6. Elektrontransport und elektrischer Widerstand

<u>Problem</u>: Ladungstransport unter dem Einfluß eines elektrischen Felds und der Elektron-Phonon-Streuung

6.1. Strom als beobachtbare Größe

Def. in Zweiter Quantisierung:

$$\vec{j} = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{n_1 n_2} \varphi_{n_1}^*(\vec{r})\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)\varphi_{n_2}(r)\, a_{n_1}^+ a_{n_2} + h.a.$$

ist Stromdichteoperator (m ist <u>nackte</u> El-Masse)

$\vec{j}$ ist unsere Observable im elektromagnetischen Feld (A,ϕ)

A) $\vec{A} = \vec{A}_{int} + \vec{A}_{ext}$

von den intern Ladungen hervorgerufen

klein

von außen angelegt

weil stationäres Feld von außen angelegt wird alles in ϕ gepackt

$\vec{A}_{ext} = 0$

ϕ) $\phi = \phi_{int} + \phi_{ext}$

Coulomb-WW (müßte in $\underline{H}$)

$\phi_{ext} = -\vec{r} \cdot \vec{E}_{ext}$ (Ansatz)

$\vec{E}_{ext} = -\vec{\nabla} \phi_{ext} = \vec{E}_{ext}$ ✓

Wechselwirkungsenergie f. $\underline{H}$:

$q \phi_{ext}(\vec{r})$

$$H = q \phi_{ext}(\vec{r}) \longrightarrow \underline{H} = q \sum_{n_1 n_2} \varphi_{n_1}^*(\vec{r}) \phi_{ext}(\vec{r}) \varphi_{n_2}(\vec{r})$$

$a_{n_1}^+ a_{n_2}$

um die Observable Strom zu bestimmen, sehen wir uns $\vec{j}$ f. $\vec{A} = 0$ an:

$$\vec{j} = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{k_1 k_2} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}_1\vec{r}} u_{k_1}(\vec{r})}_{\text{Bloch funktion}^*} \vec{p} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}} u_{k_2}(\vec{r})}_{\text{Blochfunktion}} a^+_{k_1}(t) a_{k_2}(t) \quad + \text{h.a.}$$

1 Band

$$\vec{p}\left(e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}} u_{k_2}(r)\right) = \hbar \vec{k}_2\, e^{i\vec{k}_2\vec{r}} u_{k_2}(r) + e^{i\vec{k}_2\vec{r}}\, \vec{p}\, u_{k_2}(r)$$

$$\uparrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r$$

$$\vec{j} = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{k_1 k_2}\frac{1}{V} e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{r}} a^+_{k_1} a_{k_2}\left(\hbar \vec{k}_2\, u^*_{k_1}(r) u_{k_2}(r) + \frac{\hbar}{i} u^*_{k_1}(r)\vec{\nabla}_r u_{k_2}(\vec{r})\right) + \text{h.a.}$$

müssen 2 Mittelwerte nehmen:

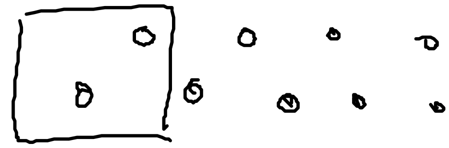
räumliche und quantenmechanische

a) makroskopische Mittelung

da $u_k(\vec{r})$ auf atomarer Skala variiert wird bei einer Messung das Meßgerät darüber mitteln (i.a.)

daher mitteln wir Strom über 1. El-Zelle

$$\langle A \rangle_{R_n} = \frac{1}{\Omega_0}\int A(\vec{r}-\vec{r}\,')\, d^3r' \Big|_{\vec{r}=\vec{R}_n}$$



Ω_0

→ Ortsabhängigkeit nur auf Skala $\vec{R}_n$ ohne mikroskopische Info.

$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, u_k(\vec{r})$, $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ wird über Zelle konstant gehalten

daher Mittelung nur über $u_k(\vec{r})$

(1) $\langle u^*_{k_1}(r)\, u_{k_2}(r)\rangle = \frac{1}{\Omega_0}\int d^3r'\, u^*_{k_1}(\vec{r}-\vec{r}\,')\, u_{k_2}(\vec{r}-\vec{r}\,')$

$T = \vec{R}_n \to \vec{r}$ weglassen

$= \frac{1}{\Omega_0}\int d^3r'\, u^*_{k_1}(\vec{r}\,')\, u_{k_2}(\vec{r}\,') = 1$

$k_1 \approx 0 \approx k_2$ an Γ Pkt

(2) $\frac{1}{\Omega_0}\langle u^*_{k_1}(\vec{r})\, \vec{\nabla}_r\, u_{k_2}(\vec{r})\rangle$

ÜA: $\frac{\hbar}{im}\int d^3r\, u^*_{k_1}(\vec{r})\, \vec{\nabla}_r\, u_{k_2}(\vec{r}) =$

$$-\frac{\hbar}{m}\vec{k}_2 + \left(\frac{\vec{\nabla}_{k_2}\varepsilon_{k_2}}{\hbar}\right)\int d^3r\, u^*_{k_1}(r)\, u_{k_2}(r) + \left(\frac{\varepsilon_{k_2}-\varepsilon_{k_1}}{\hbar}\right)\int d^3r\, u^*_{k_1}(r)\,\vec{\nabla}_{k_2} u_{k_2}(r)$$

f. räumlich homogenes System $j(\cancel{x}, t)$

$$\vec{j} \sim \frac{e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\cdot\vec{r}}}{V}\, a^+_{k_1} a_{k_2}$$

fordern $k_1 = k_2 \rightarrow \vec{j}(\cancel{x}, t)$

ist konsistent mit einem räumlich konstanten Feld,

$(a^+_{k_1} a_{k_2} \rightarrow \delta_{k_1 k_2}$ an Bewegungsgl.$)$

<u>quantenmechanisch Mittlg.</u>

$$\vec{j} = \frac{q}{m^*}\frac{1}{V}\sum_k \hbar k\, \sigma_k \,, \quad \sigma_k = \langle a^+_k a_k \rangle$$

$$\vec{\nabla}_k \varepsilon_k = \vec{\nabla}_k \frac{k^2\hbar^2}{2m^*}$$

Strom als Summe über alle mgl. El-Zustände $\left(\sum_k\right)$ mit der Wahrscheinlichkeit σ_k besetzt vorzufinden und mit den jeweiligen Geschwind. $\frac{\hbar k}{m^*}$ multipliziert.

aktuell: Spintronik um neben den Ladungsfreiheitsgrad des Elektrons auch Spin zu nutzen

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, u_k(r)\, \underline{\underline{\chi_{\uparrow(\downarrow)}}}$$

analoger Formalismus

6.2. Elektron-Feld Wechselwirkung (Hamiltonian)

$$\underline{H} = \underline{H_0} + \underline{H}_{el-Feld} + \underline{H}_{el-ph}$$

freie El - Phonon

Elektron-Feld WW

El-Ph-Wechselwirkung

$$\underline{H}_{el-Feld} = \underline{\underline{q}} \sum_{k_1 k_2} \frac{1}{V} \int d^3r\, e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}}\, u_0^*(\vec{r}) \left(\underline{\underline{-\vec{r}\cdot\vec{E}_{(ext)}}}\right) e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}}\, u_0(\vec{r})\; a_{k_1}^{+} a_{k_2}$$

$$\underline{\underline{}} \;\hat{=}\; q\,\phi$$

$$-\vec{r}\cdot\vec{E}\, e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}} = i\,\vec{E}\cdot\vec{\nabla}_{k_2}\, e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}},$$ + partielle Integration bzgl. k_2

$$\underline{H}_{el\text{-}Feld} = \underbrace{\frac{q}{V}\sum_{k_1 k_2} \int d^3r\, e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{r}}\, u_0^*(r)\, u(r)}\; (-i\vec{E}\cdot\vec{D}_{k_2})\,(a_{k_1}^+ a_{k_2})$$

$$= \frac{q}{N\Omega_0}\sum_{k_1 k_2} \underbrace{\sum_{\substack{n\\ \text{alle}\\ \text{Zellen}}} e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\cdot\vec{R}_n}}_{N\cdot\delta_{k_1,k_2}} \underbrace{\int_{\Omega_n} d^3r\, u_0^*(\vec{R}_n+\vec{r})\, u_0(\vec{R}_n+\vec{r})}_{\Omega_0}$$

Zahl der Zellen (N)

Volumen einer Zelle (Ω_0)

$$\boxed{\underline{H}_{el\text{-}Feld} = -iq\sum_k \vec{E}\cdot\vec{D}_k\, a_k^+ a_k}$$

6.3. Elektron im elektrischen Feld: freie Dynamik

Strom berechnen f. $\underline{H} = \underline{H}_0 + \underline{H}_{el\text{-}Feld}$

$$j \sim \sigma_k = \langle a_k^+ a_k \rangle$$

$$-i\hbar\, \dot{(a_k^+ a_k)} = [\underline{H}_0 + H_{el\text{-}Feld},\, a_k^+ a_k]$$

$$= \varepsilon_k a_k^+ a_k - \varepsilon_k a_k^+ a_k \longrightarrow 0$$

$$+ -iq \, \vec{E} \cdot \underbrace{\left[\sum_q \vec{\nabla}_q \, a_q^{+} \overset{\downarrow}{a_q} \, , \, a_k^{+} a_k \right]}_{?}$$

$$\left[\sum_q \nabla_q \, a_q^{+} \overset{\downarrow}{a_q} \, , \, a_k^{+} a_k \right] =$$

$$\underbrace{\sum_q}_{\text{merken}} \left(\underbrace{a_q^{+} \frac{a_{q+\delta q} - a_q}{\delta q} a_k^{+} a_k}_{\underline{\text{rechnen}}:} - \underbrace{a_k^{+} a_k \vec{\nabla}_q a_q^{+} \overset{\downarrow}{a_q}}_{\text{merken}} \right)$$

$$a_q^{+} \left(\frac{\delta_{k,q+\delta q} - a_k^{+} a_{q+\delta q} - \delta_{qk} + a_k^{+} a_q}{\delta q} \right) a_k$$

$$= \frac{1}{\delta q} \left(\underbrace{a^{+}_{k-\delta q} a_k - a_k^{+} a_k} - a_q^{+} a_k^{+} a_{q+\delta q} a_k + a_q^{+} a_k^{+} a_q a_k \right)$$

$$= \underbrace{- \vec{\nabla}_k \overset{\downarrow}{a_k^{+}} a_k}_{\text{merken (1)}} \qquad \underbrace{- a_k^{+} \left(\delta_{qk} - a_k a_q^{+} \right) a_{q+\delta q} + a_k^{+} \left(\delta_{qk} - a_k a_q^{+} \right) a_q}$$

$$- a_k^{+} a_{k+\delta q} + a_k^{+} a_k a_q^{+} a_{q+\delta q} + a_k^{+} a_k - a_k^{+} a_k a_q^{+} a_q$$

$$\underbrace{- \vec{\nabla}_k a_k^{+} \overset{\downarrow}{a_k}} \qquad \underbrace{a_k^{+} a_k \vec{\nabla}_q a_q^{+} a_q}$$

$$- \vec{\nabla}_k \left(a_k^+ a_k \right)$$

fällt weg gegen oben gewählt

Die Bewegungsgl. der Elektronenbesetzung $\sigma_k(t)$ im elektrischen Feld lautet:

$$-i\hbar\, \partial_t \sigma_k = i q \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k \sigma_k$$

$$-i\hbar \left(\partial_t + \underbrace{\frac{q}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k}_{\text{Beschleunigg. der LT im elektrische Feld}} \right) \sigma_k(t) = 0$$

<u>Bemerkungen</u>

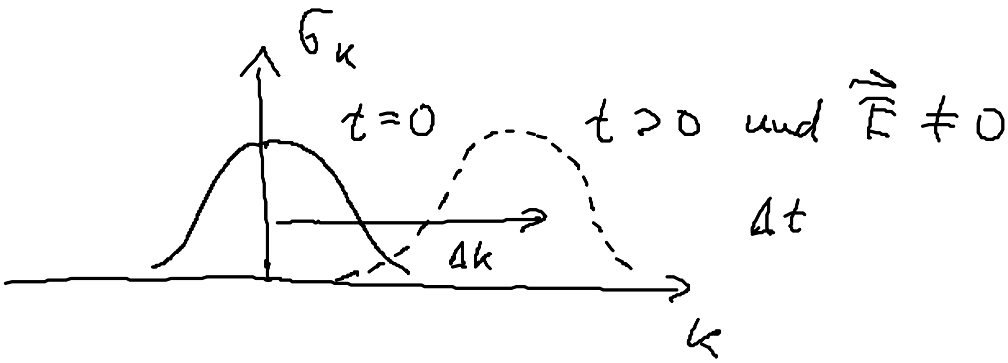
a) ohne El-Ph Kopplung ist die Lösung für $\sigma_k(t)$:

$$\sigma_k = f\left(\vec{k} - \frac{q \vec{E}}{\hbar} t \right)$$

Beweis durch Einsetzen, f beliebig, durch Anfangsbedingung (Fermi Fkt) bestimmt.

<u>Interpretation:</u>

das el. Feld verschiebt die Elektronenverteilung im k-Raum



man benötigt Platz um die σ_k zu verschieben → Metalle haben freie Zustände und natürlich auch besetzte die verschoben werden können

b) Klassische Analogie:

$$\underbrace{\hbar \Delta \vec{k}}_{} = q \vec{E} \Delta t$$

de Broglie

$$\Delta p = q \vec{E} \Delta t$$

$$\frac{\Delta p}{\Delta t} = q \vec{E} \quad \text{Newton - Bewegungsgleichung}$$

c) zeige, daß Annahme freier El. im Feld nicht sinnvoll ist, El-Ph-WW wichtig (bisher noch nicht dabei)

$$\vec{j} = \frac{1}{V} \frac{q}{m^*} \sum_k \hbar k \sigma_k(t)$$

$$= \frac{1}{V}\frac{q}{m^*}\sum_k \hbar k\, f\left(\vec{k} - \frac{q\vec{E}}{\hbar}t\right) \qquad \vec{k} \to \vec{k} + \frac{q\vec{E}}{\hbar}t$$

$$= \frac{1}{V}\frac{q}{m^*}\sum_k f(\vec{k})\left(\hbar\vec{k} + q\vec{E}t\right)$$

$$= \frac{1}{V}\frac{q}{m^*}\left(\underbrace{\sum_k f(k)\,\hbar\vec{k}}_{\substack{=0 \text{ weil} \\ \text{antisymmetrisch}}} + \underbrace{\underbrace{\sum_k f(k)}_{N} \cdot q\vec{E}t}_{\text{dieser Term ist } \sim t}\right)$$

Der Term proportional zu t beschreibt die ständige Beschleunigung der El im Feld, → Strom wächst ständig

physikalisch problematisch (wird nicht beobachtet)

es fehlt ein „bremsender" Anteil der dagegen arbeitet (El-Ph-Kopplg.)

<u>Gegenbeispiel</u> Blochoszillation

(Reflexion an B-Zonen Ende)