

DISS. ETH Nr. 19713

**TWO PROBLEMS IN TRANSPORT THEORY:
LOCALIZATION AND FRICTION**

A B H A N D L U N G
zur Erlangung des Titels

DOKTOR DER WISSENSCHAFTEN

der

ETH ZÜRICH

vorgelegt von

DANIEL EGLI

dipl. math. Universität Zürich

geboren am 10. August 1981

von Zell, ZH und Bertschikon, ZH

Angenommen auf Antrag von

Prof. Dr. Jürg Fröhlich
Prof. Dr. Gian Michele Graf

2011

ABSTRACT. Transport theory is a broad field. In this thesis, we limit the scope of our investigations to two aspects of transport theory that are characterized by the very lack of any transport.

In a first part, we study the phenomenon that an electron traveling in a disordered solid can get trapped in exponentially sharply localized orbitals—it experiences so-called *Anderson localization*. Our investigation revolves around the series of alloys $\text{Eu}_x\text{Ca}_{1-x}\text{B}_6$ for which our experimental colleagues have found interesting transport properties. Specifically, they found a metal-insulator transition as the alloying parameter x is lowered below $x \simeq 0.3$ and observed colossal magnetoresistance effects for x in a range between 0.2 and 0.3. We show that these observations can be understood in terms of a localization-delocalization transition. We introduce a model for conduction electrons of $\text{Eu}_x\text{Ca}_{1-x}\text{B}_6$ —simplified to the extent that we can treat some aspects of it related to Anderson localization in a mathematically rigorous way—reproducing the main features observed in the experiments.

Europium has a half-filled $4f$ -shell and has therefore a large magnetic moment, whereas Calcium is non-magnetic. We place Europium and Calcium atoms on a cubic lattice according to a site percolation process with parameter x . Because of the experimental fact that the conduction band is very weakly populated we neglect electron-electron interactions and consider a one-particle Hamiltonian. In a Born-Oppenheimer approximation we freeze the dynamics of the magnetic moments of the Europium atoms, and because the moments are quite large we treat them as classical vectors. We propose to describe the exchange coupling of a conduction electron to the magnetic moments of the Europium atoms by a Zeeman term. The disorder comes about because the direction of the magnetic moments of Europium atoms that do not lie in a connected cluster will—in the absence of an external magnetic field—vary randomly.

We investigate various distributions of the magnetic moments: For temperatures above T_{Curie} and for pure EuB_6 , neighboring magnetic moments are only weakly correlated, and we model this regime with a Gibbs distribution that slightly favors ferromagnetic alignment of neighboring moments. At low temperatures and for x below the percolation threshold, we expect ferromagnetic alignment of the Europium moments across connected clusters to prevail. Hence we assume that the directions of magnetic moments are fixed across connected Europium clusters but vary randomly over distinct clusters.

In these regimes, we prove Anderson localization, that is, almost-sure pure point spectrum of the Hamiltonian with exponentially decaying eigenfunctions, for energies in the band tails.

Finally, we show that the case of a large external magnetic field can be modeled with a Bernoulli-type random Schrödinger operator, where the random potential at a site takes values ± 1 . Here we prove a weaker result, namely absence of diffusion for energies in the Lifshitz tails and outside a set of energies of very small measure.

In the second part of this thesis, we discuss another hindrance to transport, namely *friction*. We study the motion of a tracer particle that interacts with a dispersive medium, in our case a Bose-Einstein condensate. For the sake of mathematical rigor, we look at the case of a very heavy tracer particle in a very dense, non-interacting Bose gas. We argue heuristically that this mean-field limit corresponds to a classical limit and that the quantum dynamics reduces to a classical system of Hamiltonian equations of motion. We expect that the particle experiences friction by emission of Cerenkov radiation of gapless (Goldstone) modes into the Bose gas.

For these—as it turns out—semi-linear integro-differential equations describing the dynamics of the tracer particle and the medium, we prove that the particle velocity v_t decays like $|v_t| \lesssim t^{-1-\varepsilon}$ as $t \rightarrow \infty$, for some $\varepsilon > 0$, and that the gas forms a splash that follows the position of the particle. In particular, the decay of the particle speed is integrable and hence the particle comes to rest after having traveled a finite distance. We prove this result by expanding the propagator around its instantaneous value at a large but fixed time, and using asymptotic expansions of the resolvent of Schrödinger operators, standard dispersive estimates, and a contraction principle.

KURZFASSUNG. Die Transporttheorie ist ein weites Feld. Deshalb schränken wir uns in dieser Dissertation auf die Behandlung von zwei Aspekten des Transports ein, die gerade dadurch charakterisiert sind, dass gar kein Transport stattfindet.

In einem ersten Teil untersuchen wir die Quantendynamik von Elektronen, die sich in einem ungeordneten Festkörper bewegen und in exponentiell genau lokalisierten Orbitalen gefangen werden — man spricht dann von *Anderson-Lokalisierung*. Unsere Untersuchung dreht sich um die Reihe von Legierungen $\text{Eu}_x\text{Ca}_{1-x}\text{B}_6$, für die unsere Kollegen aus der Experimentalphysik interessante Transporteigenschaften gefunden haben. Konkret haben sie einen Metall-Isolator-Übergang gefunden, sobald der Legierungsparameter x unter $x \simeq 0.3$ fällt. Ausserdem haben sie für x in einem Bereich zwischen 0.2 und 0.3 kolossalen Magnetwiderstand beobachtet. Wir werden aufzeigen, dass diese Effekte im Rahmen eines Lokalisierungs-Delokalisierungsübergangs verstanden werden können. Dazu führen wir ein Modell für Leitungselektronen in $\text{Eu}_x\text{Ca}_{1-x}\text{B}_6$ ein, das so weit vereinfacht ist, dass wir einige seiner Eigenschaften mathematisch streng behandeln können, das aber trotzdem die wesentlichen Züge der Experimente wiedergibt.

Europium hat eine halbgefüllte $4f$ -Schale, weshalb es ein grosses magnetisches Moment hat, wohingegen Kalzium nichtmagnetisch ist. Wir setzen Europium- und Kalziumatome auf ein kubisches Gitter gemäss einem Perkulationsprozess mit Parameter x . Weil, wie Experimente zeigen, das Leitungsband sehr schwach gefüllt ist, vernachlässigen wir Wechselwirkungen der Elektronen untereinander und betrachten einen Einteilchen-Hamilton-Operator. In der Born-Oppenheimer-Näherung frieren wir die Dynamik der magnetischen Momente der Europiumatome ein, und weil die Momente recht gross sind, behandeln wir sie als klassische Vektoren. Die Austauschkopplung zwischen einem Leitungselektron und dem magnetischen Moment eines Europiumatoms beschreiben wir mit einem Zeemanterm. Die Unordnung kommt daher, dass die Richtung der magnetischen Momente der Europiumatome, die nicht in einem zusammenhängenden Cluster liegen, zufällig variiert.

Wir werden verschiedene Verteilungen für die magnetischen Momente untersuchen: Bei Temperaturen über T_{Curie} des reinen EuB_6 sind benachbarte magnetische Momente nur schwach korreliert, weshalb wir diesen Parameterbereich mit einer Gibbsverteilung modellieren, die ferromagnetische Anordnung benachbarter Momente leicht bevorzugt. Bei tiefen Temperaturen und für x unterhalb der Perkulationsschwelle erwarten wir ferromagnetische Ordnung der Momente in einem zusammenhängenden Europiumcluster. Wir nehmen also an, dass die Richtung der magnetischen Momente in einem Europiumcluster fixiert ist, aber zwischen verschiedenen Clustern zufällig ändert.

In diesen Bereichen beweisen wir Anderson-Lokalisierung, das heisst fast sicher reines Punktspektrum des Hamilton-Operators mit exponentiell lokalisierten Eigenfunktionen für Energien nahe der Ränder des Leitungsbandes.

Schliesslich zeigen wir, dass sich der Fall eines grossen äusseren magnetischen Feldes auf einen Bernoulli-Schrödinger-Operator zurückführen lässt, bei dem das Zufallspotential an jedem Gitterplatz die Werte ± 1 annehmen kann. In diesem Falle beweisen wir etwas weniger, nämlich Abwesenheit von Diffusion für Energien in den Lifshitz-Rändern und ausserhalb einer Menge von Energien von sehr kleinem Mass.

Im zweiten Teil dieser Dissertation diskutieren wir ein weiteres Hindernis für Transport, nämlich *Reibung*. Wir analysieren ein Teilchen das mit einem dispergierendem Medium wechselwirkt, in unserem Fall mit einem Bose-Einstein-Kondensat. Aus Gründen der mathematischen Strenge schauen wir uns den Fall eines sehr schweren Teilchens in einem sehr dichten, nicht wechselwirkenden Bose-Gas an. Wir argumentieren heuristisch, dass dieser Molekularfeld-Limes einem klassischen Limes entspricht und dass die Quantendynamik so zu einem System von klassischen Hamiltongleichungen führt. Wir erwarten, dass das Teilchen durch Aussenden von Cerenkovstrahlung von Goldstone-Moden in das Bose-Gas Reibung erfährt.

Für die — wie es sich herausstellt — semilinearen Integro-Differentialgleichungen, die die Dynamik des Teilchens und des Mediums beschreiben, beweisen wir, dass die Geschwindigkeit des Teilchens wie $v_t \lesssim t^{-1-\varepsilon}$, $\varepsilon > 0$ abnimmt, wenn $t \rightarrow \infty$, und dass das Gas eine Wolke bildet, die der Position des Teilchens folgt. Insbesondere ist die zeitliche Abnahme der Teilchengeschwindigkeit integrierbar, weshalb das Teilchen schliesslich zur Ruhe kommt, nachdem es eine endliche Strecke zurückgelegt hat. Wir beweisen dieses Resultat, indem wir den Propagator um seinen instantanen Wert zu einer grossen aber festen Zeit entwickeln, und indem wir asymptotische Entwicklungen der Resolvente eines Schrödinger-Operators, gewisse Streuabschätzungen und ein Kontraktionsprinzip benützen.