VII Elektrischer Transport

Ladungstransport unter dem Einfluß eines elektrischen Felds und der schwachen Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

Schwache WW heißt, dass die Annahme eines Wärmebads für Phononen gerechtfertigt ist (d.h. keine Phonondynamik, sondern Bose-Verteilung beschreibt die Phonon-Besetzung)

1. Drude-Modell

Klassische Beschreibung der statischen Leitfähigkeit in Metallen

Für den Transport des elektrischen Stroms sind quasi-freie Elektronen verantwortlich.

Im Drude-Modell werden wir Elektronen als klassische Teilchen betrachten, die durch ein äußeres Feld beschleunigt werden

$$m\ddot{\vec r} = m\dot{\vec v} = \vec F \underbrace{- \frac{m}{\tau}\vec v}_{\text{phänomenologische Reibungskraft}} = q\vec E - \frac{m}{\tau}\vec v$$

phänomenologische
Reibungskraft
mit $\tau \hat{=}$ Lebensdauer
der Elektronen

$1/\tau \equiv \gamma$ ein Maß für die
Stärke der Reibung

Einfache inhomogene DGL mit $\vec v(t) = \vec v_{homogen}(t) + \vec v_{inhomogen}(t)$

Homogene Lösung: $\vec v_{homogen} = \vec v_0 e^{-t/\tau}$

Ohne die treibende äußere Kraft klingt die Bewegung der Elektronen in einer charakteristischen Zeit τ infolge der Reibung ab.

Für $t \gg \tau$ ist die Lösung der homogen DGL exponentiell abgeklungen. Damit bleibt nur die inhomogene Lösung

$$\vec v = \vec v_{inhomogen} = \frac{q\tau}{m}\vec E$$ konstante Geschwindigkeit

Wenn sich geladene Teilchen mit einer Geschwindigkeit $\vec v$ bewegen, fließt ein Strom

$$\vec j = nq\vec v = \frac{nq^2}{m}\tau\vec E$$ mit Teilchendichte n

Stromdichte ist proportional zum elektrischen Feld

$\to$ Ohmsche Gesetz $\vec j = \sigma \vec E$

mit σ als Leitfähigkeit

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m}$$

Leitfähigkeit: ist unabhängig vom Vorzeichen der Ladungsträger.

proportional zu Ladungsträgerdichte n

proportional zu Lebensdauer der Elektronen τ

(d.h. je stärker die Reibungskraft, desto kleiner τ und σ)

antiproportional zur Masse m

2. Strom als quantenmechanische Observable

Definition des Stromoperators in 2. Quantisierung

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

Das elektromagnetische Feld ist durch das statische Potential ϕ und das Vektorpotential $\vec{A}$ beschrieben

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \dot{\vec{A}}$$

Annahme eines stationären Felds für dieses Kapitel, d.h. Betrachtung von ϕ ist ausreichend.

$$\phi = \phi_{int} + \phi_{ext}$$

ϕ_{int}: Coulomb-WW

ϕ_{ext}: bestimmt durch

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

$$\Rightarrow \phi_{ext} = -\vec{r}\cdot\vec{E}_{ext}$$

Für den Stromoperator folgt:

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{k_1 k_2} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}} u^*_{k_1}(\vec{r})\, \underset{\underset{\frac{\hbar}{i}\nabla_r}{\shortparallel}}{\vec{p}}\, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{+i\vec{k}_2\cdot\vec{r}} u_{k_2}(r)\, a^+_{k_1} a_{k_2} + h.a.$$

mit Blochfunktion

$$\varphi_{k_1}(\vec{r}) = \sum_{k_1} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_1\cdot\vec{r}} u_{k_1}(r)$$

$$= \frac{1}{2}\frac{q}{mV}\sum_{k_1 k_2} e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\cdot\vec{r}} a^+_{k_1}(t)\, a_{k_2}(t)$$

$$\left[\hbar\vec{k}_2\, u^*_{k_1}(\vec{r})\, u_{k_2}(r) + \frac{\hbar}{i} u^*_{k_1}(r)\, \vec{\nabla}_r\, u_{k_2}(\vec{r}) \right] + h.a.$$

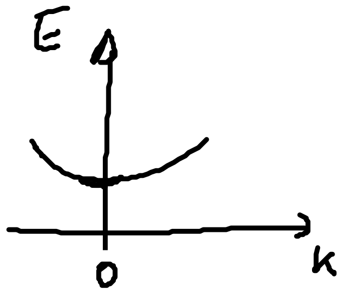
Ortsabhängigkeit $u_k(r)$ reflektiert Fluktuationen auf der Ebene einer Elementarzelle, da $u_k(r)$ gitterperiodisch sein muß. Bei einer Messung (makroskopische Prozess) wird drüber gemittelt

$$\langle A \rangle = \underbrace{\frac{1}{\Omega_0}}_{\text{Eelementarzellen-Volumen}} \int_{\Omega_0} A(\vec{r}-\vec{r}')\, d^3r' \Big|_{\vec{r}=\vec{R}_n}$$

Mittelung von 1. Term in der Stromdichte:

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

$$u_{k_1}^*(\vec r-\vec r') = u_{k_1}^*(\vec R_n-\vec r') = u_{k_1}^*(\vec r')$$



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

$$\approx 1$$

$k_1, k_2 \approx 0$ nahe am Bandminimum

$\to$ Orthogonalität der u_s

Mittelung von 2. Term in der Stromdichte:

$$\langle u_{k_1}^*(\vec r)\, \vec\nabla_r\, u_{k_2}(\vec r)\rangle \approx \frac{1}{\Omega_0}\int d^3r' \; u_0^*(\vec r')\, \nabla_{r'}\, u_0(\vec r')$$

$$= -i\vec k_2 + \frac{im}{\hbar^2}\vec\nabla_{k_2}\varepsilon_{k_2}$$

gezeigt in der Übung

$e^{ik\cdot r}$ wird über die Einheitszelle konstant gehalten $\to e^{ikR_n}$

Damit folgt für die gemittelte Stromdichte

$$\langle \vec{j} \rangle = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \frac{1}{V} \sum_{k_1 k_2} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\cdot \vec{R}_n} \langle a_{k_1}^+ a_{k_2} \rangle$$

$$\times \left[\hbar \vec{k}_2 + \frac{\hbar}{i} \frac{i m}{\hbar^2} \frac{\hbar^2 k_2}{m^*} - \frac{\hbar}{i} i \vec{k}_2 \right]$$

parabolische Bandstruktur $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

$$= \frac{1}{2} \frac{q}{m^* V} \sum_{k_1 k_2} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\cdot \vec{R}_n} \langle a_{k_1}^+ a_{k_2} \rangle \cdot \hbar \vec{k}_2 + h.a.$$

Annahme: räumlich homogenes System, d.h. $\vec{j}$ soll nicht vom Ort abhängig sein $\rightarrow$ $\vec{k}_1 = \vec{k}_2$

$$\Rightarrow \langle \vec{j} \rangle = \frac{q}{V} \sum_k \underbrace{\frac{\hbar k}{m^*}}_{\text{Geschwindigkeit}} \rho_k$$

| $\frac{1}{2}$ kürzt sich mit h.a. weg

Summe über alle möglichen elektronischen Zustände

Ziel: Bestimmung von ρ_k !

3. Elektronen im elektrischen Feld

$$e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}} u_0(\vec{r})\, a_{k_1}^+ a_{k_2}$$

$$H_{el\text{-}feld} = q\,\Phi \;\xrightarrow{\text{2. Quantisierung}}\; q \sum_{k_1 k_2} \int d^3r\, e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}}\, u_0^*(\vec{r}) \underbrace{\left[-\vec{r}\cdot\vec{E}_{ext}\right]}_{i\vec{E}_{ext}\cdot\vec{\nabla}_{k_2}}$$

$$\Phi_{ext} = -\vec{r}\cdot\vec{E}_{ext}$$

partielle Integration

$$H_{el\text{-}feld} = \frac{q}{V} \sum_{k_1 k_2} \underbrace{\sum_n e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{R}_n}}_{N\delta_{k_1 k_2}} \underbrace{\int d^3r_n\, u_0^*(\vec{r}_n+\vec{R}_n)\, u_0(\vec{r}_n+\vec{R}_n)}_{\to \Omega_0}$$

$$\left[-i\vec{E}_{ext}\cdot\vec{\nabla}_{k_2}\, a_{k_1}^+ a_{k_2}\right]$$

- partielle Integration
- Zerlegung in Einheitszellen

$$\vec{r} = \vec{R}_n + \vec{r}_n$$

$$H_{el\text{-}feld} = -iq \sum_k \vec{E}_{ext}\cdot\vec{\nabla}_k\, a_k^+ a_k$$

bezieht sich nur auf den letzteren Operator

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_k^+ a_k = [a_k^+ a_k, H]_-$$

$$H = H_0 + H_{el\text{-}feld}$$

$$= [a_k^+ a_k, H_{e\text{-}feld}]$$

da H_0-Anteil verschwindet, denn $(\varepsilon_k - \varepsilon_k)\, a_k^+ a_k = 0$ (gleiches Band)

$$= -iq\,\vec{E}_{ext}\cdot\Big(a_k^+ a_k \sum_{k'} \vec{\nabla}_{k'}\, a_{k'}^+ a_{k'}$$

$$- \sum_{k'} \vec{\nabla}_{k'} a^+_{k'} a_{k'} \, a^+_k a_k \Big)$$

Differentialquotient

$$\lim_{\delta k' \to 0} a^+_{k'} \frac{a_{k'+\delta k'} - a_{k'}}{\delta k'} a^+_k a_k$$

fundamentale Vertauschungsrelationen

$$\lim_{\delta k' \to 0} a^+_{k'} \frac{\delta_{k'+\delta k', k} - a^+_k a_{k'+\delta k'} - \delta_{k' k} + a^+_k a_{k'}}{\delta k'} a_k$$

$k' = k - \delta k'$ $\qquad$ $k' = k$

$$\lim_{\delta k' \to 0} \frac{1}{\delta k'} \Big(\underbrace{a^+_{k-\delta k'} a_k - a^+_k a_k}_{\boxed{-\nabla_k a^+_k a_k}} - a^+_{k'} a^+_k a_{k'+\delta k'} a_k + a^+_{k'} a^+_k a_{k'} a_k$$

$$a^+_k a^+_{k'} a_k a_{k'+\delta k'} + a^+_k a^+_{k'} a_k a_{k'}$$

$\delta_{kk'} - a_k a^+_{k'}$ $\qquad$ $\delta_{kk'} - a_k a^+_{k'}$

$$- a^+_k a_{k+\delta k'} + a^+_k a_k a^+_{k'} a_{k'+\delta k'} + a^+_k a_k - a^+_k a_k a^+_{k'} a_{k'}$$

$$\boxed{-\nabla_k a^+_k a_k} + \cancel{a^+_k a_k \nabla_{k'} a^+_{k'} a_{k'}}$$

$$= -\nabla_k (a^+_k a_k)$$

Insgesamt: $\quad i\hbar \dot{\rho}_k(t) = i q \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k \rho_k$

$$\Rightarrow \quad -i\hbar \Big[\frac{\partial}{\partial t} + \underbrace{\frac{q}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k}_{\text{Beschleunigung der Ladungsträger im elektrischen Feld}} \Big] \rho_k = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} \overset{!}{=} - \frac{q}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k$$

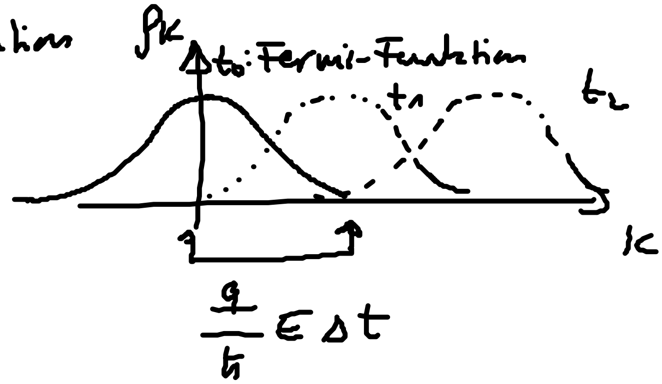
Lösungsansatz: $$f_k(t) = f(\underbrace{\vec{k} - \tfrac{q}{\hbar}\vec{E}t}_{\text{Verschiebung der Verteilung mit der Zeit}})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}(t)) = \nabla_x f(\vec{x}(t)) \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\vec{x}}_{-\frac{q}{\hbar}\vec{E}}$$

Beweis durch Einsetzen
$$\vec{E}\cdot\vec{\nabla}_k = -\frac{\hbar}{q}\frac{\partial}{\partial t}$$

Die Funktion f ist beliebig. Sie ist bestimmt durch die Anfangsbedingung, daß die Verteilung zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ der Fermi-Funktion entspricht.

Interpretation



$t_0 < t_1 < t_2$

Verschiebungstheorem: Das elektrische Feld verschiebt die elektronische Verteilung im k-Raum.

$\rightarrow$ Stromfluß im Ortsraum

$\hat{=}$ Anwachsen des Impulses mit der Zeit (Beschleunigung durch das Feld)

Die Annahme freier Elektronen im Feld ist nicht sinnvoll, da die Elektronen so unendlich beschleunigt werden können.

$$\vec{j} = \frac{q}{Vm^*}\sum_k \hbar\vec{k}\, f_k(t)$$

$$= \frac{q}{Vm^*}\sum_k \hbar\vec{k}\, f\left(\vec{k} - \frac{q\vec{E}}{\hbar}t\right)$$

$$= \frac{q}{Vm^*}\sum_k \underbrace{f(k)}_{\text{symmetrisch in } k}\Big(\underbrace{\hbar\vec{k}}_{\text{antisymmetrisch in } k \;\to\; 0} + \underbrace{q\vec{E}t}_{\sim t}\Big) \longrightarrow \infty \quad \text{für } t\to\infty$$

$\vec{k} \to \vec{k} + \frac{q\vec{E}}{\hbar}t$

$\Rightarrow$ Strom divergiert, da die Beschleunigung nicht abgebremst wird.

Unbedingt notwendig: Elektron-Phonon oder Elektron-Wechselwirkung $\to$ Widerstand.