetfeld besetzt ist. Die niedrigste Einteilchenenergie im ersten Oszillator-Niveau senkrecht zum Magnetfeld ist durch

$$\epsilon_{l=1, m=0, k=0} = 3\hbar\Omega_\rho + \frac{1}{2}\hbar\omega_z \quad (3.34)$$

gegeben. Damit lautet die Bedingung dafür, dass sich keine Teilchen in diesem Niveau befinden

$$\epsilon_{l=1, m=0, k=0} > \epsilon_{M, K} \quad (3.35)$$

wenn der Zustand $|M, K\rangle$ der höchste besetzte Einteilchenzustand im untersten Oszillator-Niveau senkrecht zum Magnetfeld ist.

Wenn wir $M = 0$ wählen, dann können wir das unterste Niveau K angeben, das gerade nicht mehr besetzt werden darf. Wir finden dafür die Bedingung

$$K = \left\lfloor \frac{2\Omega_\rho}{\omega_z} \right\rfloor. \quad (3.36)$$

Wenn wir schließlich Ω_ρ in Potenzen von ω_ρ entwickeln erhalten wir damit

$$K = \left\lfloor \beta \frac{\omega_\rho^2}{\omega_z^2} + \frac{2}{\beta} \right\rfloor. \quad (3.37)$$

Wir werden später ein System mit $N = 100$ Teilchen diskutieren und $\omega_\rho = \omega_z$ wählen. Wir haben gesehen, dass dann der kleinste Wert, den das Magnetfeld annehmen darf $\beta = \frac{N-1}{6} = 16.5$ ist. Bei einem Feld, das nicht schwächer ist als dieser Wert sind dann nur die Niveaus mit $k = 0, 1, 2$ besetzt. Die Kante zum ersten Oszillator-Niveau senkrecht zum Magnetfeld liegt aber zwischen den Niveaus $K = 16$ und $K = 17$. In unserem System befinden sich also alle Teilchen im untersten Oszillator-Niveau senkrecht zum Magnetfeld.

3.3.2. Grundzustandsdichte

Für die Beschreibung der magnetischen Eigenschaften des Systems mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie benötigen wir die Dichteverteilung der Elektronen im Grundzustand in Abhängigkeit von der (effektiven) Magnetfeldstärke. Wir kennen aus Gleichung (3.10) bereits den Beitrag, den ein Zustand $|m, k\rangle$ zur Dichte liefert. Die Gesamtdichte erhalten wir, indem wir alle diese Beiträge über die besetzten Zustände summieren. Dazu bestimmen wir zunächst die Dichteverteilung aller Teilchen im k -ten Oszillatorniveau parallel zum Magnetfeld. $M(k)$ ist der höchste besetzte Drehimpulszustand im Niveau k .

$$\begin{aligned} n_k(\rho, z) &= \sum_{m=0}^{M(k)} n_{m,k}(\rho, z) \\ &= \sum_{m=0}^{M(k)} \frac{1}{\sqrt{2\pi^3} \rho_0^2 z_0} \frac{1}{m! k! 2^k} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^m \left[H_k \left(\frac{\sqrt{2}z}{z_0} \right) \right]^2 \exp \left(-\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \exp \left(-\frac{2z^2}{z_0^2} \right). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Im Anhang wird gezeigt, dass für die Summe

$$\sum_{m=0}^M \frac{1}{m!} x^m \exp(-x) = 1 - \frac{1}{(M+1)!} x^{M+1} {}_1F_1(M+1, M+2, -x) \quad (3.39)$$

gilt. Dabei ist ${}_1F_1$ die konfluente hypergeometrische Funktion oder Kummer-Funktion. Damit erhalten wir für die Dichteverteilung der Teilchen im k -ten Oszillatorniveau

$$\begin{aligned} n_k(\rho, z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi^3} \rho_0^2 z_0} \frac{1}{k! 2^k} \left[H_k \left(\frac{\sqrt{2}z}{z_0} \right) \right]^2 \exp \left(-\frac{2z^2}{z_0^2} \right) \\ &\times \left(1 - \frac{1}{(M(k)+1)!} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^{M(k)+1} {}_1F_1 \left(M(k)+1, M(k)+2, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Die gesamte Teilchendichte können wir dann durch Summation über alle besetzten Zustände $k = 0 \dots k_{\max}$ erhalten. Wir führen diese Rechnung für beliebiges k_{\max} nicht durch, sondern beschränken uns auf ein, zwei oder drei besetzte Oszillatorniveaus parallel zum Magnetfeld. Wir haben in Abschnitt 3.3.1 gezeigt, dass diese Einschränkung bedeutet, das System nur in Magnetfeldern zu betrachten, deren Stärke innerhalb bestimmter Grenzen liegt.

Befinden sich alle Teilchen in Zuständen mit $k = 0$, dann ist $M(k=0) = N - 1$ und wir erhalten für die Dichteverteilung

$$n(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3} \rho_0^2 z_0} \exp \left(-\frac{2z^2}{z_0^2} \right) \left(1 - \frac{1}{N!} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^N {}_1F_1 \left(N, N+1, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right). \quad (3.41)$$

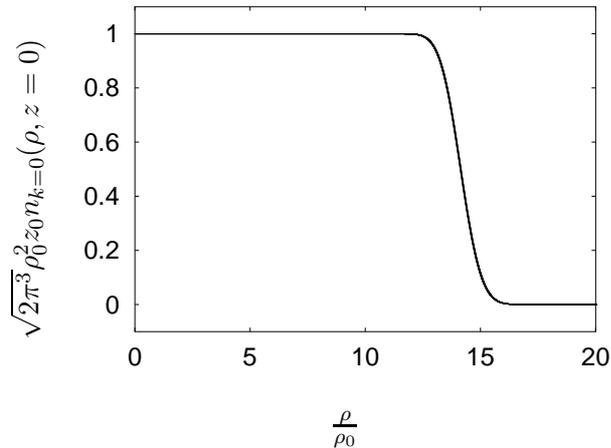


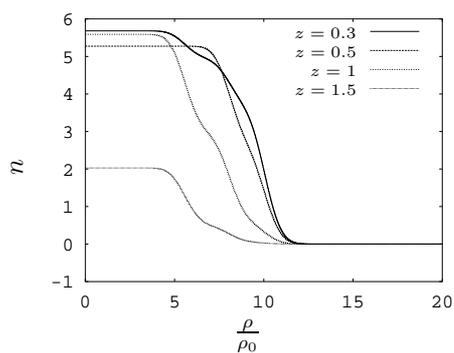
Abbildung 3.5.: Dichteverteilung für $N = 100$ Teilchen im Zustand $k = 0$ als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse in der Ebene $z = 0$

In Abbildung 3.5 ist $n(\rho, z = 0)$ für Zustände mit $k = 0$ dargestellt. Dort erkennen wir, dass die Dichte bei $z = 0$ als Funktion des Abstandes von der z -Achse über einen weiten Bereich konstant bleibt und am Rand steil abfällt. Die Einteilchen-Dichteverteilung des höchsten besetzten Drehimpulszustandes $m = N - 1$ ist um $\rho = \sqrt{2m + 1}\rho_0 = \sqrt{2N - 1}\rho_0$ zentriert und hat um diesen Wert eine Ausdehnung der Größenordnung ρ_0 . Wir erwarten also, dass der Übergang von der quasi-homogenen Dichteverteilung im Inneren des Systems zum Rand etwa bei $\rho = (\sqrt{2N - 1} - 1)\rho_0$ stattfindet. In unserem Beispiel mit 100 Teilchen heißt das, dass der Rand der Dichteverteilung bei etwa $13\rho_0$ beginnt. In Abbildung 3.5 ist der Übergang in diesem Bereich deutlich zu erkennen.

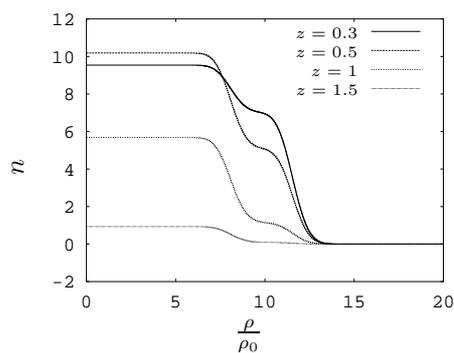
Was wir über die Dichteverteilung im Zustand $k = 0$ festgestellt haben, gilt analog auch für den Anteil der Dichte n_k im Fall $k \neq 0$. Dann ist die Dichte etwa bis $\rho = (\sqrt{2M(k)} - 1 - 1)\rho_0$ konstant und fällt dann ab. Zusätzlich ist sie parallel zum Magnetfeld nicht mehr durch eine einfache Gauß-Verteilung wie im Fall $k = 0$ gegeben, sondern wie in Abbildung 3.2 moduliert. Die Gesamtdichte für $k_{\max} = 1$ und $k_{\max} = 2$ ist für einige Werte der magnetischen Feldstärke in den Abbildungen 3.6 dargestellt. Die Stufen entsprechen dem Rand der Dichteverteilung n_k der Teilchen im Oszillatorniveau k . Das Verhalten der Dichte in z -Richtung ist durch Vergleich der verschiedenen Kurven in jeder Abbildung ersichtlich.

3.3.3. Stromdichteverteilung im Grundzustand

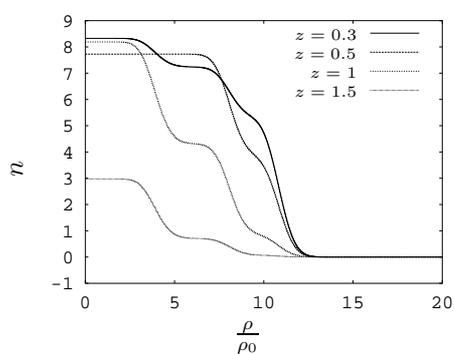
Analog zur Bestimmung der Grundzustandsdichte können wir aus den Beiträgen der einzelnen Zustände auch die Verteilung der Stromdichte im Grundzustand bestimmen. Dazu addieren wir wiederum die Stromdichten in den einzelnen Zuständen und finden mit Hilfe von Gleichung (3.39), die uns den Wert der Summe über die besetz-



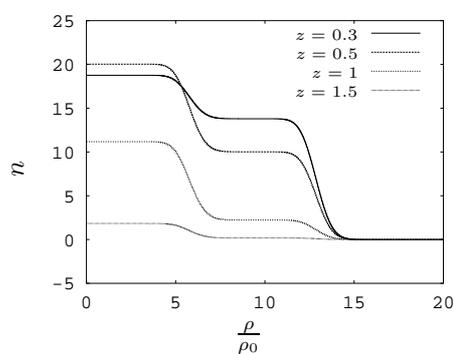
(a) $[\beta] = 17$



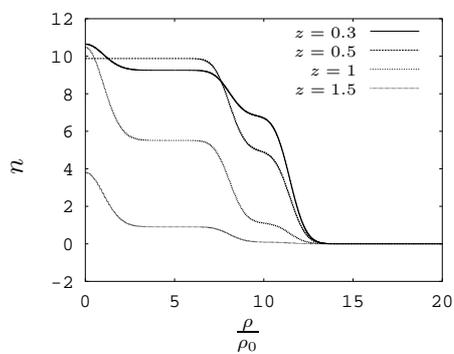
(b) $[\beta] = 33$



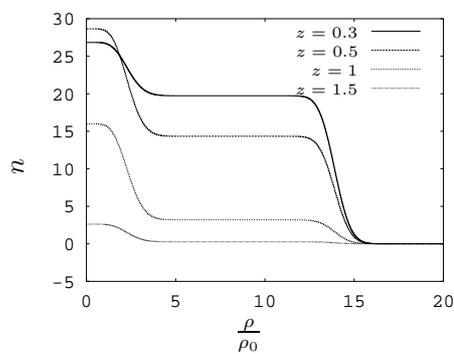
(c) $[\beta] = 25$



(d) $[\beta] = 65$



(e) $[\beta] = 32$



(f) $[\beta] = 93$

Abbildung 3.6.: Dichteverteilung für $N = 100$ Teilchen als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse für verschiedene Werte von z und magnetische Feldstärken β . In der linken Spalte ist $k_{\max} = 2$, in der rechten $k_{\max} = 1$.

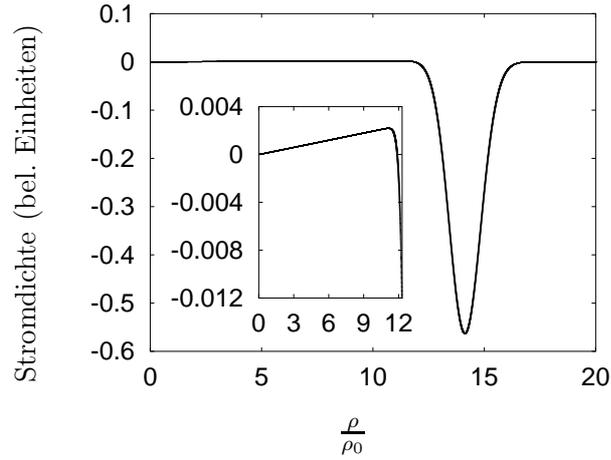


Abbildung 3.7.: Stromdichteverteilung für $N = 100$ Teilchen im Zustand $k = 0$ als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse in der Ebene $z = 0$. Das Inset zeigt den schwachen Strom, der im Inneren des Systems in entgegengesetzter Richtung zum Strom am Rand des Systems fließt.

ten Drehimpulszustände angibt, für die gesamte Stromdichte aller Teilchen im k -ten Oszillatorniveau parallel zum Magnetfeld

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j}_k(\rho, \varphi, z) &= \sum_{m=0}^{M(k)} \mathbf{j}_{m,k}(\rho, \varphi, z) = \frac{\hbar}{2m_e} \frac{\rho}{\sqrt{2\pi^3} \rho_0^4 z_0} \frac{1}{k! 2^k} \left[\text{H}_k \left(\frac{\sqrt{2}z}{z_0} \right) \right]^2 \exp \left(-\frac{2z^2}{z_0^2} \right) \\
 &\quad \times \left[\left(1 - \frac{1}{M(k)!} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^{M(k)} {}_1\text{F}_1 \left(M(k), M(k) + 1, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{1 + 2\left(\frac{\omega\rho}{\omega_c}\right)^2} \left(1 - \frac{1}{(M(k) + 1)!} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^{M(k)+1} {}_1\text{F}_1 \left(M(k) + 1, M(k) + 2, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right) \right].
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

Wie bei der Dichteverteilung führen wir die Summe über k nicht aus, sondern diskutieren lediglich die qualitativen Eigenschaften dieser Stromdichteverteilung. Dazu skizzieren wir in Abbildung 3.7 zunächst die gesamte Stromdichte, die sich für $k_{\max} = 0$ ergibt.

Wir erkennen, dass im Inneren des Systems, wo die Dichte (nahezu) konstant ist, nur ein sehr schwacher Strom fließt. Am Rand des Systems dagegen fließt ein starker Strom in die entgegengesetzte Richtung, der im Wesentlichen für das magnetische Moment des Systems verantwortlich ist. Wir bemerken, dass die Strom- und Dichteverteilung in diesem System sich so verhalten, wie wir es als physikalische Motivation bei der Herleitung des Zusammenhanges zwischen Strom- und Dichteverteilung im Rahmen der Stromdichtefunktionaltheorie skizziert hatten.

Sind auch Niveaus mit $k \neq 0$ besetzt, so addieren sich wiederum die Stromdichten

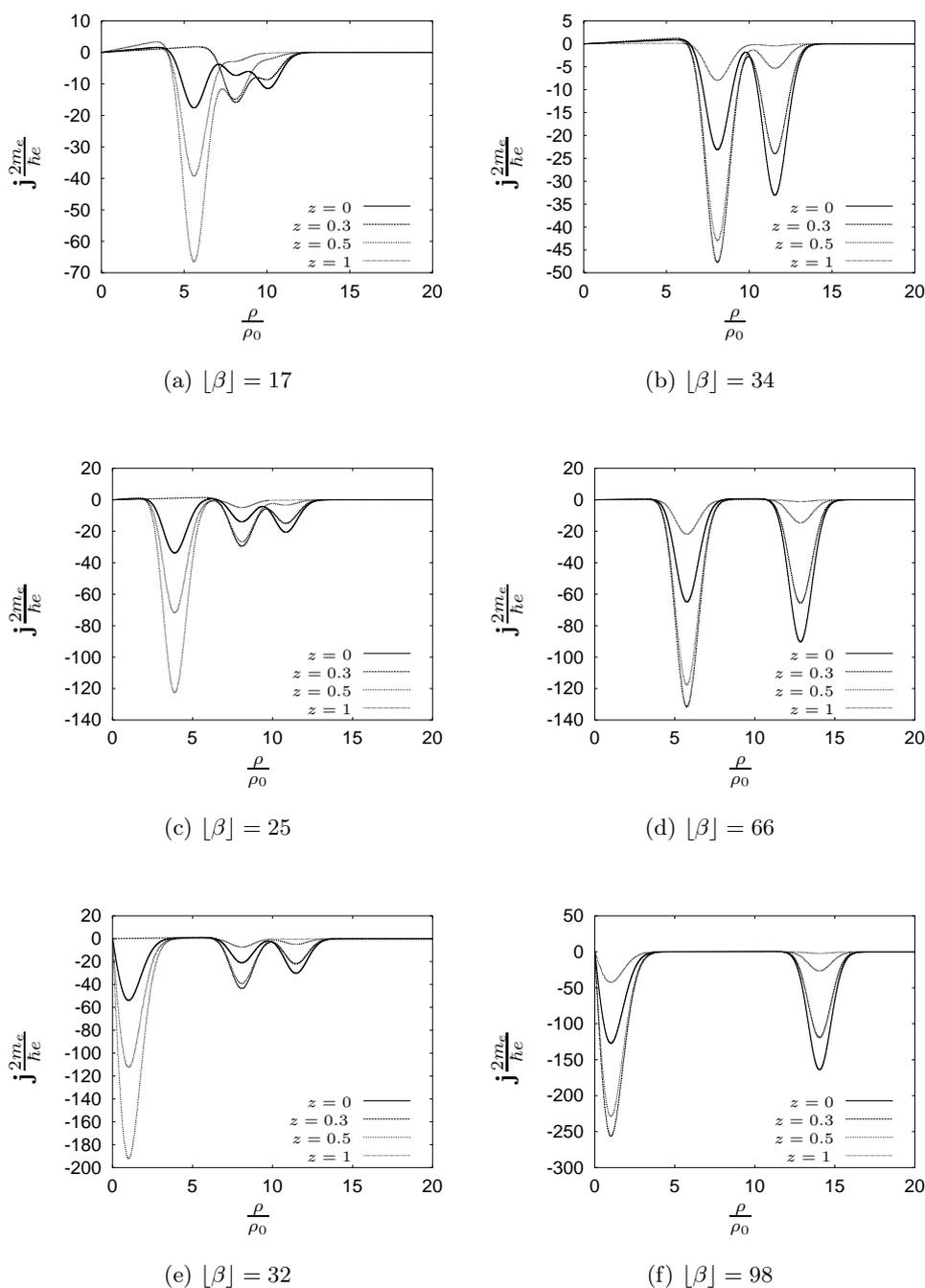


Abbildung 3.8.: Stromverteilung für $N = 100$ Teilchen als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse für verschiedene Werte von z und magnetische Feldstärken β . In der linken Spalte ist $k_{\max} = 2$, in der rechten $k_{\max} = 1$.

\mathbf{j}_k zur Gesamtstromdichte. Für zwei und drei besetzte Niveaus ist die radiale Verteilung der Stromdichte für verschieden starke Magnetfelder in den Abbildungen 3.8 dargestellt.

Die Peaks entsprechen einem starken Strom, der an den Randbereichen der Dichteverteilungen n_k ($k = 0, 1, 2$) fließt. Ihre Höhe wird entsprechend dem intuitiven Bild, das wir bei der Diskussion des universellen Strom-Dichte-Zusammenhangs entworfen haben, durch die Änderung der Dichte an diesem Ort bestimmt. Daher ändert sich auch die relative Höhe der Peaks zueinander für verschiedene Werte von z . Schließlich stellen wir noch fest, dass die Stärke des Stromes ganz wesentlich von der Stärke des Magnetfeldes beeinflusst wird, wie wir es für ein System erwarten, in dem die diamagnetischen Eigenschaften gegenüber den paramagnetischen dominieren.

3.3.4. Grundzustandsenergie und Fermienergie

Die Energie des Grundzustandes erhalten wir, indem wir die Energien aller besetzter Einteilchenzustände addieren. Wir wollen auch hier wieder die Fälle $k_{\max} = 0, 1, 2$ unterscheiden und beginnen mit einem System im sehr starken Magnetfeld, bei dem sich alle Teilchen in Zuständen mit $k = 0$ befinden. Dann erhalten wir für die innere Energie des Grundzustandes

$$U_{k_{\max}=0} = N\epsilon_0 + N\hbar\omega_z \frac{N-1}{2\beta}. \quad (3.43)$$

Dieser Ausdruck entspricht bis auf die Nullpunktsenergie exakt der Energie eines zweidimensionalen Elektronengases im harmonischen Oszillatorpotential mit Frequenz ω_z im effektiven Magnetfeld $\beta = \frac{\omega_c}{\omega_z}$. Die Nullpunktsenergie unterscheidet sich nur durch den Beitrag der Bewegung parallel zum Magnetfeld. Dieser Anteil hängt nicht von der Stärke des Magnetfeldes ab und wir erwarten daher, dass die Magnetisierung des dreidimensionalen Systems im Fall $k_{\max} = 0$ exakt gleich der Magnetisierung des entsprechenden zweidimensionalen Systems sein wird.

Ist das Magnetfeld schwächer und sind entsprechend die Niveaus $k = 0$ und $k = 1$ besetzt, dann müssen wir – wie schon bei der Diskussion der Struktur des Grundzustandes in Abschnitt 3.3.1 – die Fälle m_{\max} gerade und m_{\max} ungerade unterscheiden.

Ist m_{\max} gerade, so haben wir gesehen, dass im Niveau $k = 0$ die Drehimpulse $m = 0 \dots \frac{N+m_{\max}-2}{2} \equiv M_0$ und im Niveau $k = 1$ die Drehimpulse $m = 0 \dots \frac{N-m_{\max}-2}{2} \equiv M_1$ besetzt sind. Wenn wir nun die Einteilchenenergien aller dieser Zustände addieren, so erhalten wir

$$\begin{aligned} U_{k_{\max}=1, \text{even}} &= N\epsilon_0 + \hbar\omega_z \sum_{m=0}^{M_0} \frac{m}{\beta} + \hbar\omega_z \sum_{m=0}^{M_1} \left(\frac{m}{\beta} + 1 \right) \\ &= N\epsilon_0 + \hbar\omega_z \left(\frac{N(N+3) + m_{\max}^2 + 2}{4\beta} + \frac{N - m_{\max}}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Bei ungeradem m_{\max} sind die Drehimpulszustände $m = 0 \dots \frac{N+m_{\max}-1}{2} \equiv M_0$ im

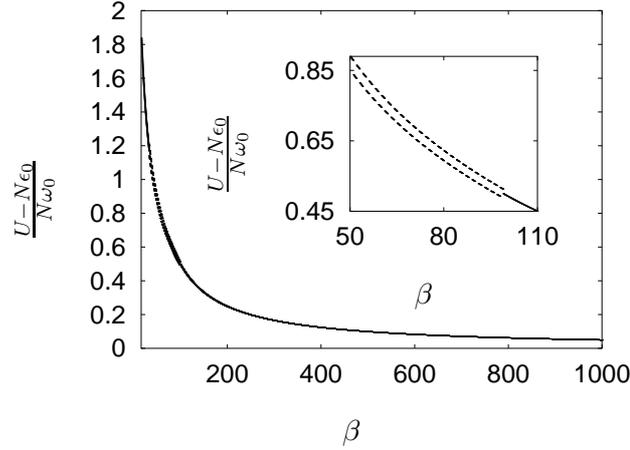


Abbildung 3.9.: Mittlere Energie pro Teilchen abzüglich der Nullpunktenergie als Funktion des effektiven Magnetfeldes β im sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential ($\omega_\rho = \omega_z \equiv \omega_0$). Das Inset zeigt den Verlauf bei zwei besetzten Niveaus und den Übergang zu einem besetzten Niveau.

Niveau $k = 0$ und die Drehimpulse $m = 0 \dots \frac{N - m_{\max} - 3}{2} \equiv M_1$ im Niveau $k = 1$ besetzt. Also erhalten wir für die innere Energie

$$U_{k_{\max}=1, \text{odd}} = N\epsilon_0 + \hbar\omega_z \left(\frac{N(N-3) + m_{\max}(m_{\max}-2) + 3}{4\beta} + \frac{N - m_{\max} + 1}{2} \right). \quad (3.45)$$

Wir sehen also, dass der konfigurationsabhängige Anteil der inneren Energie im Fall von zwei besetzten Oszillatorniveaus parallel zum Magnetfeld keine stetige Funktion der magnetischen Feldstärke ist, sondern sich aus den abschnittsweise definierten Funktionen $U_{k_{\max}=1, \text{even}}$ und $U_{k_{\max}=1, \text{odd}}$ zusammensetzt. Ebenso wird sich also die exakte Magnetisierung aus solchen stückweisen Funktionen zusammensetzen.

Bei noch schwächerem Magnetfeld werden schließlich auch Zustände mit $k = 2$ besetzt. Die Besetzung der Drehimpulszustände im k -ten Oszillatorniveau haben wir in Abschnitt 3.3.1 diskutiert. Wenn wir wiederum die Einteilchenenergien aller besetzter Zustände addieren, dann erhalten wir in unserem Fall ($\frac{N+2}{3} \in \mathbb{N}$):

$$U_{k_{\max}=2} = N\epsilon_0 + \hbar\omega_z \left(\frac{6m_{\max}(m_{\max}+1) + N(N-3) + 2}{6\beta} + N - 2m_{\max} - 1 \right). \quad (3.46)$$

Wir erkennen in Abbildung 3.9, dass der konfigurationsabhängige Anteil der mittleren Energie pro Teilchen (also der Anteil, der dem Term $\epsilon'_{m,k}$ in den Einteilchenenergien (3.9) zuzuordnen ist) mit wachsendem Magnetfeld abnimmt. Der Anteil der Energie eines Teilchens, der seinem Zustand parallel zum Magnetfeld entspricht, ist unabhängig von der Stärke des Magnetfeldes. Dagegen ist der magnetfeldabhängige Anteil von $\epsilon'_{m,k}$ umgekehrt proportional zu B . Also nimmt die Energie abzüglich der

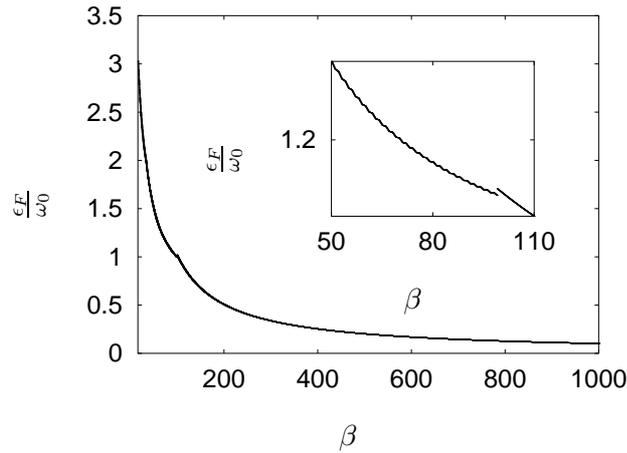


Abbildung 3.10.: Konfigurationsabhängiger Anteil der Fermienergie als Funktion des effektiven Magnetfeldes β im sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential ($\omega_\rho = \omega_z \equiv \omega_0$). Das Inset zeigt das Verhalten bei zwei besetzten Niveaus $k = 0$ und $k = 1$ sowie den Übergang zu einem besetzten Niveau $k = 0$.

Nullpunktsenergie eines Teilchens im Zustand $|m, k\rangle$ mit stärker werdendem Magnetfeld proportional zum Reziprokwert der magnetischen Feldstärke ab. Das entspricht genau dem Verhalten von $\epsilon'_{m,k}$, wenn nur das unterste Oszillatorniveau parallel zum Magnetfeld besetzt ist. Sind auch höhere Oszillatorniveaus besetzt, dann wird dieser Effekt teilweise durch die Umordnung der besetzten Zustände mit wachsendem Magnetfeld kompensiert da dann auch höhere Drehimpulszustände besetzt werden.

Auffällig ist der Verlauf der Energie im Fall von zwei besetzten Oszillatorniveaus. Hier sind die Fälle m_{\max} gerade beziehungsweise ungerade deutlich zu unterscheiden.

Die Gesamtenergie pro Teilchen wächst für die von uns betrachteten starken Felder in guter Näherung proportional zur Magnetfeldstärke an, da die Nullpunktsenergie des Teilchens dann von ihrem Anteil proportional zu B dominiert wird und gegenüber dem konfigurationsabhängigen Anteil deutlich überwiegt.

Wir haben bei der Diskussion des Grundzustandes beschrieben, welches Niveau in Abhängigkeit vom Magnetfeld der Fermikante entspricht. Damit können wir auch den Verlauf der Fermienergie in Abhängigkeit von der Stärke des Magnetfeldes bestimmen. In der Abbildung 3.10 ist der konfigurationsabhängige Anteil der Fermienergie als Funktion des effektiven Magnetfeldes β dargestellt.

Wir erkennen, dass dieser Anteil der Fermienergie mit wachsendem Magnetfeld rasch abnimmt. Dieses Verhalten ist aus den Einteilchenenergien unmittelbar verständlich, da deren konfigurationsabhängiger Anteil für $B \rightarrow \infty$ nur noch die Oszillator-Energie parallel zum Magnetfeld enthält. Auffallend ist der Knick, der den Übergang von zwei besetzten Niveaus $k = 0$ und $k = 1$ zu einem besetzten Niveau $k = 0$ widerspiegelt. Zudem erkennen wir deutlich eine wellenartige Struktur, in der sich der Wechsel der Fermikante zwischen den Niveaus $k = 0$ und $k = 1$ zeigt.

3.4. Exakte Beschreibung der magnetischen Eigenschaften

Mit der Kenntnis der Grundzustandsenergie können wir die Magnetisierung des Systems durch Ableitung der inneren Energie nach der Stärke des Magnetfeldes bestimmen. Um die Notation etwas zu vereinfachen, spezialisieren wir unser einschließendes Oszillatorpotential und betrachten ein sphärisch symmetrisches System mit $\omega_\rho = \omega_z \equiv \omega_0$. Dann erhalten wir für die effektive Magnetfeldstärke den Ausdruck $\beta = \frac{\omega_c}{\omega_0}$. Auch hier beschränken wir uns auf die drei Fälle $k_{\max} \in \{0, 1, 2\}$.

Befinden sich alle Teilchen im untersten Oszillatorniveau parallel zum Magnetfeld, dann erhalten wir aus der inneren Energie (3.43) die Magnetisierung des Systems pro Teilchen

$$\mu_M^{k_{\max}=0} = -\mu_B \left(1 - \frac{N+1}{\beta^2} \right). \quad (3.47)$$

Das entspricht – wie erwartet – der Magnetisierung pro Teilchen in einem zweidimensionalen Oszillatorpotential $V^{2D} = \frac{1}{2}m_e\omega_0^2\rho^2$ und im effektiven Magnetfeld β da den Teilchen der Freiheitsgrad parallel zum Magnetfeld nicht mehr zur Verfügung steht.

Sind neben den Zuständen mit $k = 0$ auch solche mit $k = 1$ besetzt, dann können wir die Magnetisierung aus den Gleichungen (3.44) und (3.45) für m_{\max} gerade beziehungsweise ungerade bestimmen. Wir erhalten dann für die Magnetisierung pro Teilchen

$$\mu_M^{k_{\max}=1,\text{even}} = -\mu_B \left(1 - \frac{1}{2\beta^2} \left(N + 7 + \frac{m_{\max}^2 + 2}{N} \right) \right) \quad (3.48)$$

für gerades m_{\max} und

$$\mu_M^{k_{\max}=1,\text{odd}} = -\mu_B \left(1 - \frac{1}{2\beta^2} \left(N + 1 + \frac{m_{\max}(m_{\max} - 2) + 3}{N} \right) \right) \quad (3.49)$$

für ungerades m_{\max} .

Sind schließlich drei Oszillatorniveaus parallel zum Magnetfeld besetzt, dann ist die innere Energie durch Gleichung (3.46) gegeben und wir erhalten für die Magnetisierung pro Teilchen

$$\mu_M^{k_{\max}=2} = -\mu_B \left(1 - \frac{1}{3\beta^2} \left(N + 3 + \frac{6m_{\max}(m_{\max} + 1) + 2}{N} \right) \right). \quad (3.50)$$

Wir erkennen in Abbildung 3.11, dass die Magnetisierung pro Teilchen für ein sehr starkes Magnetfeld entsprechend unserer Erwartung gegen $-\mu_B$ strebt, da dann die mittlere Energie pro Teilchen vollständig von der Zyklotronenergie des Teilchens die in ϵ_0 enthalten ist, dominiert wird. Auffallend ist zudem der Übergang zu nur noch einem besetzten Niveau, der sich im Verlauf der Magnetisierung als Knick darstellt.

Sind zwei Oszillatorniveaus parallel zum Magnetfeld besetzt, dann haben wir bereits gesehen, dass die mittlere Energie pro Teilchen davon abhängt, ob die Teilchenzahl und der ganzzahlige Anteil der effektiven magnetischen Feldstärke gerade oder

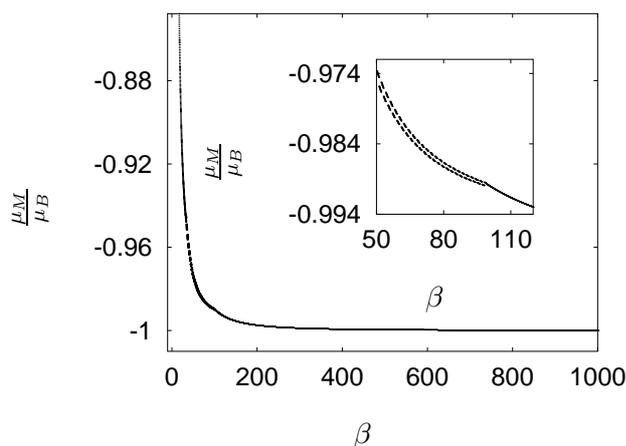


Abbildung 3.11.: Magnetisierung pro Teilchen im sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential als Funktion des effektiven Magnetfeldes

ungerade sind. Dementsprechend erhalten wir auch für die Magnetisierung des Systems in den zugehörigen Bereichen der magnetischen Feldstärke einen Verlauf, der sich aus den Abschnitten zusammensetzt, die m_{\max} gerade beziehungsweise ungerade entsprechen. Bei ganzzahligen Werten der magnetischen Feldstärke springt die Magnetisierung diskontinuierlich von einem dieser Abschnitte zum nächsten.

3.5. Beschreibung der magnetischen Eigenschaften mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie

Wir wollen nun die Magnetisierung und Stromverteilung des Systems mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie beschreiben. Dazu gehen wir von der exakt bekannten Dichteverteilung (3.40) aus und verwenden den Zusammenhang (2.24a), um die Stromdichte zu bestimmen. Die Magnetisierung des Systems erhalten wir aus der Dichte mit Hilfe des Ausdrucks (2.46), der es uns im Rahmen der Stromdichtefunktionaltheorie erlaubt, aus der Dichteverteilung eines Systems nicht wechselwirkender Teilchen seine Magnetisierung zu bestimmen.

3.5.1. Stromdichte

Aus der bekannten Dichteverteilung des Systems (3.40) können wir mit Hilfe der universellen Beziehung zwischen Stromdichte und Dichte (2.24a) die Stromverteilung bestimmen. Dazu benötigen wir lediglich die Ableitung der Dichte nach dem Abstand

von der z -Achse, die anderen Komponenten des Gradienten tragen in unserem Fall nicht bei. Wir berechnen also zunächst für ein allgemeines $M \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\rho, z)}{\partial \rho} &\propto \frac{\partial}{\partial \rho} \left(1 - \frac{1}{(M+1)!} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^{M+1} {}_1F_1 \left(M+1, M+2, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{M!} \frac{\rho}{\rho_0^2} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^M \left[-{}_1F_1 \left(M+1, M+2, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{M+2} \frac{\rho^2}{2\rho_0^2} {}_1F_1 \left(M+2, M+3, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Die Ableitung der hypergeometrischen Funktion ${}_1F_1$ wird im Anhang explizit berechnet.

Für sehr starke Magnetfelder können wir im exakten Ausdruck (3.42)

$$\frac{1}{1 + 2 \left(\frac{\omega_p}{\omega_c} \right)^2} \approx 1 \quad (3.52)$$

nähern, da dann die Zyklotronfrequenz deutlich größer als die Oszillatorfrequenz des einschließenden Potentials ist. Wir stellen fest, dass wir mit dieser Näherung für starke Magnetfelder einen ganz ähnlichen Ausdruck für den ρ -abhängigen Teil der exakten Stromdichte (3.42) erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{1}{M(k)!} \frac{\rho}{\rho_0^2} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right)^{M(k)} \left[-{}_1F_1 \left(M(k), M(k)+1, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{M(k)+1} \frac{\rho^2}{2\rho_0^2} {}_1F_1 \left(M(k)+1, M(k)+2, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Die Ableitung (3.51) entspricht aber, bis auf den Anteil in der Funktion γ_k , den wir unten diskutieren, fast genau dem ρ -abhängigen Teil in der Stromdichte wie wir ihn im Rahmen der Stromdichtefunktionaltheorie erhalten. Der einzige Unterschied zur Näherung des exakten Ausdrucks für starke Felder ist, dass in den hypergeometrischen Funktionen im CDFT-Ausdruck um eins erhöhte Drehimpulse als Parameter stehen. Für $M \gg 1$ hat das auf das Ergebnis einen vernachlässigbar geringen Einfluss, da das Maximum der Stromdichte von der Potenz mit der $\frac{\rho^2}{2\rho_0^2}$ auftritt abhängt. Diese ist in beiden Fällen die Gleiche. Die hypergeometrische Funktion bestimmt nur, wie schnell die Stromdichte ansteigt und abfällt, sowie die Stärke des Stromes. Für kleinere Werte von M heißt das, dass die Stromdichtefunktionaltheorie einen zu schwachen Strom voraussagt. Insgesamt bedeutet das, dass bei großen Werten von ρ die Übereinstimmung zwischen dem exakten Stromverlauf und dem von der CDFT beschriebenen besser ist als weiter innen im System. Bevor wir den Einfluss der Funktion γ_k diskutieren, stellen wir noch fest, dass dieses Ergebnis unabhängig von der Anzahl der besetzten Zustände parallel zum Magnetfeld ist, vorausgesetzt, β ist so groß, dass wir

das exakte Ergebnis auf die oben beschriebene Art nähern dürfen. Der von z abhängige Anteil ist also bis auf den Einfluss von γ_k im exakten Ergebnis der Gleichung wie in dem Ausdruck, den wir mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie erhalten.

Wir haben bisher den Einfluss der Funktion γ_k nicht berücksichtigt. Das entspricht dem Grenzfall unendlich starken Magnetfeldes, da dann $\gamma_k \rightarrow 1$ gilt. In γ_k ist nach Gleichung (2.39) das Quadrat der Dichte enthalten. Eine allgemeine Diskussion für beliebig viele besetzte Zustände parallel zum Magnetfeld ist daher sehr unanschaulich. Wir betrachten also wieder nur die Fälle $k_{\max} = 0, 1, 2$ und beginnen damit, dass sich alle Teilchen in Zuständen mit $k = 0$ befinden. Dann ist das höchste besetzte Drehimpulsniveau $M_{\max} = M(k) = N - 1$. Wir können γ_k aus der bekannten Dichteverteilung und mit Hilfe von Gleichung (2.39) bestimmen. Zunächst schätzen wir ab, in welchem Bereich der Wert von γ_k bei gegebener Teilchenzahl und gegebener Magnetfeldstärke liegen wird. Dazu schreiben wir das Verhältnis der charakteristischen Längen

$$\frac{\lambda^6}{\rho_0^4 z_0^2} = \frac{2(2 + \beta^2)^2}{\beta^5} \approx \frac{2}{\beta} \quad (3.54)$$

und erhalten dann γ_k als Funktion der Koordinaten ρ und z

$$\gamma_k(\rho, z) = 1 - \frac{2\pi}{\beta} (n'(\rho, z))^2. \quad (3.55)$$

Hier ist $n'(\rho, z)$ die Dichte des Systems ohne ihre Normierung $\frac{1}{\sqrt{2\pi^3} \rho_0^2 z_0}$. Da $n'(\rho, z)$ zwischen null und eins liegt, finden wir schließlich

$$1 - \frac{2\pi}{\beta} \leq \gamma_k \leq 1 \quad (3.56)$$

und speziell für ein System von $N = 100$ Teilchen, das heißt $\beta \geq 99$,

$$0.937 < \gamma_k \leq 1. \quad (3.57)$$

Der Verlauf von γ_k als Funktion von ρ bei $z = 0$ ist in Abbildung 3.12 für verschiedenen starke Magnetfelder skizziert.

Wir stellen also fest, dass sich zumindest bei den von uns betrachteten starken Magnetfeldern der Wert von γ_k nur wenig mit dem Abstand von der z -Achse ändert, insbesondere wechselt das Vorzeichen nicht. Der Strom fließt damit also überall in die selbe Richtung. Wir können nun Gleichung (3.51) und unseren Ausdruck (3.55) für γ_k kombinieren und numerisch mit Maple auswerten. Das Ergebnis für verschiedene Feldstärken β ist in Abbildung 3.13 dargestellt.

Sind mehrere Oszillatorniveaus parallel zum Magnetfeld besetzt, so ist die Stromdichte (bis auf die Korrektur, die wir aus γ_k erhalten) durch die Summe der Beiträge in den einzelnen Niveaus k gegeben. Für jedes dieser Niveaus erhalten wir den Beitrag durch die Ableitung der Dichte in diesem Niveau nach ρ entsprechend Gleichung (3.51). Also erwarten wir, dass jedes dieser Niveaus einen Beitrag zur Gesamtstromdichte liefert, der sich als Peak am Rand der entsprechenden Dichteverteilung darstellt. Der Wert der Funktion γ_k beeinflusst dabei die Höhe der Peaks, also die Stärke des Stromes, und, falls sich ihr Vorzeichen ändert, auch seine Richtung.

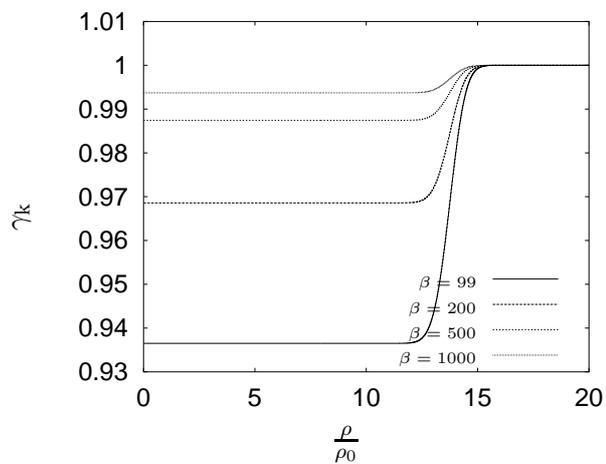


Abbildung 3.12.: γ_k als Funktion der Koordinate ρ bei $z = 0$ für verschieden starke Magnetfelder. In allen gezeigten Fällen ist $k_{\max} = 0$.

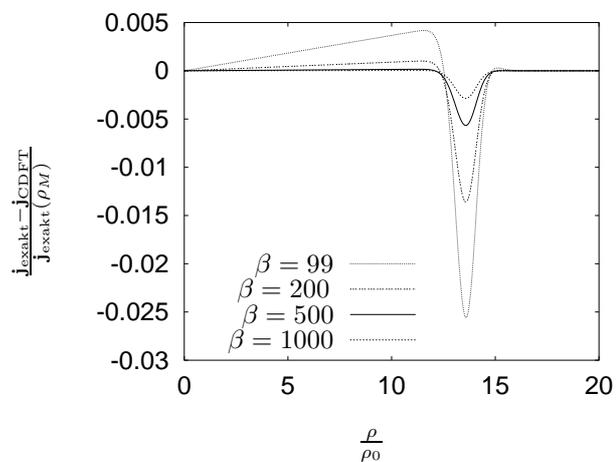


Abbildung 3.13.: Auf den Maximalwert der exakten Stromdichte normierte Differenz zwischen der exakten Stromdichte und der Stromdichte, die wir in CDFT erhalten, als Funktion der Koordinate ρ bei $z = 0$ für verschieden starke Magnetfelder. In allen gezeigten Fällen ist $k_{\max} = 0$.

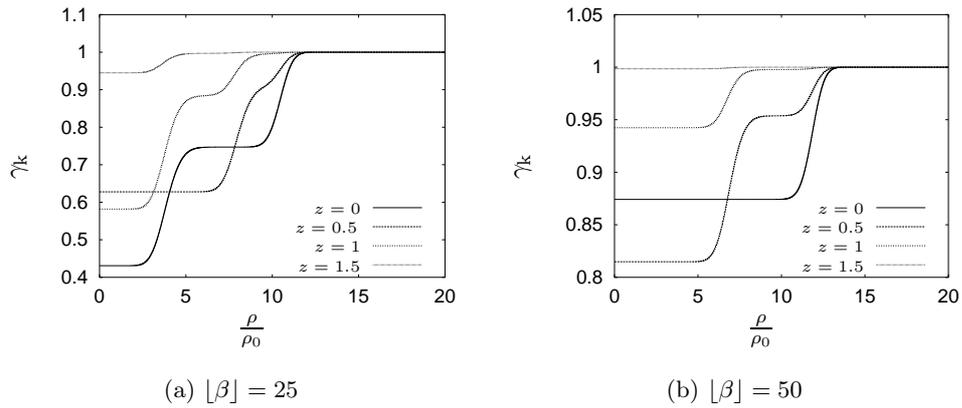


Abbildung 3.14.: Verlauf von γ_k als Funktion des Abstandes von der z -Achse $\frac{\rho}{\rho_0}$ für verschiedene Werte von z und magnetische Feldstärken $|\beta| = 25$ sowie $|\beta| = 50$.

Wir werten γ_k mit Maple aus und erhalten für zwei und drei besetzte Niveaus parallel zum Magnetfeld den in den Abbildungen 3.14 dargestellten Verlauf. Auch hier wechselt γ_k das Vorzeichen nicht, also wird nur die Stärke des Stromes, nicht aber seine Richtung mit dem Abstand von der Symmetrieachse des Systems variiert. Wir merken noch an, dass wir aufgrund des (konstant positiven) Vorzeichens von γ_k erwarten, dass sich das System über den gesamten betrachteten Bereich der magnetischen Feldstärke diamagnetisch verhält.

Schließlich können wir die Verteilung der Stromdichte für zwei oder drei besetzte Niveaus k bestimmen. Ihr Verlauf ist zusammen mit den exakten Ergebnissen für verschiedene Werte von β in den Abbildungen 3.15 gezeigt. Wir erkennen, dass die Lage der Peaks mit der in den exakten Ergebnissen übereinstimmt. Aus dem Ergebnis, das wir für ein beliebiges besetztes Niveau k erhalten hatten, ist das unmittelbar verständlich, da sowohl im CDFT- als auch im exakten Ergebnis der Rand der Dichteverteilung im Niveau k die Lage des Maximums der Stromdichte bestimmt. Allerdings sind für Magnetfelder, die nicht sehr stark sind (in dem Sinne, dass auch Zustände mit $k \neq 0$ besetzt sind) die Peaks in CDFT generell zu schwach ausgeprägt. Das heißt, das System verhält sich in CDFT insgesamt weniger diamagnetisch. Wir hatten zu Beginn dieses Kapitels bereits gesehen, dass dafür die unterschiedlichen Parameter in der hypergeometrischen Funktion verantwortlich sind. Etwas verstärkt wird dieser Effekt noch durch den Verlauf der Funktion γ_k . Allerdings kann dieser alleine die Abweichungen nicht erklären. Insgesamt stellen wir fest, dass für unser System, das in allen drei Raumrichtungen beschränkt und damit quantisiert ist, die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie zwar die Struktur der Stromdichteverteilung qualitativ richtig beschreibt, die Stärke des Stromes aber zu gering wiedergibt. Für sehr starke Felder (wenn nur das unterste Oszillatorniveau parallel zum Magnetfeld besetzt ist) liegt der Fehler unterhalb drei Prozent. Für schwächere Felder ist er deutlich grösser.

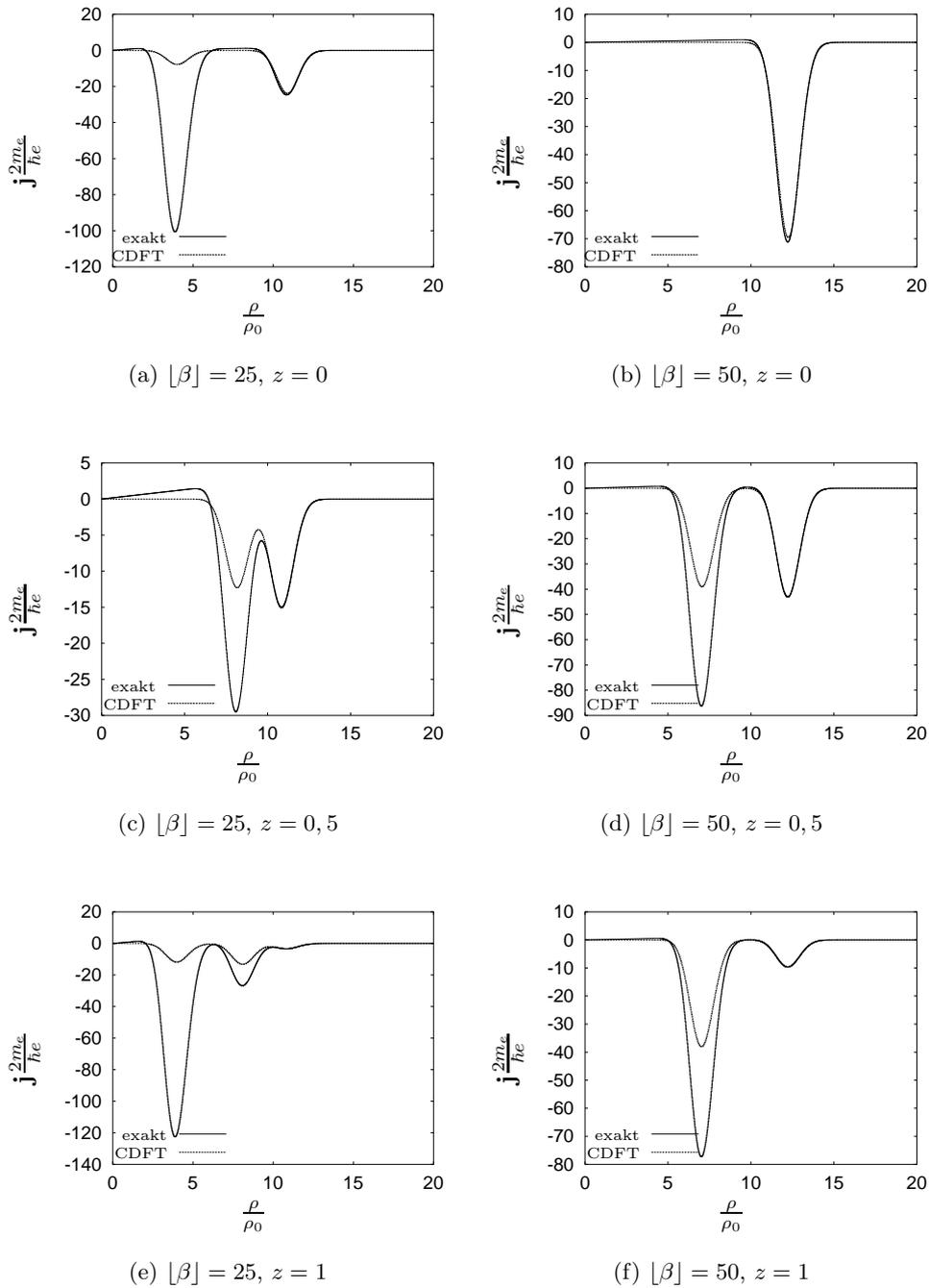


Abbildung 3.15.: Vergleich der exakten Stromverteilung mit dem CDFT-Resultat für $N = 100$ Teilchen als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse für verschiedene Werte von z und magnetische Feldstärken β

3.5.2. Magnetisierung

Wir beginnen mit der Beschreibung der Magnetisierung für ein System in einem Magnetfeld, das so stark ist, dass sich alle Teilchen im untersten Oszillatorniveau parallel zum Magnetfeld befinden. Dann ist die Dichteverteilung durch

$$n(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}\rho_0^2 z_0} \exp\left(-\frac{2z^2}{z_0^2}\right) \left(1 - \frac{1}{N!} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2}\right)^N {}_1F_1\left(N, N+1, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2}\right)\right) \quad (3.58)$$

gegeben.

Wir müssen, um die Magnetisierung zu bestimmen, das Integral $\int_V d^3r (n(\mathbf{r}))^3$ über das vom System eingenommene Volumen V bestimmen. Die Integration über $d\varphi$ ist trivial und liefert einen Faktor 2π . Auch die Integration über dz bereitet keine Probleme. Wir betrachten dazu nur den von z abhängigen Anteil der Dichte und integrieren

$$\frac{1}{z_0} \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\left(-\frac{6z^2}{z_0^2}\right) = \sqrt{\frac{\pi}{6}}. \quad (3.59)$$

Es bleibt also nur noch das Integral über $d\rho$ auszuführen. Wir erkennen, dass der von ρ abhängige Anteil der Dichte nur vom Verhältnis des Abstandes zur charakteristischen Länge ρ_0 abhängt. Also können wir im Integral $x := \frac{\rho}{\rho_0}$ substituieren und erhalten

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} d\rho \rho \left[1 - \frac{1}{N!} \left(\frac{\rho^2}{2\rho_0^2}\right) {}_1F_1\left(N, N+1, -\frac{\rho^2}{2\rho_0^2}\right)\right]^3 \\ = \rho_0^2 \int_0^{\infty} dx x \left[1 - \frac{1}{N!} \left(\frac{x^2}{2}\right) {}_1F_1\left(N, N+1, -\frac{x^2}{2}\right)\right]^3. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Da die Teilchenzahl konstant ist und wir von $x = 0$ bis $x = \infty$ integrieren, ist der Wert des Integrals eine Konstante und hängt insbesondere nicht von der Stärke des Magnetfeldes ab. Wir bezeichnen diesen Wert zunächst mit C_1 und erhalten für das gesuchte Integral

$$\int_V d^3r (n(\mathbf{r}))^3 = \frac{C_1}{2\sqrt{3}\pi^3 \rho_0^4 z_0^2}. \quad (3.61)$$

Schließlich finden wir, dass sich im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie für die Magnetisierung pro Teilchen

$$\mu_M^{\text{CDFT}} = -\mu_B \left(1 - \frac{4\pi C_1}{3\sqrt{3}N} \frac{\lambda^6}{\rho_0^4 z_0^2}\right) \quad (3.62)$$

ergibt. Wir spezialisieren unsere Betrachtung wiederum auf ein sphärisch symmetrisches Oszillatorpotential mit Frequenz ω_0 und können dann den letzten Term in der Magnetisierung durch die effektive Magnetfeldstärke ausdrücken:

$$\frac{\lambda^6}{\rho_0^4 z_0^2} = \frac{2(2 + \beta^2)^2}{\beta^5} \approx \frac{2}{\beta}. \quad (3.63)$$

Insgesamt erhalten wir damit

$$\mu_M^{\text{CDFT}} = -\mu_B \left(1 - \frac{4\pi C_1}{3\sqrt{3}N} \frac{2}{\beta} \right). \quad (3.64)$$

Dieser Ausdruck stimmt nicht mit dem exakten Ausdruck (3.47) überein. Insbesondere beschreibt er die Abhängigkeit der Magnetisierung vom effektiven Magnetfeld falsch.

Bevor wir uns dem Fall mehrerer besetzter Niveaus parallel zum Magnetfeld zuwenden, bemerken wir noch, dass wir die Abhängigkeit der Magnetisierung (3.64) von der Stärke des Magnetfeldes auch ohne Rechnung bestimmen können. Wenn sich alle Teilchen im untersten Oszillatorniveau parallel zum Magnetfeld befinden, dann kann sich mit der Stärke des Magnetfeldes nur die Ausdehnung des Systems in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld ändern, indem sich die charakteristische Länge mit dem Magnetfeld ändert. Da die Dichte senkrecht zum Magnetfeld aber nur vom Verhältnis des Abstandes zur z -Achse zur Länge ρ_0 abhängt, ist das Integral über jede Potenz der Dichte in dieser Ebene im Wesentlichen unabhängig vom Magnetfeld und liefert bis auf eine Konstante lediglich das Quadrat der charakteristischen Länge. Ebenso ist das Integral der Dichteverteilung parallel zum Magnetfeld von diesem unabhängig und liefert eine Konstante mal der charakteristischen Länge z_0 in dieser Richtung. Nun ist die Dichte aber proportional zu $\rho_0^{-2} z_0^{-1}$. Also erhalten wir für das benötigte Integral

$$\int_V d^3r (n(\mathbf{r}))^3 \propto \frac{1}{\rho_0^4 z_0^2} \quad (3.65)$$

und daraus für das sphärisch symmetrische System wiederum das in Gleichung (3.64) gezeigte Verhalten der Magnetisierung als Funktion des effektiven Magnetfeldes.

Nachdem wir die Abhängigkeit der Magnetisierung vom Magnetfeld, wie sie die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie voraussagt, bestimmt haben, bleibt uns, die Konstante C_1 zu berechnen. Wir können das Integral (3.60) mit Maple auswerten, stellen aber fest, dass wir eine obere Grenze angeben müssen, um ein Ergebnis zu erzielen. Wir wählen einen Wert etwas grösser als $(\sqrt{2N-1}+1)\rho_0$, da der höchste besetzte Drehimpulszustand um $\sqrt{2N-1}\rho_0$ zentriert ist und etwa die Ausdehnung ρ_0 besitzt. Für $N = 100$ Teilchen erweist sich $20 \frac{\rho}{\rho_0}$ als geeignete obere Grenze. Ein höherer Wert bringt innerhalb der Rechengenauigkeit keine Verbesserung, verlängert aber die Rechenzeit. Damit erhalten wir für unser System mit 100 Teilchen den Wert $C_1 = 91,64$.

Um mit Hilfe von Gleichung (2.46) die Magnetisierung für ein System mit zwei besetzten Oszillatorniveaus parallel zum Magnetfeld bestimmen zu können, müssen wir zunächst eine Näherung für die Dichteverteilung finden. Eine direkte Berechnung des Integrals $\int d^3r (n(\mathbf{r}))^3$ mit der exakten Dichte liefert in brauchbarer Rechenzeit kein Ergebnis.

Wir versuchen also, die Dichte im Oszillatorniveau k zu nähern. Wie bereits aus dem Graph der Dichteverteilung zu erkennen ist, ähnelt sie stark einer Fermifunktion

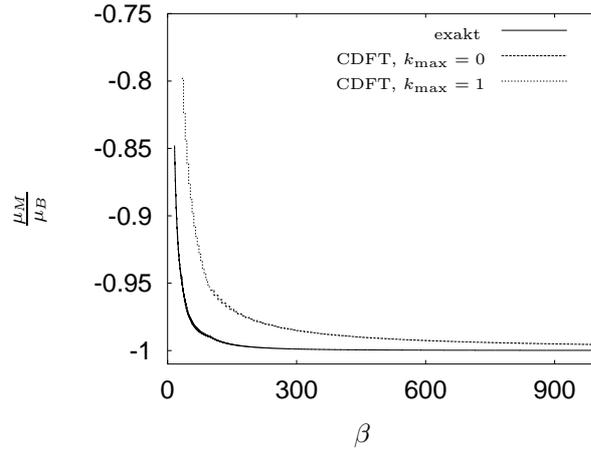


Abbildung 3.16.: Magnetisierung pro Teilchen im sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential als Funktion des effektiven Magnetfeldes. Gezeigt ist der exakte Verlauf der Magnetisierung sowie der Verlauf, den wir mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie bestimmt haben.

und wir versuchen daher, den von ρ abhängigen Teil der Dichte (ohne die Normierung) als

$$\tilde{n}_\rho(\rho) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\rho - \rho_M}{a\rho_0}\right) + 1} \quad (3.66)$$

zu schreiben. Dabei ist ρ_M der Wert von ρ , um den die Dichteverteilung im Einteilchenniveau mit dem höchsten besetzten Drehimpuls zentriert ist, und a entspricht der Steigung der (exakten) Dichteverteilung an diesem Punkt. Wir erhalten aus der exakten Dichteverteilung für a in guter Näherung den Wert $a \approx 0.4$. Zwar ist der exakte Wert von a für verschiedene Parameter M etwas unterschiedlich, liegt aber immer in der Nähe von 0.4. Insgesamt erhalten wir also für die genäherte Dichte \tilde{n}_k im k -ten Oszillatorniveau

$$\tilde{n}_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3} \rho_0^2 z_0} \frac{1}{k! 2^k} H_k\left(\frac{\sqrt{2}z}{z_0}\right) \exp\left(-\frac{2z^2}{z_0^2}\right) \frac{1}{\exp\left(\frac{\rho - \rho_M}{a\rho_0}\right) + 1}. \quad (3.67)$$

Mit der so genäherten Dichteverteilung können wir nun die Magnetisierung des Systems im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie mit Hilfe von Gleichung (2.46) bestimmen. Die erhaltenen Werte sind in Abbildung 3.16 ersichtlich und werden dort mit dem exakten Verlauf der Magnetisierung, den wir in Abschnitt 3.4 diskutiert haben, verglichen.

Wir erkennen, dass wir auch im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie ein diamagnetisches Verhalten des Systems bekommen, die Magnetisierung ist negativ. Allerdings ist ihr Betrag etwas kleiner als im exakten Ergebnis. Dieses Resultat stimmt damit überein, dass wir die Ströme im Rahmen der CDFT zu schwach erhalten haben. Insgesamt finden wir, dass die Abweichung zwischen dem

exakten und dem mit Hilfe der CDFT bestimmten Ergebnis in den betrachteten Bereichen der magnetischen Feldstärke zwischen 0,5% für sehr starke Felder und 15% wenn das Niveau $k = 2$ gerade noch nicht besetzt ist, liegt.

3.6. Diskussion

Wir haben gesehen, dass die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie den Verlauf der Stromdichte und die Magnetisierung als Funktion des äußeren Magnetfeldes im betrachteten System nur ungenau wiedergeben kann. In beiden Fällen stimmen aber die qualitativen Aussagen überein. Die Maxima der Stromdichteverteilung als Funktion des Abstandes von der Symmetrieachse des Systems liegen sowohl in der exakten Lösung als auch im CDFT-Resultat an der selben Stelle. Darüberhinaus ist sowohl in einer exakten Beschreibung als auch in der Beschreibung im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie das System insgesamt diamagnetisch. Allerdings wird die Magnetisierung von der lokalen Näherung der CDFT grundsätzlich unterschätzt. Das System verhält sich nach den Resultaten der CDFT also weniger diamagnetisch. Der Grund dafür ist, dass wir versucht haben, ein aus zweidimensionalen Elektronengasen aufgebautes System durch ein dreidimensionales Elektronengas zu nähern. Im dreidimensionalen Elektronengas im Magnetfeld spielt die Entartung der Landau-Niveaus sowie der Freiheitsgrad parallel zum Magnetfeld eine wesentliche Rolle. Diese Entartung nimmt mit stärker werdendem Magnetfeld zu und damit sinkt der Anteil der mittleren Energie pro Teilchen, der aus der Bewegung parallel zum Magnetfeld resultiert. Wir haben bereits gesehen, dass dieser Effekt dafür verantwortlich ist, dass sich das System schließlich paramagnetisch verhält. In einem exakt zweidimensionalen System (senkrecht zum Magnetfeld) dagegen besitzen die Elektronen keinen Freiheitsgrad parallel zum Magnetfeld. Deswegen kann ein solcher Übergang zu einem paramagnetischen System in zwei Dimensionen nicht stattfinden. Unser Modellsystem verhält sich oberhalb des Überganges zu einem effektiv zweidimensionalen System nur deshalb nicht ideal diamagnetisch ($\mu_M = -\mu_B$) weil die Anwesenheit des äußeren Oszillatorpotentials die Drehimpulsentartung in den Landau-Niveaus aufhebt.

Auch der Versuch, von vorneherein ein zweidimensionales freies Elektronengas im Magnetfeld zu betrachten und damit das inhomogene System im sehr starken Magnetfeld zu nähern, liefert nicht das richtige Ergebnis. In einem zweidimensionalen freien Elektronengas in einem Magnetfeld, das so stark ist, dass alle Elektronen auf das unterste Landau-Niveau beschränkt sind, ist die Energie jedes Elektrons, also auch das chemische Potential $\frac{\hbar\omega_c}{2}$. Wir erhalten dann, dass γ_k in diesem Fall unabhängig von der Dichte ist: $\gamma_k = 1$. Damit finden wir für die Magnetisierung pro Teilchen $\mu_M^{\text{CDFT,2D}} = -\mu_B$. Insgesamt heißt das, dass wir im Rahmen der Stromdichtefunktionaltheorie die Magnetisierung eines auch parallel zum Magnetfeld räumlich beschränkten und damit quantisierten Systems für sehr starke Felder (in dem Sinn, dass sich das System wie ein zweidimensionales System verhält) nur im Grenzfall $\beta \rightarrow \infty$ richtig beschreiben können. Für endliche Feldstärken liefert die Stromdichtefunktionaltheorie in diesem Fall jedoch ein zumindest quantitativ falsches Ergebnis.

4. Zusammenfassung und Ausblick

Wir haben in dieser Arbeit untersucht, ob sich die orbitalen magnetischen Eigenschaften eines einfachen inhomogenen Systems, das in allen drei Raumrichtungen beschränkt ist, im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie beschreiben lassen.

Dazu haben wir zunächst einen universellen Zusammenhang zwischen Strom und Dichte in inhomogenen Systemen, der von Vignale und Skudlarski [10] hergeleitet wurde, ausführlich nachvollzogen. Dieser Ausdruck hat es uns gestattet, die Stromdichte eines Systems ohne Kenntnis der Wellenfunktionen ausgehend von der Dichte des Systems zu bestimmen.

Wir haben mit Hilfe dieses Ausdrucks die orbitale Magnetisierung eines Gases nicht wechselwirkender Elektronen, die auf das unterste Landau-Niveau beschränkt sind, als ein explizites Funktional der Dichte darstellen können. Damit war es möglich, den orbitalen Beitrag der Magnetisierung eines homogenen, beschränkten Elektrogases als Funktion des äußeren Magnetfeldes zu bestimmen. Wir haben gesehen, dass sich die Magnetisierung des Systems aus zwei konkurrierenden Teilen zusammensetzt. Verantwortlich für den diamagnetischen Anteil ist dabei die Oszillatorenergie der Elektronen, deren Anteil pro Teilchen gleich der halben Zyklotronenergie ist. Dieser Beitrag zur Magnetisierung pro Teilchen ist konstant $-\mu_B$, solange alle Teilchen auf das unterste Landau-Niveau beschränkt bleiben. Daneben wächst aber mit zunehmendem Magnetfeld auch die Entartung der Landau-Niveaus und damit sinkt der Anteil der mittleren Energie pro Teilchen, der seinem Zustand parallel zum Magnetfeld zuzuordnen ist. Wir haben gesehen, dass für sehr starke Magnetfelder der Beitrag aus der Oszillatorenergie überwiegt. Das System verhält sich diamagnetisch. Ist das Magnetfeld schwächer, so gewinnt der paramagnetische Anteil an Bedeutung. Für magnetische Feldstärken in der Nähe des kritischen Wertes, der dadurch definiert ist, dass sich alle Teilchen im untersten Landau-Niveau befinden sollen, verhält sich das System paramagnetisch. Wir haben diese Ergebnisse mit Hilfe einer thermodynamischen Berechnung der Magnetisierung überprüft und gefunden, dass die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie die orbitale Magnetisierung eines solchen Systems exakt beschreiben kann.

Ausgehend von den bekannten Einteilchenenergien und -zuständen unabhängiger Elektronen in einem dreidimensionalen harmonischen Oszillator-Potential im Magnetfeld haben wir den Grundzustand eines so eingeschlossenen nicht wechselwirkenden Vielteilchensystems konstruiert. Wir haben dazu zunächst untersucht, welche Einteilchenzustände in bestimmten Bereichen der magnetischen Feldstärke besetzt sind, sowie die Dichte- und Stromdichteverteilung des Systems bestimmt. Davon ausgehend konnten wir explizite Ausdrücke für die Abhängigkeit der inneren Energie von der Stärke des Magnetfeldes angeben und damit die Magnetisierung exakt bestimm-

men. Wir haben gefunden, dass es einen ausgezeichneten Wert für die magnetische Feldstärke gibt, ab dem sich das System effektiv wie ein zweidimensionales System verhält. Der Grund dafür ist die räumliche Beschränkung und damit Quantisierung des Systems parallel zum Magnetfeld.

Mit Hilfe des universellen Zusammenhangs zwischen Dichte und Stromdichte haben wir die Stromverteilung im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie bestimmt. Wir haben diese Ergebnisse mit der exakten Verteilung der Stromdichte verglichen und gefunden, dass die betrachtete Näherung die qualitative Verteilung der Stromdichte richtig wiedergibt. Sie kann jedoch keine quantitativ zutreffenden Aussagen machen. Die im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie bestimmten Ströme sind im Vergleich zum exakten Ergebnis grundsätzlich zu schwach.

Wir haben schließlich ausgehend von der exakt bekannten Dichteverteilung das mittlere magnetische Moment pro Teilchen bestimmt, wie es sich aus dem funktionalen Zusammenhang zwischen Dichte und Magnetisierung ergibt. Wir haben auch hier gefunden, dass die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie das qualitative Verhalten der Magnetisierung als Funktion des äusseren Magnetfeldes richtig wiedergeben kann. Allerdings stimmen weder die Abhängigkeit der Magnetisierung von der Stärke des externen Feldes noch die quantitativen Werte mit den exakten Ergebnissen einer thermodynamischen Rechnung überein. Insgesamt haben wir erhalten, dass sich das System sowohl in einer exakten Beschreibung als auch im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie diamagnetisch verhält. Dabei wird aber grundsätzlich der Betrag der Magnetisierung von der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie zu gering angegeben. Das heißt, dass in dieser Beschreibung die paramagnetischen Effekte zu sehr betont werden. Der Grund für dieses Verhalten, das wir auch bei der Beschreibung der Stromdichteverteilung gefunden haben, ist, dass wir versucht haben, ein System, das eher aus aufeinander geschichteten zweidimensionalen Systemen besteht lokal durch ein dreidimensionales homogenes Elektronengas zu nähern.

Zusammenfassend können wir also feststellen, dass ein in allen drei Raumrichtungen quantisiertes System mit Hilfe der im Rahmen der lokalen Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie gefundenen Zusammenhänge quantitativ nur unzureichend beschrieben werden kann. Die qualitativen Aussagen der Theorie – Verteilung der Stromdichte und generelles Verhalten der Magnetisierung – beschreiben das System aber in groben Zügen richtig.

Wir haben die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie auf ein in allen drei Raumrichtungen beschränktes, nicht wechselwirkendes Vielteilchensystem angewendet. Zunächst ergibt sich daraus die Fragestellung, ob ein System, das in eine oder mehrere Richtungen offen ist (in dem Sinn, dass in diesen Richtungen die Einzelchenzustände nicht diskret quantisiert sind) besser durch die lokale Näherung der Stromdichtefunktionaltheorie beschrieben werden kann. In diesem Zusammenhang ist es auch von Interesse, ein System zu diskutieren, bei dem mehrere Oszillatorniveaus senkrecht zum Magnetfeld und dem entsprechend viele Niveaus parallel dazu besetzt sind. Darüberhinaus stellt sich auch die Frage nach dem Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

A. Mathematischer Anhang

A.1. Definition der konfluenten hypergeometrischen Funktion und Beweis der Summe über die Einteilchendichten

Wir geben hier zunächst eine Definition der konfluenten hypergeometrischen Funktion ${}_1F_1$ an, wie sie in [13] zu finden ist. Sie wird dort über eine Potenzreihe definiert:

$$\begin{aligned} {}_1F_1(a, c, z) &:= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!} \\ &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n) z^n}{\Gamma(c+n) n!} \end{aligned} \tag{A.1}$$

Hier ist $\Gamma(a)$ die Gamma-Funktion und $(a)_n$ ist ein Pochhammer-Symbol, das sich durch die Gamma-Funktion darstellen lässt [13]:

$$(a)_n = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} \tag{A.2}$$

Diese Reihe konvergiert für alle z , solange $c \neq m$ mit $m \in \mathbb{N}_0$ gilt. In unseren Rechnungen ist diese Bedingung stets erfüllt.

Wenn, wie in unserem Fall immer, $a, c \in \mathbb{N}$ und zudem $c = a + 1$ gilt, dann können wir den Quotienten der Pochhammer-Symbole vereinfachen und erhalten für ${}_1F_1$

$${}_1F_1(a, a+1, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a}{a+n} \frac{z^n}{n!} \tag{A.3}$$

Wir beweisen nun ausgehend von dieser Darstellung der konfluenten hypergeometrischen Funktion die Summenformel (3.39) durch vollständige Induktion über M .

Sei also zunächst $M = 0$. Dann gilt

$$\sum_{m=0}^M \frac{1}{m!} x^m \exp(-x) = \exp(-x) \tag{A.4}$$

Andererseits finden wir

$$\begin{aligned}
 1 - \frac{x^{M+1}}{(M+1)!} {}_1F_1(M+1, M+2, -x) &= 1 - x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{1+n} \frac{(-x)^n}{n!} \\
 &= 1 + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x)^{n+1}}{(n+1)!} \\
 &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-x)^n}{n!} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x)^n}{n!} = \exp(-x)
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

Für $M = 0$ haben wir die Summenformel also gezeigt.

Es bleibt, die Richtigkeit von (3.39) für den Schritt von M nach $M+1$ zu beweisen.

Es gilt

$$\begin{aligned}
 \sum_{m=0}^{M+1} \frac{1}{m!} x^m \exp(-x) &= \sum_{m=0}^M \frac{1}{m!} x^m \exp(-x) + \frac{1}{(M+1)!} x^{M+1} \exp(-x) \\
 &= 1 - \frac{x^{M+1}}{(M+1)!} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{M+1}{M+1+n} - 1 \right) \frac{(-x)^n}{n!} \\
 &= 1 - \frac{x^{M+1}}{(M+1)!} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{M+1}{M+1+n} - 1 \right) \frac{(-x)^n}{n!} \\
 &= 1 - \frac{x^{M+1}}{(M+1)!} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{M+1}{M+2+n} - 1 \right) \frac{(-x)^{n+1}}{(n+1)!} \\
 &= 1 - \frac{x^{M+2}}{(M+1)!} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{M+2+n} \frac{(-x)^n}{(n+1)!} \\
 &= 1 - \frac{x^{M+2}}{(M+2)!} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{M+2}{M+2+n} \frac{(-x)^n}{n!} \\
 &= 1 - \frac{x^{M+2}}{(M+2)!} {}_1F_1(M+2, M+3, -x)
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

Damit haben wir die Summenformel (3.39) für alle $M \in \mathbb{N}_0$ gezeigt.

A.2. Ableitung der konfluenten hypergeometrischen Funktion

Wir berechnen hier ausgehend von ihrer Reihendarstellung die Ableitung der konfluenten hypergeometrischen Funktion ${}_1F_1$ für den Fall, dass die Parameter a und b natürliche Zahlen sind und die Bedingung $b = a + 1$ erfüllen. Diese Einschränkung spielt für unsere Rechnung keine Rolle, da in unserem Fall a immer der Eigenwert des höchsten besetzten Drehimpulszustandes ist und auch $b = a + 1$ stets erfüllt ist. Wir benötigen diese beiden Spezialisierungen, um die konfluente hypergeometrische Funktion durch diese einfache Reihe darstellen zu können.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x} {}_1F_1(a, a + 1, x) &= \frac{\partial}{\partial x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a}{a+k} \frac{x^k}{k!} \\
 &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a}{a+k} \frac{x^{k-1}}{(k-1)!} \\
 &= \frac{a}{a+1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a+1}{a+k+1} \frac{x^k}{k!} \\
 &= \frac{a}{a+1} {}_1F_1(a+1, a+2, x)
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

B. Danksagung

Ich möchte an dieser Stelle einigen Menschen danken, die ganz wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein herzlicher Dank gilt zunächst Prof. Dr. Oleg Pankratov für die Vergabe des Themas und die Betreuung der Arbeit sowie für die Freiheit bei der Bearbeitung. Vor allem aber dafür, dass er mir in anregenden Diskussionen stets ein sehr physikalisches Verständnis der behandelten Probleme vermittelt hat.

Ich möchte mich bei Stefanie Gaile, Ralf Stubner und Alexander Mattausch für die freundliche Aufnahme, ihre stete Bereitschaft, bei Problemen aller Art zu helfen und nicht zuletzt für gewaltige Mengen Tee bedanken.

Vor allem aber möchte ich mich bei meinen Eltern für die keineswegs nur materielle Unterstützung bei meinem Studium bedanken.

Literaturverzeichnis

- [1] S. Reimann and M. Manninen, *Reviews of Modern Physics* **74**, 1283 (2002).
- [2] W.-C. Tan and J. Inkson, *Semiconductor Science and Technology* **11**, 1635 (1996).
- [3] W.-C. Tan and J. Inkson, *Physical Review B* **60**, 5626 (1999).
- [4] J. Lin and G. Guo, *Physical Review B* **65**, 035304 (2001).
- [5] S. Viefers *et al.*, *Physical Review B* **62**, 10668 (2000).
- [6] D. Lai, *Reviews of Modern Physics* **73**, 629 (2001).
- [7] G. Vignale and M. Rasolt, *Physical Review B* **37**, 10685 (1988).
- [8] P. Hohenberg and W. Kohn, *Physical Review* **136**, B864 (1964).
- [9] W. Kohn and L. Sham, *Physical Review* **140**, A1133 (1965).
- [10] G. Vignale and P. Skudlarski, *Physical Review B* **46**, 10232 (1992).
- [11] C. Kittel, *Quantentheorie der Festkörper* (R. Oldenbourg, München, 1970), s. 235.
- [12] L. Landau and E. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, 5 ed. (Akademie-Verlag, Berlin, 1979), Vol. V, Statistische Physik Teil 1.
- [13] W. Magnus, F. Oberhettinger, and R. Soni, *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*, 3 ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1966).

Abbildungsverzeichnis

2.1.	Einteilchenenergie in den Landau-Niveaus $l = 0, 1, 2$ als Funktion des Impulses k	10
2.2.	Magnetisierung des homogenen Elektronengases pro Teilchen als Funktion des Verhältnisses der Fermienergie des dreidimensionalen Elektronengases ohne Magnetfeld zur Zyklotronenergie. Bei konstanter Dichte ist dieses Verhältnis umgekehrt proportional zur magnetischen Feldstärke B	15
3.1.	Dichteverteilung (in beliebigen Einheiten) im Zustand $ k = 0, m = 10\rangle$ in der Ebene $z = 0$	22
3.2.	Dichteverteilung in den Zuständen $ m, k \in \{0, 1, 2\}\rangle$ parallel zum Magnetfeld bei $\rho = const. \neq 0$. Die Dichte ist bezüglich $n_{m,k=0}(\rho, z = 0) = 1$ normiert.	23
3.3.	Stromdichteverteilung (in beliebigen Einheiten) im Zustand $ m = 10, k = 0\rangle$ als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse ($\omega_\rho/\omega_c = 1/10$).	24
3.4.	Einteilchenenergie $\epsilon'_{m,k}$ als Funktion des Drehimpulses m in den Niveaus $k = 0 \dots 4$. In der Abbildung ist $m_{\max} = 10$ und $\beta = 10, 45$	26
3.5.	Dichteverteilung für $N = 100$ Teilchen im Zustand $k = 0$ als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse in der Ebene $z = 0$	30
3.6.	Dichteverteilung für $N = 100$ Teilchen als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse für verschiedene Werte von z und magnetische Feldstärken β . In der linken Spalte ist $k_{\max} = 2$, in der rechten $k_{\max} = 1$	31
3.7.	Stromdichteverteilung für $N = 100$ Teilchen im Zustand $k = 0$ als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse in der Ebene $z = 0$. Das Inset zeigt den schwachen Strom, der im Inneren des Systems in entgegengesetzter Richtung zum Strom am Rand des Systems fließt.	32
3.8.	Stromverteilung für $N = 100$ Teilchen als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse für verschiedene Werte von z und magnetische Feldstärken β . In der linken Spalte ist $k_{\max} = 2$, in der rechten $k_{\max} = 1$	33
3.9.	Mittlere Energie pro Teilchen abzüglich der Nullpunktenergie als Funktion des effektiven Magnetfeldes β im sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential ($\omega_\rho = \omega_z \equiv \omega_0$). Das Inset zeigt den Verlauf bei zwei besetzten Niveaus und den Übergang zu einem besetzten Niveau.	35
3.10.	Konfigurationsabhängiger Anteil der Fermienergie als Funktion des effektiven Magnetfeldes β im sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential ($\omega_\rho = \omega_z \equiv \omega_0$). Das Inset zeigt das Verhalten bei zwei besetzten Niveaus $k = 0$ und $k = 1$ sowie den Übergang zu einem besetzten Niveau $k = 0$	36

3.11. Magnetisierung pro Teilchen im sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential als Funktion des effektiven Magnetfeldes	38
3.12. γ_k als Funktion der Koordinate ρ bei $z = 0$ für verschieden starke Magnetfelder. In allen gezeigten Fällen ist $k_{\max} = 0$	41
3.13. Auf den Maximalwert der exakten Stromdichte normierte Differenz zwischen der exakten Stromdichte und der Stromdichte, die wir in CDFT erhalten, als Funktion der Koordinate ρ bei $z = 0$ für verschieden starke Magnetfelder. In allen gezeigten Fällen ist $k_{\max} = 0$	41
3.14. Verlauf von γ_k als Funktion des Abstandes von der z -Achse $\frac{\rho}{\rho_0}$ für verschiedene Werte von z und magnetische Feldstärken $[\beta] = 25$ sowie $[\beta] = 50$	42
3.15. Vergleich der exakten Stromverteilung mit dem CDFT-Resultat für $N = 100$ Teilchen als Funktion des auf ρ_0 normierten Abstandes von der z -Achse für verschiedene Werte von z und magnetische Feldstärken β	43
3.16. Magnetisierung pro Teilchen im sphärisch symmetrischen Oszillatorpotential als Funktion des effektiven Magnetfeldes. Gezeigt ist der exakte Verlauf der Magnetisierung sowie der Verlauf, den wir mit Hilfe der Stromdichtefunktionaltheorie bestimmt haben.	46

Erklärung

Hiermit bestätige ich, dass ich diese Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Erlangen, den 23. Juli 2004

Marc André Siegmund