VIII.2 Phononstreuung der elektronischen Dichte (Wiederholung)

Herleitung einer Streugleichung für den Einfluss der Elektron-Phonon-Kopplung auf die elektronische Dichte $\sigma_k = \langle a_k^+ a_k \rangle$

$$\partial_t \sigma_k \Big|_{\text{elektron-phonon}} = \sum_{\substack{q \\ \varepsilon_k > \varepsilon_{k+q}}} 2\pi \, |D_q|^2 \, \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} - \omega_q) \left(\sigma_{k+q}(1-\sigma_k) n_q - \sigma_k (1-\sigma_{k+q})(1+n_q) \right)$$

$$+ \sum_q 2\pi \, |D_q|^2 \, \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} + \omega_q) \left(\sigma_{k+q}(1-\sigma_k)(1+n_q) - \sigma_k (1-\sigma_{k+q}) n_q \right)$$

umschreiben als Ratengleichung:

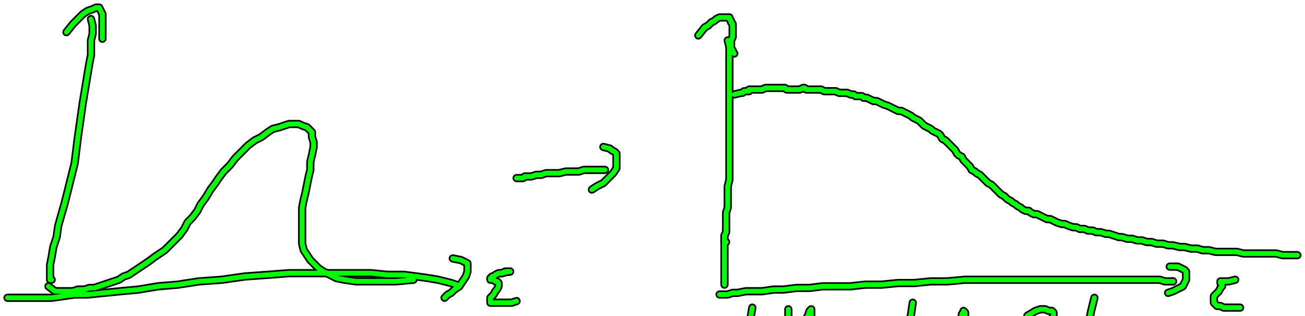
$$\partial_t \sigma_k \Big|_{\text{elektron-phonon}} = \underbrace{\Gamma_{k+q \to k} \, \sigma_{k+q}}_{\text{Einstreuterm}} - \underbrace{\Gamma_{k \to k+q} \, \sigma_k}_{\text{Ausstreuterm}}$$

und nun die Fortsetzung:

Bemerkungen

1.) Pauli Blocking term $\underbrace{\sigma_k}_{\substack{\text{Ursprungszustand} \\ \text{muß besetzt}}} \underbrace{(1-\sigma_{k+q})}_{\substack{\text{Verhindert Besetzung} \\ \text{größer 1}}}$

2.) Bei initialer nicht Gleichverteilung σ σ



strebt mit der Zeit zu einer Gleichgewichtsverteilung.

3) Durch die Markovnäherung ist Energieerhaltung in der δ-Fkt direkt ablesbar.

Eine kurzzeitige Verletzung der Energieerhaltung innerhalb der Energie-Zeit-Unschärfe tritt in Markovnäherung nicht auf. Dafür ist eine Nicht-Markovsche Rechnung notwendig!

Nächster Schritt: Kopplung an externes elektrisches Feld

Leitung $\Rightarrow$ Ziel: Berechnung Widerstand.

VIII.3 Einfluss eines statischen elektrischen Feldes auf die Bewegung der Elektronen

Erster Schritt: Hamiltonoperator der Elektron-Efeld-WW

$$H_{el-pot,ext} = \sum_i e\,\phi(\underline{r}_i)$$

Bei einem konstanten homogenen externen Feld $\underline{E}_0$ gilt:

$$\phi(\underline{r}) = -\underline{r}\cdot\underline{E}_0 \,, \quad \text{da } \underline{E} = -\nabla\phi$$

Das ergibt in 2. Quantisierung: (1-Bandmodell)

$$H_{el-pot,ext} = e\sum_{k_1 k_2}\frac{1}{V}\int d\underline{r}\; e^{-i\underline{k}_1\cdot\underline{r}}\, u^*_{k_1 0}(\underline{r})\,\underbrace{(-\underline{r}\cdot\underline{E}_0)\,e^{i\underline{k}_2\cdot\underline{r}}}_{\underline{E}_0\cdot i\nabla_{k_2}}\, u_{k_2 0}(\underline{r})\; a^\dagger_{k_1} a_{k_2}$$

Heisenberg-operator

<u>Bem</u>: Die Summen über k_1, k_2 können temporär in ein Integral umgewandelt werden. (Annahme Randterme verschwinden)

$$= e \sum_{k_1 k_2} \frac{1}{V} \int d\mathbf{r}\, e^{-i k_1 \cdot \mathbf{r}} e^{i k_2 \cdot \mathbf{r}} u^*_{k_1 c 0}(\mathbf{r}) u_{k_2 c 0}(\mathbf{r})\, \mathbf{E}_0 \cdot (-i \nabla_{k_2})\, a^\dagger_{k_1} a_{k_2}$$

Zerlegung des Integral in Einheitszellen

$$= e \sum_{k_1 k_2} \frac{1}{V} \underbrace{\sum_n e^{i(k_2 - k_1)\cdot R_n}}_{\delta_{k_1 k_2} \cdot N} \underbrace{\int_\Omega d\mathbf{r}\, u^*_{k_1 c 0}(\mathbf{r})\, u_{k_2 c 0}(\mathbf{r})}_{= \Omega}\, \mathbf{E}_0 \cdot (-i \nabla_{k_2})\, a^\dagger_{k_1} a_{k_2}$$

$$= e \sum_k \mathbf{E}_0 \cdot \left(-i\, a^\dagger_k \nabla_k a_k\right) .$$

<u>Zweiter Schritt</u>: Herleitung Bewegungsgl. für die Elektronendichte σ_k

Heisenbergbewegungsgl.

$$\partial_t \sigma_k \Big|_{\text{Elektron-Feld}} = \frac{i}{\hbar} \left[H_{el-pert}, \sigma_k \right]_-$$

$$= e \sum_{\tilde{k}} \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{E}_0 \cdot \left(-i\, a^\dagger_{\tilde{k}} \nabla_{\tilde{k}} a_{\tilde{k}}\right), a^\dagger_k a_k \right]$$

Um die Ableitung richtig zu behandeln, muß der Differentialquotient verwendet werden.

$$= \frac{e}{\hbar} \sum_{\tilde{k}} \sum_j \lim_{\Delta \tilde{k}_j \to 0} \frac{\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{e}_j}{\Delta \tilde{k}_j} \Big(\left(a^\dagger_{\tilde{k}} a_{\tilde{k}+\Delta\tilde{k}} - a^\dagger_{\tilde{k}} a_{\tilde{k}}\right) a^\dagger_k a_k - a^\dagger_k a_k \left(a^\dagger_{\tilde{k}} a_{\tilde{k}+\Delta\tilde{k}} - a^\dagger_{\tilde{k}} a_{\tilde{k}}\right) \Big)$$

$$= \frac{e}{\hbar} \sum_{\tilde{k}} \sum_j \lim_{\Delta \tilde{k}_j \to 0} \frac{\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{e}_j}{\Delta \tilde{k}_j} \Big(a^\dagger_{\tilde{k}} \big(\underline{\underline{\delta_{\tilde{k}+\Delta\tilde{k}_j, k}}} - \cancel{\delta_{\tilde{k},k}}\big) - \cancel{a^\dagger_k a_{\tilde{k}+\Delta\tilde{k}_j}} + \cancel{a^\dagger_k a_{\tilde{k}}}\big) a_k - a^\dagger_k \big(\underline{\underline{\delta_{k\tilde{k}}}} - \cancel{a^\dagger_{\tilde{k}} a_k}\big) a_{\tilde{k}+\Delta\tilde{k}_j} + \cancel{a^\dagger_k \big(\delta_{k\tilde{k}} - a^\dagger_{\tilde{k}} a_k\big)} a_{\tilde{k}} \Big)$$

$$= \frac{e}{\hbar}\sum_k \sum_j \lim_{\Delta k_j \to 0} \frac{E_v \cdot e_j}{\Delta k_j}\left(a^\dagger_{k-\Delta k_j} a_k - a^\dagger_k a_{k+\Delta k_j}\right)$$

$$= \frac{e}{\hbar}\sum_k \sum_j \lim_{\Delta k_j \to 0} E_v \cdot e_j \left(\underbrace{\frac{a^\dagger_{k-\Delta k_j} a_k - a^\dagger_k a_k}{\Delta k_j}}_{-(\partial_j a_k^\dagger)\, a_k} - \underbrace{\frac{a^\dagger_k a_{k+\Delta k_j} - a^\dagger_k a_k}{\Delta k_j}}_{-a_k^\dagger(\partial_j a_k)} \right)$$

$$\partial_t \sigma_k \Big|_{\text{Elektr.-Feld}} = \frac{e}{\hbar}\left(-\underline{E}\cdot \nabla_k \sigma_k\right)$$

Jetzt haben wir alle Anteile und können das Verhalten diskutieren!

Insgesamt

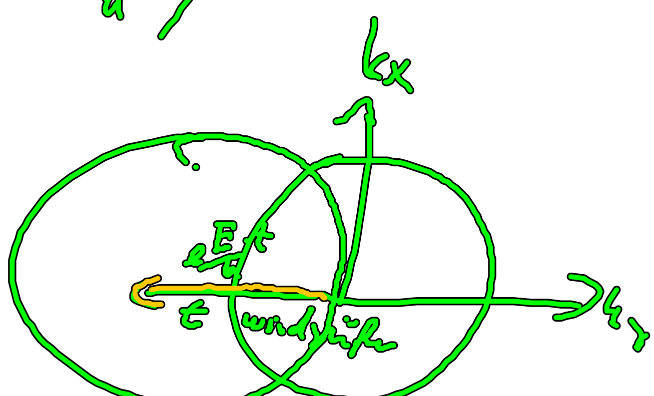
$$\partial_t \sigma_k = \underbrace{-\frac{e}{\hbar}\,\underline{E}\cdot\nabla_k \sigma_k}_{\text{Beschleunigung durch externe Feld}} + \underbrace{\text{Elektron-Phonon Streuung}}_{\text{Erzeugt Widerstand}}$$

Für den Fall ohne Widerstand

$$\left(\partial_t + \frac{e}{\hbar}\underline{E}\cdot\nabla_k\right)\sigma_k = 0$$

$$\Rightarrow \sigma_k = f\left(\underline{k} - \frac{e\underline{E}t}{\hbar}\right)$$

$$\left\| \frac{dk}{dt} = \frac{e}{\hbar}E \right\|$$ Analog zu Newton

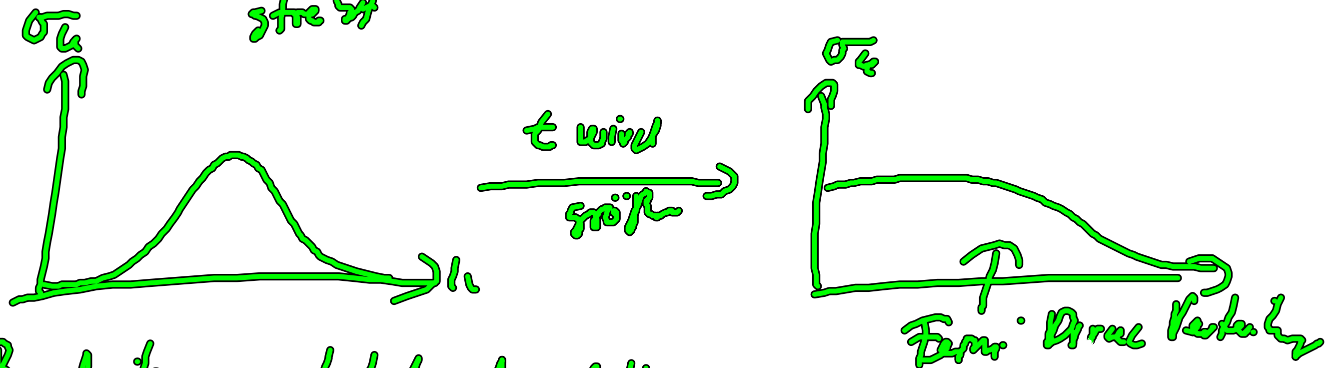


Die Fermi Kugel wird mit $\Delta k = \frac{eE}{\hbar}\Delta t$ verschoben, bei Beschleunigung durch $\underline{E}$!

Achtung! Rechnung ohne Streuprozesse ist unrealistisch! Da hier die Elektronen beliebig schnell werden können!

VIII.4 Elektrischer Widerstand Relaxationszeitnäherung

Bei der Elektron-Phonon WW haben wir gesehen, dass die Verteilung von σ_k gegen ein Gleichgewicht strebt



Beschreibung erfolgte über Boltzmanngl.

$$\partial_t \sigma_k \Big|_{el-ph} = \sum_q \left(W_{k+q\to k}\, \sigma_{k+q}(1-\sigma_k) - W_{k\to k+q}\, \sigma_k (1-\sigma_{k+q}) \right)$$

Übergang in die Relaxationszeitnäherung

Annahme: Das System strebt in eine Gleichgewichtsverteilung σ_k^0, es gibt eine gewisse Relaxationszeit.

a) Wenn das Feld eingeschaltet wird entstehen nur kleine Abweichung von der GG Verteilung:

$$\sigma_k(t) = \sigma_k^0 + \sigma_k^{(1)}(t)$$

b) Annahme nur wenige Elektronen in einem Band $(1-\sigma_k) \approx 1$

$$\Rightarrow \partial_t \sigma_k \Big|_{el-ph} = \sum_q \left(W_{k+q\to k}\, \sigma_{k+q} - W_{k\to k+q}\, \sigma_k \right)$$

c) Ansatz einzeln

$$\partial_t \big(\underbrace{\sigma_k^0}_{0\,!} + \sigma_k^{(1)}(t)\big)\Big|_{el-ph} = \sum_q \Big(W_{k+q\to k}\big(\sigma^0_{k+q} + \sigma^{(1)}_{k+q}(t)\big) - W_{k\to k+q}\big(\sigma^0_k + \sigma^{(1)}_k(t)\big)\Big)$$

$$= \underbrace{\sum_q \big(W_{k+q\to k}\,\sigma^0_{k+q} - W_{k\to k+q}\,\sigma^0_k \big)}_{=0 \text{ Da GG Verteilg.}}$$

$$+ \sum_q \big(W_{k+q\to k}\,\sigma^1_{k+q} - W_{k\to k+q}\,\sigma^1_k \big)$$

$$\partial_t \big(\sigma_k^{(1)}(t)\big)\Big|_{el-ph} = \underbrace{\sum_q W_{k+q\to k}\,\sigma^1_{k+q}}_{\text{Wird in der Regel weggelassen!}} - \underbrace{\sum_q W_{k\to k+q}}_{\frac{1}{\tau_{rel}}}\,\sigma_k^{(1)}$$

Es wird gesagt, dass diese Prozesse ein effektives τ_{rel} eingebaut.

Also

$$\gamma = \frac{1}{\tau_{rel}} = \sum_q W_{k\to k+q} \quad \text{ist die Relaxationszeit.}$$

Nun Blick auf das volle Problem

$$\partial_t \sigma_k^{(1)}(t) + \frac{e}{\hbar}\,\underline{E}\cdot\nabla_k\big(\underbrace{\sigma_k^{(0)}}_{\text{dominant}} + \underbrace{\sigma_k^{(1)}}_{\text{kleine Störung!}}\big) = -\gamma\,\sigma_k^{(1)}$$

In 2. Ordnung in E-Feld

$$\partial_t \sigma_k^{(1)}(t) = -\frac{e}{\hbar}\,\underline{E}\cdot\nabla_k\,\sigma_k^{(0)} - \gamma\,\sigma_k^{(1)}$$

Inhomogene Differentialgl.

Lösung (Störung wird bei $t=0$ eingeschaltet)

$$\sigma_k^{(1)} = \int_0^t dt'\; e^{-\gamma(t-t')}\left[-\frac{e\underline{E}}{\hbar}\nabla_k\,\sigma_k^{(0)}\right]$$

$$\underbrace{\sigma_k^{(1)}}_{\text{Durch externes Feld induziert.}} = -\frac{q \cdot \underline{E}}{\hbar \eta} \cdot \nabla_k \sigma_k^{(0)} \left(1-e^{-\eta t}\right)$$

Grenzfälle

i) $t \ll \tau$, für kurze Zeiten ist die Elektron-Phonon WW vernachlässigbar

Hier $\frac{t}{\tau}$ sehr klein! also

$$e^{-\frac{t}{\tau}} \approx 1 - \eta t$$

$$\Rightarrow \sigma_k^{(1)}(t) = -\frac{q\underline{E}}{\hbar} \cdot \nabla_k f_k^{(0)} t$$

ungebremste Bewegung!

Nur für kleine t physikalisch!

(Keinesfalls darf der Limes $t \to \infty$ genommen werden, das verletzt $t \ll \tau$. Also Beschleunigung erfolgt bis zur ersten Streuung)

(ii) $t \gg \tau$, d.h. Elektron Phonon Streuung dominiert.

Stationäre Lsg

$$\sigma_k^{(1)} \approx -\frac{q\,\underline{E}}{\hbar\eta} \cdot \nabla_k f_k \sim \underline{E}$$

$\Rightarrow$ Elektron-Phonon Welle führt zu stationärem Stromfluss.

Berechnung Strom

$$j = \frac{q}{m^*} \frac{1}{V} \sum_k \left(\sigma_k^0 + \sigma_k^1 \right) \hbar k$$

symmetrisch fällt verschwindet — antisymmetrisch fällt

$$= \frac{q}{m^*} \frac{1}{V} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \; \hbar k \; \sigma_k^{(1)}$$

Lösung einsetzen

$$= -\frac{q^2}{m^* \sigma} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \; k \; E \cdot \nabla_k \sigma_k^{(0)}$$

Einschub:

$$\nabla_k \sigma_k^{(0)} = \nabla_k \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{k_B T}\right) + 1} = \left(\partial_{\varepsilon_k} \sigma_k^0\right) \nabla_k \varepsilon_k$$

$$\nabla_k \varepsilon_k \underset{\text{parabolisch}}{=} \frac{\hbar^2}{m^*} k = \underset{\text{Geschwindigkeit}}{v_k} \hbar$$

$p_k = m v_k = \hbar k$

$$= \left(\partial_{\varepsilon_k} \sigma_k^0\right) v_k \hbar$$

$$j = -\frac{q^2}{\sigma} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \left(v_k \cdot E \right) v_k \partial_{\varepsilon_k} g_k^0$$

$$j_\alpha = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta} E_\beta \qquad \text{Ohmsches Gesetz}$$

mit Leitfähigkeitstensor

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{q}{(2\pi)^3 \sigma} \int d^3k \; v_k^\alpha \; v_k^\beta \; \partial_{\varepsilon_k} \sigma_k^0$$

im isotropen Medium gilt

$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad \text{mit } \vec{j} \parallel \vec{E}$

Die Temperaturabhängigkeit des Widerstands folgt aus der Temperaturabhängigkeit der Streuvektoren Wechselwirkung (dort gilt die Bose-Einstein-Verteilung)