

## Weiter zu 4. Elektrischer Widerstand durch Elektron-Phonon-Streuung

### Relaxationszeitnäherung

$$\dot{f}_k^1 |_{\text{el-ph}}(t) = -\frac{1}{\tau} f_k^1(t)$$

$\tau \equiv$  Relaxationszeit

Die Lösung ist dann 
$$f_k^1(t) = f_k^0(t) e^{-t/\tau}$$

$$\left( \partial_t + \underbrace{\frac{q\vec{E}}{\hbar} \nabla_k}_{\substack{\text{elektrisches} \\ \text{Feld}}} \right) (f_k^0 + f_k^1(t)) = - \underbrace{\gamma f_k^1(t)}_{\text{Beitrag der el-ph WW}} \quad \gamma \equiv \frac{1}{\tau}$$

$\rightarrow$  Beschleunigung der Ladungsträger

der Term  $\frac{q\vec{E}}{\hbar} \nabla_k f_k^1 \sim E^2$  wird vernachlässigt, da

wir an einer linearen Antwort des Systems auf eine Störung interessiert sind

$$\partial_t f_k^1(t) = -\frac{q\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f_k^0 - \gamma f_k^1(t)$$

lineare DGL 1. Ordnung

$$f_k^1(t) = \int_{t_0=0}^t dt' e^{-\gamma(t-t')} \left[ -\frac{q\vec{E}}{\hbar} \cdot \nabla_k f_k^0 \right]$$

$$= - \frac{q \vec{E}}{\hbar \gamma} \cdot \nabla_k f_k^0 (1 - e^{-\gamma t})$$

$f_k^1(t)$  bestimmt durch die feldinduzierte Änderung der Besetzung des elektron. Zustandes  $k$ .

Grenzfallbetrachtung:

i)  $t \ll \tau$ , d.h. El-Ph. Streuung vernachlässigbar

$\tau$  groß  $\rightarrow \gamma$  klein  $\Rightarrow$  Taylorentwicklung der Exponentialfkt.

$$e^{-\gamma t} \approx 1 - \gamma t$$

$$\Rightarrow f_k^1(t) \approx \frac{q \vec{E}}{\hbar} \nabla_k f_k^0 t \sim t$$

reproduziert den Grenzfall der freien Bewegung

ii)  $t \gg \tau$ , d.h. El-Ph Streuung wichtig

Es bildet sich hier ein stationärer Wert aus

$$f_k^1 = - \frac{q \vec{E}}{\hbar \gamma} \nabla_k f_k^0 \sim E \quad t \rightarrow \infty : e^{-\gamma t} \rightarrow 0$$

$\Rightarrow$  Beschleunigung der Elektronen im Feld wird also durch die El-Ph-Streuung ausbalanciert

$\Rightarrow$  stationärer Stromfluß

# Berechnung des Stroms

$$\begin{aligned}\vec{j} &= \frac{q}{m^*} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \underbrace{(f_{\vec{k}}^0 + f_{\vec{k}}^1)}_{\vec{v}_{\vec{k}}} \hbar \vec{k} \\ &= \frac{q}{m^*} \frac{1}{V} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \hbar \vec{k} f_{\vec{k}}^1 \\ &= -\frac{q}{m^* r} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \vec{k} \vec{E} \underbrace{\vec{v}_{\vec{k}} f_{\vec{k}}^0}_{\frac{1}{\nabla_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\frac{1}{k_B T} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu)} + 1}}}} \\ &\quad \partial \epsilon_{\vec{k}} f_{\vec{k}}^0 \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}\end{aligned}$$

parabolische Bandstruktur

$$\nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}}{m^*} = \vec{v}_{\vec{k}} \hbar$$

elektron. Geschwindigkeit

$$\vec{j} = -\frac{q^2}{r} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k (\vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{E}) \vec{v}_{\vec{k}} \partial \epsilon_{\vec{k}} f_{\vec{k}}^0$$

$$j^\alpha = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} E^\beta$$

 Ohmsche Gesetz

mit dem Leitfähigkeitstensor  $\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{q^2}{r(2\pi)^3} \int d^3k v_{\vec{k}}^\alpha v_{\vec{k}}^\beta \partial \epsilon_{\vec{k}} f_{\vec{k}}^0$

In isotropen Medien ( $\sigma_{\alpha\beta}$ ) gibt es ein Skalar

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad \text{d.h.} \quad j \parallel \vec{E}$$

Drude model:  $\sigma = \frac{q^2}{m^*} n \tau$

$$\begin{aligned}
\vec{j} &= - \frac{q^2}{m^*} \tau \int d^3k \underbrace{\vec{k} \vec{E} \cdot \vec{v}_k^0}_{\uparrow} p_k^0 \\
&= - \frac{q^2}{m^*} \tau \int d^3k p_k^0 \vec{E} \\
&= \frac{q^2}{m^*} \tau E \underbrace{\int d^3k p_k^0}_n = \frac{q^2 n}{m^*} \tau E
\end{aligned}$$

### 5. Temperatur-Abhängigkeit des Widerstands

$$\begin{aligned}
\gamma &= \frac{1}{\tau} = \sum_q W_{k \rightarrow k+q} \\
&= \frac{2i\tau}{\hbar^2} \sum_q |D_q|^2 n_q \left( \delta \left[ (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_q) \frac{1}{\hbar} \right] \right. \\
&\quad \left. + \delta \left[ (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_q) \frac{1}{\hbar} \right] \right)
\end{aligned}$$

$$n_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega_q/k_B T} - 1} \stackrel{T \text{ groß}}{\approx} \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega_q}{k_B T} - 1} = \frac{k_B T}{\hbar\omega_q}$$

Bose-Verteilung

d.h.  $\gamma = \gamma(T) \sim T$  für hohe Temperaturen

Widerstand  $W = \frac{\Delta}{\sigma} \sim \frac{1}{\tau} = \gamma \sim T$

$\Rightarrow$  Widerstand wächst proportional mit der Temperatur

für hohe T

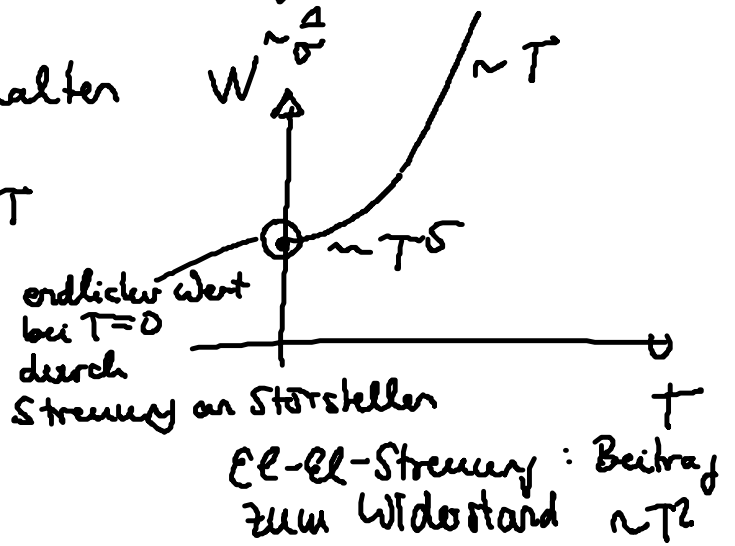
Je höher T, desto mehr Phononen sind im System vorhanden, desto effizienter sind die El-Ph-Stöße, desto kleiner ist die Stoßzeit  $\tau$  und desto größer ist der Widerstand

Bloch-Grüneisen-Verhalten

$$\sigma = \frac{1}{T^5} \text{ für kleine T}$$

⇒ Übertragungsaufgabe

hierfür ist die Relaxationszeit-Näherung nicht ausreichend



$$\dot{f}_k = -\sum_q W_{k \rightarrow k+q} (f_k - f_{k+q})$$

## Zusammenfassung Kapitel 5

- Schwache El-Ph-WW (Baderannahme)  
→ Erklärung des elektr. Widerstands

- Drude-Modell: (klassische Beschreibung)

$$j = \frac{ng^2}{mT} E \quad \text{Ohmsches Gesetz}$$

- Strom als gem. Observable

$$\langle j \rangle = \frac{q}{V} \sum_k f_k \frac{\hbar k}{m v_x}$$

- Elektronen im elektrischen Feld

$$i\hbar \dot{f}_{1c} = i\frac{q}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{1c} f_{1c}$$

Lösung  $f_{1c}(t) = f(k - \underbrace{\frac{q}{\hbar} \vec{E} t})$

Stramfluß im Ortsraum  $\rightarrow$  Anwachsen des Impulses mit der Zeit

Strom divergiert, da Teilchen unendlich beschleunigt werden

- Elektrischer Widerstand durch El-Ph-Streuung

Relaxationszeitnäherung  $\dot{f}_{1c}^1 = -\frac{1}{\tau} f_{1c}^1(t)$

Lösung  $f_{1c}^1(t) = -\frac{q}{\hbar} \tau \vec{E} \cdot \nabla_{1c} f_{1c}^0 (1 - e^{-t/\tau})$

Durch el-ph-Streuung bildet sich ein stationärer Zustand aus

$$f_{1c}^1 = -\frac{q}{\hbar} \tau \vec{E} \cdot \nabla_{1c} f_{1c}^0$$

$$\Rightarrow \vec{j}^{\alpha} = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} E^{\beta}$$

## VI Supraleitung

Starke Elektron-Phonon Kopplung

### 1. Phonondynamik - Bildung von Polaronen

Phononen werden nicht mehr als Wärmebad für Elektronen angenommen. Die Dynamik von Phononen wird betrachtet:  
 nicht-thermische Phononen, d.h.  $\langle b_q \rangle \neq 0$

⇒ Ausbildung eines neuen Quasiteilchens  
 Polaron

Bewegungsgl. für  $b_q$  und  $b_q^\dagger$  für EM-Band-System

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k \quad + \quad \sum_q \hbar \omega_q \left( b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right) \quad + \quad \sum_{qk} D_q a_{k+q}^\dagger a_k \left( b_{-q}^\dagger + b_q \right)$$

$H_e$                        $H_{ph}$                        $H_{e-ph}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_q = [b_q, H] = [b_q, H_{ph}] + [b_q, H_{e-ph}]$$

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad & \sum_{q'} \hbar \omega_{q'} \left( \cancel{b_q b_{q'}^\dagger b_{q'}} - \underbrace{b_{q'}^\dagger b_q b_{q'}}_{+} \right) \\ & - \underbrace{b_{q'}^\dagger b_q b_{q'}}_{+} \\ & \underbrace{b_q b_{q'}^\dagger - \delta_{qq'}}_{+} \\ & - \cancel{b_q b_{q'}^\dagger b_{q'}} + b_{q'} \delta_{qq'} \\ & = + \hbar \omega_q b_q \end{aligned}$$

$$\textcircled{2} = \sum_k D_{-q} a_{k+q}^\dagger a_k$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} b_q &= -i\omega_q b_q - \frac{i}{\hbar} \sum_k D_{-q} a_{k-q}^{\dagger} a_k \\ \frac{\partial}{\partial t} b_q^{\dagger} &= +i\omega_q b_q^{\dagger} + \frac{i}{\hbar} \sum_k D_{-q} a_{k-q}^{\dagger} a_k \end{aligned} \right\} \text{DGL-System} \\ \text{beschreibt die} \\ \text{Phonodynamik}$$

Lösung:  $b_q(t) = \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_q(t-t')} \left[ -\frac{i}{\hbar} D_{-q} \sum_k a_{k-q}^{\dagger}(t') a_k(t') \right]$

(inhomogenität)

$$= -\frac{i}{\hbar} D_{-q} \sum_k \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 ds (-1) a_{k-q}^{\dagger}(t-s) a_k(t-s) e^{-i\omega_q s} e^{-\gamma s}$$

$s = t - t'$

Ansatz:  $a_{k-q}^{\dagger}(t-s) = \tilde{a}_{k-q}^{\dagger}(t-s) e^{-\frac{i\epsilon_{k-q}}{\hbar}(t-s)}$

langsam veränderliche  
Größe im Vergleich zur  
Exp.-Fkt.

$$b_q(t) \approx \frac{i}{\hbar} D_{-q} \sum_k \tilde{a}_{k-q}^{\dagger}(t) \tilde{a}_k(t) \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^{\infty} ds e^{-\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega_q + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k)s} e^{-\gamma s}$$

$$= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\hbar} D_{-q} \sum_k a_{k-q}^{\dagger}(t) a_k(t) \frac{-i}{-\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega_q + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k) - \gamma}$$

Ansatz  $b_q^{\dagger}$

Einsetzen in den Hamilton-Operator

$$H_{e-ph} = \sum_{\ell} \sum_q |D_q|^2 \frac{2\hbar\omega_q}{(\epsilon_{\ell} - \epsilon_{\ell-q})^2 - \hbar^2\omega_q^2} \left[ \overset{\textcircled{1}}{a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell}} + \sum_k \overset{\textcircled{2}}{a_{k+q}^{\dagger} a_{\ell-q}^{\dagger} a_{\ell} a_k} \right]$$



$$\sum_{k'kq} a_{k+q}^{\dagger} a_k a_{k'-q}^{\dagger} a_{k'}$$

$\uparrow$   
 $\delta_{k,k'-q} - a_{k+q}^{\dagger} a_k$

$$a_{k+q}^{\dagger} a_{k'} \delta_{k,k'-q} - a_{k+q}^{\dagger} a_{k'-q}^{\dagger} a_k a_{k'}$$

$$\sum_{k'} a_{k'}^{\dagger} a_k + \sum_{k'kq} a_{k+q}^{\dagger} a_{k'-q}^{\dagger} a_{k'} a_k$$

Phononoperatoren werden aus dem H-Operator eliminiert.  
 H hängt nur noch von elektr. Operatoren ab

Term ① entspricht einer Energie-Renormierung der Elektronen  
 durch El-ph- $\omega\omega$  um  $\sum_q |D_q|^2 \frac{2\hbar\omega_q}{(\epsilon_l - \epsilon_{l+q})^2 - \hbar^2\omega_q^2} = \Delta \epsilon_l$

$$H_e = \sum_l \epsilon_l a_l^{\dagger} a_l$$

$$\rightarrow H_e^{\text{ren}} = \sum_l (\epsilon_l + \Delta \epsilon_l) a_l^{\dagger} a_l$$

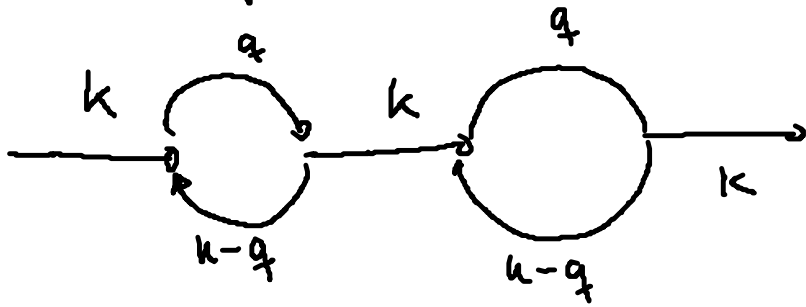
$\Rightarrow$  neue Quasiteilchen: Polaronen  
 mit neuer Energie-Dispersion

$$\Delta \epsilon_l = - \sum_q |D_q|^2 \frac{2\hbar\omega_q}{\underbrace{(\hbar\omega_q - \epsilon_l + \epsilon_{l+q})}_{>0} \underbrace{(\hbar\omega_q + \epsilon_l - \epsilon_{l+q})}_{>0}}$$

am Bandminimum

$$k \approx 0 \quad \hbar\omega_q > \epsilon_l, \epsilon_{l+q}$$

$\Rightarrow$  Renormierung senkt die Energie,  
d.h. Polaron sind energetisch stabiler  
als freie Elektronen



Elektronen werden von  
einer Wolke von Phononen  
begleitet, die ständig  
absorbiert und reemittiert  
werden und umgekehrt

Für langsame Elektronen, d.h.  $k \rightarrow 0$  gilt

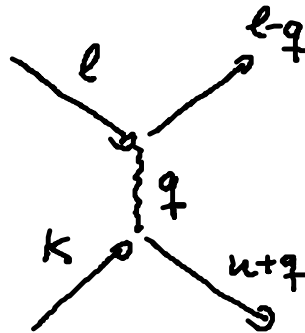
$$\Delta E_e = - \sum_q |D_q|^2 \frac{2\hbar\omega_q}{(\hbar\omega_q + \epsilon_q)(\hbar\omega_q - \epsilon_q)}$$

Selbsterregie der  
Elektronen im Gitter

Für schnelle Elektronen, d.h.  $k \rightarrow \infty$  verschwindet der Einfluß  
des Gitters  $\Delta E_e \sim \frac{1}{\epsilon_k} \rightarrow 0$

Term (2)  $\sum_{l, l+q} V_{lq} a_{l+q}^\dagger a_{l-q}^\dagger a_l a_k$

$$V_{lq} = \frac{|D_q|^2 \hbar\omega_q}{(\epsilon_l - \epsilon_{l+q})^2 - \hbar^2\omega_q^2}$$



Matrixelement eines effektiven  
El-El-WW

Diese WW kann auch negativ sein

$$(\hbar\omega)^2 > (\epsilon_l - \epsilon_{l+q})^2 \Rightarrow V_{lq} < 0 \quad \text{im Gegensatz zu Coulomb-}$$

Interpretation: Ein Elektron verzerrt das Gitter. Ein zweites Elektron spürt die Verzerrung und wird angezogen  $\Rightarrow$  Es bilden sich Elektronenpaare aus: Cooper-Paare  
 $\Rightarrow$  Supraleitung

WW