

weiter zu 4. Elektrischer Widerstand durch Elektron-Phonon-Streuung

Relaxationszeitnäherung

$$\dot{p}_k^1 |_{el-ph}(t) = -\frac{1}{\tau} p_k^1(t)$$

$\tau \equiv$ Relaxationszeit

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

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

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

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

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

lineare DGL 1. Ordnung

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

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

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

Grenzfallbetrachtung:

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

τ 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

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

parabolische Bandstruktur

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

elektron. Geschwindigkeit

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

$$\boxed{j^\alpha = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} E^\beta} \quad \text{Ohmsche Gesetz}$$

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

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

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

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

$$\vec{j} = - \frac{q^2}{m^*} \tau \int d^3k \underbrace{\vec{k} \vec{E} \cdot \vec{v}_k^0}_{\vec{k} \vec{E}} p_k^0$$

$$= - \frac{q^2}{m^*} \tau \int d^3k p_k^0 \vec{E}$$

$$= - \frac{q^2}{m^*} \tau E \underbrace{\int d^3k p_k^0}_n = - \frac{q^2 n}{m^*} \tau E$$

5. Temperatur-Abhängigkeit des Widerstands

$$\gamma = \frac{1}{\tau} = \sum_q W_{k \rightarrow k+q}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_q |D_q|^2 n_q \left(\delta[(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_q) \frac{1}{\hbar}] + \delta[(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k + \hbar\omega_q) \frac{1}{\hbar}] \right)$$

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

Bose-Verteilung

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

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

\Rightarrow Widerstand wächst proportional mit der Temperatur

für hohe T

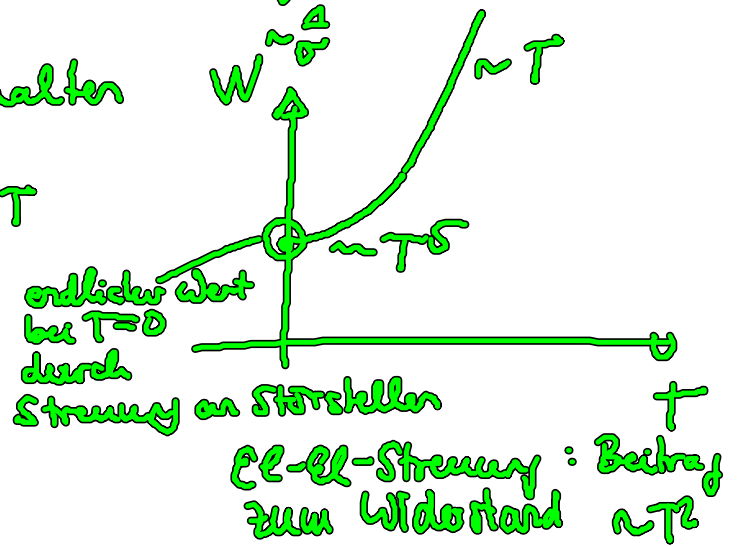
Je höher T, desto mehr Phononen sind im System vorhanden, desto effizienter sind die El-Ph-Stöße, desto kleiner ist die Stoßzeit τ und desto größer ist der Widerstand

Bloch-Grüneisen-Verhalten

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

⇒ Überspannung

hierfür ist die Relaxationszeit-Näherung nicht ausreichend



$$\dot{p}_k = -\sum_q v_{k \rightarrow k+q} (p_k - p_{k+q})$$

Zusammenfassung Kapitel 5

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

- Drude-Modell: klassischer Beschreibung

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

- Strom als gem. Observable

$$\langle j \rangle = \frac{q}{V} \sum_k p_k \frac{v_k}{\hbar k}$$

• Elektronen im elektrischen Feld

$$i\hbar \dot{f}_k = i\frac{q}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_k f_k$$

Lösung $f_k(t) = f(k - \frac{q}{\hbar} \vec{E} t)$

Strömungs im Ortsraum \rightarrow Ausweichen des Impulses mit der Zeit

Strom divergiert, da Teilchen unendlich beschleunigt werden

• Elektrischer Widerstand durch el-ph-Streuung

Relaxationszeitnäherung $\dot{f}_k^1 = -\frac{1}{\tau} f_k^1(t)$

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

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

$$f_k^1 = -\frac{q}{\hbar} \tau \vec{E} \cdot \nabla_k f_k^0$$

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

VI Supraleitung

Starke Elektron-Phonon Kopplung

1. Phonodynamik - 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
 Polarons

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

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} D_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}})$$

H_e H_{ph} H_{e-ph}

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

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

$$\textcircled{2} = \sum_{\mathbf{k}} D_{-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$$

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

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

$$s = t - t' = -\frac{i}{\hbar} D_{-q} \sum_k \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 ds (-1) a_{k-q}^\dagger(t-s) a_k(t-s) e^{-i\omega_q s} e^{-\gamma s}$$

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

Lagrange veränderliche
Größe im Vergleich zur
Exp.-Fkt.

$$b_q(t) \approx \frac{i}{\hbar} D_{-q} \sum_k \tilde{a}_{k-q}^\dagger(t) \tilde{a}_k(t) \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^\infty ds e^{-\frac{1}{\hbar}(\hbar\omega_q + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k)s} e^{-\gamma s}$$

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

Ansatz b_q^\dagger

Einsetzen in den Hamilton-Operator

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

①

②

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

\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-Rennormierung der Elektronen
 durch El-ph-Wechselwirkung um $\sum_q |D_q|^2 \frac{2\hbar\omega_q}{(\epsilon - \epsilon_{k+q})^2 - \hbar^2\omega_q^2} = \Delta \epsilon_k$

$$H_e = \sum_{\ell} \epsilon_{\ell} a_{\ell}^\dagger a_{\ell}$$

$$\rightarrow H_e^{\text{ren}} = \sum_{\ell} (\epsilon_{\ell} + \Delta \epsilon_{\ell}) a_{\ell}^\dagger a_{\ell}$$

\Rightarrow neue Quasiteilchen: Polaronen
 mit neuer Energie-Dispersion

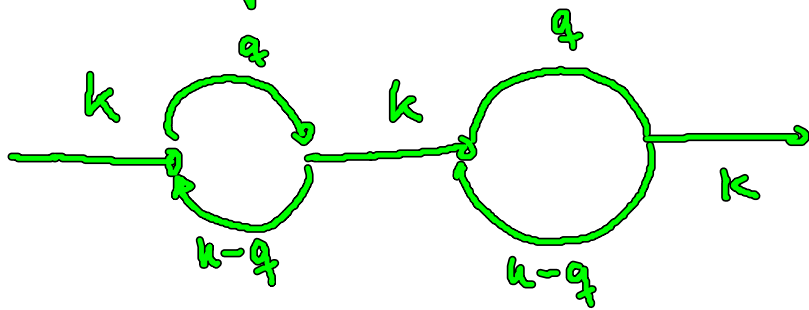
$$\Delta \epsilon_{\ell} = - \sum_q |D_q|^2 \frac{2\hbar\omega_q}{(\hbar\omega_q - \epsilon_{\ell} + \epsilon_{\ell+q}) (\hbar\omega_q + \epsilon_{\ell} - \epsilon_{\ell+q})}$$

> 0 > 0

am Bandminimum

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

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



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

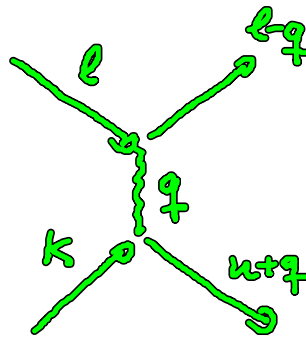
Für langsame Elektronen, d.h. $k \rightarrow 0$ gilt

$$\Delta E_e = - \sum_q |D_q|^2 \frac{2\hbar\omega_q}{(\hbar\omega_q + E_q)(\hbar\omega_q - E_q)} \quad \begin{array}{l} \text{Selbstenergie der} \\ \text{Elektronen im Gitter} \end{array}$$

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

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

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



Matrixelement eines effektiven
El-El-WW

Diese WW kann auch negativ sein

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

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