6. Elektronentransport und elektrischer Widerstand

Problem: Ladungstransport unter dem Einfluß eines elektrischen Felds und der Elektron-Phonon-Streuung

6.1. Strom als beobachtbare Größe

Def. in zweiter Quantisierung:

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

ist Stromdichteoperator (m ist nackte 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

$\underbrace{\qquad}_{\text{klein}}$

von außen angelegt

$\underbrace{\qquad}$

weil stationäres Feld von außen angelegt wird alles in ϕ gepackt

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

$\phi)$ $\quad \phi = \varphi_{int} + \phi_{ext}$

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:

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

1 Band

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

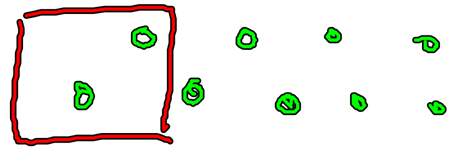
$$\vec{j} = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{k_1 k_2}\frac{1}{V} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\vec{r}} a^+_{k_1} a_{k_2} \left(\hbar\vec{k}_2\, u^*_{k_1}(r) u_{k_2}(r) + \frac{\hbar}{i} u^*_{k_1}(r)\, \vec{\nabla}_r u_{k_2}(\vec{r})\right) + \text{h.a.}$$

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

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

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

$k_1 \approx 0 \approx k_2$ am 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 $j(\cancel{\vec{r}}, t)$

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

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

ist konsistent mit einem räumlich konstant. Feld,

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

<u>quantenmechanisch Mittlg.</u>

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

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

Strom als Summe über alle mögl. El-Zustände ($\sum_k$)

mit der Wahrscheinlichkeit σ_k besetzt vorzufinden

und mit der jeweiligen Geschwind. $\frac{\hbar k}{m^*}$ multipliziert.

aktuell: Spintronik um neben den Ladungsfreiheits-grad der Elektronen auch Spin zu nutzen

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

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.

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

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

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

$$\underline{H}_{el\text{-}Feld} = \frac{q}{V}\sum_{k_1k_2}\underbrace{\int d^3r\, e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{r}}\, u_0^*(r)\, u(r)}\; -i\vec{E}\cdot\vec{D}_{k_2}\,(a_{k_1}^+ a_{k_2})$$

$$= \frac{q}{N\Omega_0}\sum_{k_1k_2}\underbrace{\sum_{\substack{n\\ \text{alle}\\ \text{Zellen}}} e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\cdot\vec{R}_n}}_{N\cdot\delta_{k_1,k_2}}\;\underbrace{\int_{\Omega_n} d^3r\, u_0^*(\vec{R}_n+\vec{r})\, u_0(\vec{R}_n+\vec{r})}_{\Omega_0}$$

N: Zahl der Zellen; Ω_0: Volumen einer Zelle

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

6.3. Elektron im elektrischen Feld: freie Dynamik

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

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

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

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

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

$$\left[\sum_q D_q\, a_q^\dagger a_q\,,\ a_k^\dagger a_k\right] =$$

$$\underbrace{\sum_q}_{\text{mehen}}\left(\underbrace{a_q^\dagger\,\frac{a_{q+\delta q}-a_q}{\delta q}\,a_k^\dagger a_k}_{\underline{\text{rechnen}}\ :} - \underbrace{a_k^\dagger a_k\,\vec{D}_q\, a_q^\dagger a_q}_{\text{merken}}\right)$$

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

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

$$= -\vec{\nabla}_k a_k^\dagger a_k \qquad \underbrace{- a_k^\dagger\left(\delta_{qk} - a_k a_q^\dagger\right)a_{q+\delta q} + a_k^\dagger\left(\delta_{qk} - a_k a_q^\dagger\right)a_q}$$

merken (1)

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

$$\underbrace{-\vec{\nabla}_k a_k^\dagger a_k} \qquad \underbrace{a_k^\dagger a_k \vec{D}_q a_q^\dagger a_q}$$

$$-\vec{\nabla}_k \left(a_k^+ a_k \right)$$ fällt weg gegen oben gemacht

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

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

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

Bemerkungen

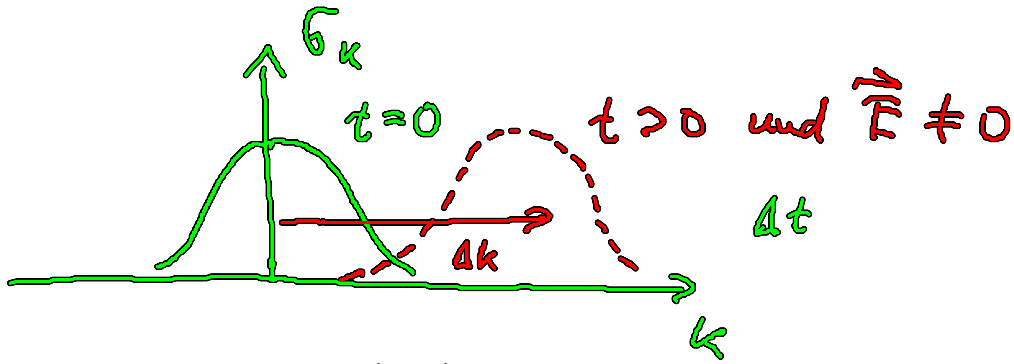
a) ohne El-Ph Kopplung ist die Lösung für $\sigma_k(t)$:

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

Beweis durch einsetzen, f beliebig, durch Anfangsbedingung (Fermi fkt) bestimmt.

Interpretation:

das el. Feld verschiebt die Elektronenverteilung im k-Raum



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

b) Klassische Analogie:

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

de Broglie

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

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

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

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

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

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

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

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)