weiter zu VIII Elektrischer Transport und Widerstand

WH: Ziel ist die Berechnung des Ladungstransports unter Einfluß eines elektrischen Felds

- Drude $m\ddot{r} = qE \underbrace{- \frac{m}{\tau} v}_{\text{phänomenologische Reibungskraft}}$

  Lösung $v = \frac{q\tau}{m} E$

  $\rightarrow$ Strom $j = nqv = \frac{nq^2}{m} \tau E = \sigma E$ Ohmsches Gesetz

- Quantenmechanische Beschreibung

  $$j = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \sum_{n_1 n_2} \varphi^*_{n_1}(r) \left[p - qA \right] \varphi_{n_2}(r)\, a^+_{n_1} a_{n_2} + h.c.$$

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

- Elektronen im elektrischen Feld

  $$H_{el\text{-}feld} = -iq \sum_k E_{ext} \cdot \nabla_k\, a^+_k a_k$$

  $$i\hbar \dot{f}_k = -iq\, E \cdot \nabla_k f_k$$

  Lösungsansatz: $f_k(t) = f\left(k - \underline{\frac{q}{\hbar} E t}\right)$

  Verschiebung der Verteilung mit der Zeit t getrieben durch das elektrische Feld

Annahme freier Elektronen im E-Feld führt zu einer unphysikal. unendlichen Beschleunigung der Elektronen

$j \to \infty$ für $t \to \infty$

Einführung von Elektron-Phonon bzw.
Elektron-Elektron-Streuung ist entscheidend
$\to$ Abbremsung der Beschleunigung

4. Elektrischer Widerstand durch Elektron-Phonon-Streuung

Elektron-Phonon-WW bewirkt Übergänge von Elektronen von einem Zustand k in einen anderen $k' = k + q$ unter Absorption eines Phonons mit Impuls q oder Emission eines Phonons mit Impuls $-q$.

Boltzmann-Gleichung beschreibt die Dynamik eines solchen Elektronenzustands. Die Lösung ist numerisch anspruchsvoll, da mehrere mehr-dimensionale Integrale auftauchen

Näherung: Schwache Elektron-Phonon-WW $\to$ Boseverteilung für Phononen

Linearisierung $\rho_k(t) = \rho_k^0 + \rho_k^1(t)$

Gleichgewichtsverteilung (Fermi-Funktion) — Störung durch el. Feld

Markov-Approximation, d.h. keine Gedächtniseffekte

$$\dot{\rho}_k\Big|_{el\text{-}ph} = \underbrace{-\sum_q W_{k\to k+q}\, \rho_k^{\,(1-\rho_{k+q})}}_{\text{Ausstreuung}} + \underbrace{\sum_q W_{k+q\to k}\,(1-\rho_k)\,\rho_{k+q}}_{\text{Einstreuung}}$$

Schwache Besetzung mit Elektronen, d.h.

$\rho_k, \rho_{k+q} \ll 1$

$$\dot{\rho}_k\Big|_{el-ph} \approx -\sum_q W_{k\to k+q}\, \rho_k + \sum_k W_{k+q\to k}\, \rho_{k+q}$$

Einsetzen der Linearisierung $\rho_k(t) = \rho_k^0 + \rho_k^1(t)$

$$\dot{\rho}_k\Big|_{el\cdot ph} = \left.\begin{aligned} &-\sum_q W_{k\to k+q}\, \rho_k^0 + \sum_q W_{k+q\to k}\, \rho_{k+q}^0 \end{aligned}\right\} = 0$$

da stationäre Lösung $\dot{\rho}_k^0 = 0$ d.h. Ein- und Ausstreuung sind gleich groß

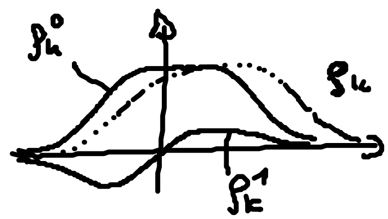
$$-\sum_q W_{k\to k+q}\, \rho_k^1 + \sum_q W_{k+q\to k}\, \rho_{k+q}^1$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\rho}_k^1 = -\sum_q W_{k\to k+q}\,(\rho_k^1 - \rho_{k+q}^1)$$

wird vernachlässigt bzw. es wird in einem effektiven τ mit berücksichtigt

$W_{k\to k+q} \approx W_{k+q\to k}$ unter Vernachlässigung des Terms der spontanen Phononemission $n_q + 1 \approx n_q$

$\rho_k^1 = \rho_k - \rho_k^0 \qquad \sum_q \rho_{k+q}^1\, W_{k\to k+q} \approx W \sum_q \rho_{k+q}^1 \approx 0$



Relaxationszeitnäherung $\quad \dot{\rho}_k^1(t) = -\frac{1}{\tau}\rho_k^1(t)$

mit $\frac{1}{\tau} = \sum_q W_{k\to k+q}$ Summe über alle Prozesse, die zum Abklingen von ρ_k^1 führen

$\tau \mathrel{\hat{=}}$ Zeit, mit der die Störung abklingt
bzw. Zeit, mit der die Nichtgleichgewichtsverteilung in eine Fermi-Funktion übergeht

Lösung $\quad \rho_k(t) = \rho_k^0\, e^{-t/\tau}$

Gesamtgleichung für elektrischen Transport

$$\underbrace{\left(\partial_t + \frac{q\vec{E}}{\hbar}\cdot\nabla_k\right)}_{\substack{\text{Beschleunigung}\\ \text{im E-Feld}}}\left[\underbrace{\rho_k^0}_{\text{bekannt}} + \underset{\substack{\uparrow\\ \text{gesucht}}}{\rho_k^1(t)}\right] = \underbrace{-\gamma\,\rho_k^1(t)}_{\substack{\text{Elektron-Phonon-WW}\\ \text{als Reibungskraft}}} \quad \text{mit } \gamma = \frac{1}{\tau}$$

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

Vernachlässigung $\frac{q\vec{E}}{\hbar}\cdot\nabla_k\,\rho_k^1(t)$ getrieben durch E

$\sim E^2$

hier nur Interesse an linearer Antwort

lineare DGL 1. Ordnung

$$\rho_k^1(t) = \int_0^t dt'\; e^{-\gamma(t-t')}\left[\underset{\substack{\uparrow\\ \text{Inhomogenität}}}{-\frac{q\vec{E}}{\hbar}\cdot\vec{\nabla}_k\,\rho_k^0}\right]$$

0: Einschalt-Zeitpunkt

$$= -\frac{q\vec{E}}{\hbar\gamma}\cdot\vec{\nabla}_k\,\rho_k^0\,\left(1-e^{-\gamma t}\right)$$

$\rho_k^1(t)$ bestimmt die feldinduzierte Änderung der Besetzung des elektronischen Zustands k

Grenzfall-Betrachtung

i) $t \ll \tau$, d.h. Elektron-Phonon-WW vernachlässigbar

τ groß $\Rightarrow$ γ klein : Taylor-Entwicklung der Exponentialfunktion

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

$$\Rightarrow \quad \rho_k^1(t) \approx -\frac{q\vec{E}}{\hbar}\,\vec{\nabla}_k \rho_k^0\, \underline{t} \quad \sim t$$

$$\rho_k^1(t) \to \infty \quad \text{für } t \to \infty$$

unphysikalischer Grenzfall der freien Bewegung

ii) $t \gg \tau$, d.h. Elektron-Phonon-WW wichtig

Es bildet sich eine stationäre Lösung aus

$$\rho_k^1 \approx -\frac{q\vec{E}}{\hbar\gamma}\cdot\vec{\nabla}_k \rho_k^0 \quad \sim E \qquad \text{da } e^{-\gamma t} \to 0 \text{ für } \gamma \text{ groß}$$

$\Rightarrow$ Beschleunigung der Elektronen im Feld wird durch die Elektron-Phonon-Streuung ausbalanciert und führt zum stationären Stromfluß

<u>Berechnung des Stroms</u>

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

antisymmetrisch → verschwindet bei der Integration

$$= \frac{q}{m^*}\frac{1}{V}\frac{\cancel{V}}{(2\pi)^3}\int d^3k\; \cancel{\hbar}\vec{k}\; \underbrace{\rho_k^1}_{-\frac{q\vec{E}}{\cancel{\hbar}\gamma}\cdot\vec{\nabla}_k \rho_k^0}$$

$$= -\frac{q^2}{m^*\gamma}\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\; \vec{k}\;\vec{E}\cdot\underbrace{\vec{\nabla}_k \rho_k^0}_{\nabla_k \frac{1}{e^{\frac{1}{k_BT}(E_k-\mu)}+1}}$$

$$= \partial \varepsilon_k f_k^0 \underbrace{\nabla_k \varepsilon_k}_{\text{innere Ableitung}} \qquad \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}$$

für parabolische Bandstruktur

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

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

elektronische Geschwindigkeit

$$p_k = m v_k = \hbar k$$

$$\vec{j} = -\frac{q^2}{\gamma}\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k \,(\vec{V}_k \cdot \vec{E})\,\vec{V}_k\, \partial \varepsilon_k f_k^0$$

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

mit dem Leitfähigkeitstensor

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{q^2}{(2\pi)^3 \gamma}\int d^3k \; v_k^\alpha v_k^\beta \,\partial \varepsilon_k f_k^0$$

In isotropen Medien wird es zu einem Skalar

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

5. Temperaturabhängigkeit des Widerstands

$$\gamma = \frac{1}{\tau} = \sum_q W_{k \to k+q} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\sum_q |D_q|^2 n_q \Big[\delta\left[(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \hbar\omega_q)/\hbar\right] + \delta\left[(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k + \hbar\omega_q)/\hbar\right] \Big]$$

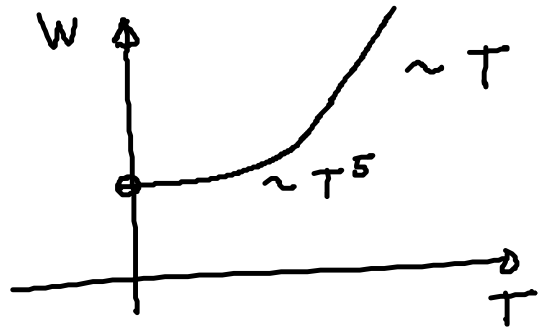
$$n_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega_q/k_BT} - 1} \overset{T\text{ groß}}{\approx} \frac{1}{1 + \frac{\hbar\omega_q}{k_BT} - 1} = \frac{k_B T}{\hbar\omega_q}$$

$$\Rightarrow \quad \gamma = \gamma(T) \sim T \quad \text{für hohe } T$$

$$\gamma(T) \sim e^{-\hbar\omega_q/k_BT} \quad \text{für niedrige Temperaturen}$$

Widerstand

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



experimentelle Beobachtung

endlicher Wert bei $T=0$ ist auf Streuung an Störstellen zurückzuführen

$W \sim T$ für hohe T

$W \sim T^5$ für kleine T $\Longrightarrow$ Übung (ausführlich)

Bloch-Grüneisen-Verhalten

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