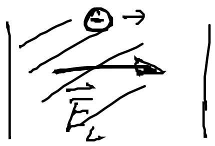
11.3 Elektronen im elektrischen Feld

- Ziel ist Beschreibung d. elektronischen Transports
- Elektronen im Einbandmodell im räumlich / zeitlich konstanten Feld $\vec{E}_L$



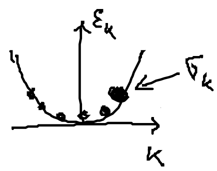
Strom $j = ?$

$$\langle \vec{j} \rangle = \frac{q}{V} \sum_k \sigma_k(t)\, \hbar^{-1} \vec{\nabla}_k \varepsilon_k$$

f. Elektron $q = -e$ $(e > 0)$

σ_k : Besetzungszahl v. Elektron in Zustand k

$\sigma_k = \langle a_k^\dagger(t)\, a_k(t) \rangle$



$\hbar^{-1} \vec{\nabla}_k \varepsilon_k \;\hat{=}\;$ Elektronengeschwindigkeit, f. einfache parabolische Dispersion

$$= \hbar^{-1} \vec{\nabla}_k \frac{k^2 \hbar^2}{2m^*} = \frac{\vec{k}\hbar}{m^*} = \frac{\text{Impuls}}{\text{Masse}}$$

d.h. $\sigma_k(t)$ ist gesucht unter Einfluß d. elektrischen Feldes

$$-i\hbar\, \dot{\sigma}_k = \Big\langle \Big[\underbrace{H_0}_{1} + \underbrace{H^L_{ext}}_{2} + \underbrace{H_{el\text{-}ph}}_{3},\; a_k^\dagger a_k \Big] \Big\rangle$$

1 Beitrag ist Null $\left[\sum_q \varepsilon_q a_q^\dagger a_q,\; a_k^\dagger a_k \right] = 0$

2 $= \left\langle \left[-iq\, \vec{E}_L \cdot \sum_q \vec{\nabla}_q a_q^\dagger a_q,\; a_k^\dagger a_k \right] \right\rangle$

$$= iq\, \vec{E}_L \cdot \vec{\nabla}_k \sigma_k \qquad \text{(zunächst ohne Beweis)}$$

③ Abschnitt 11.4.

Skizze f. Beweis von ②: detailliert in Übung

$$\Big[\sum_q \vec{\nabla}_q \, a^{+}_q a^{\downarrow}_q \,,\, a^{+}_k a_k \Big]$$

$$= \sum_q \Big\{ a^{+}_q \underbrace{\frac{a_{q+\delta q} - a_q}{\delta q}}_{\text{Def. d. Ableitg. (hier 1d)}} a^{+}_k a_k - a^{+}_k a_k \vec{\nabla}_q a^{+}_q a^{\downarrow}_q \Big\}$$

$$= \sum_q \Big\{ a^{+}_q \frac{\delta_{k,q+\delta q} - a^{+}_k a_{q+\delta q} - (\delta_{qk} + a^{+}_k a_q)}{\delta q} a_k - a^{+}_k a_k \vec{\nabla}_q a^{+}_q a^{\downarrow}_q \Big\}$$

usw. (Übung)

$$= -\vec{\nabla}_k \left(a^{+}_k a_k \right) \quad \text{f. } \delta q \to 0$$

Ergebnis f. Elektronbewegung in Feld:

$$\underbrace{\Big(\partial_t + \frac{q}{\hbar} \vec{E}_c \cdot \vec{\nabla}_k \Big)}_{\text{Beschleunigung d. El. im Feld}} \sigma_k = \underbrace{\begin{cases} 0 & \text{ohne El-Ph WW (jetzt)} \\ \partial_t \sigma_k \big|_{El\text{-}Ph} & \text{mit El-Ph WW (11.4)} \end{cases}}_{\text{11.4: elektrischer Widerstand}}$$

Bemerkung:

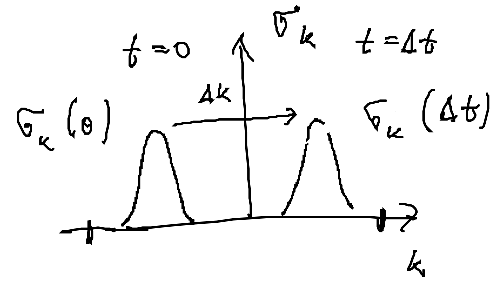
a) <u>Verschiebungstheorem:</u>

wenn $\partial_t \sigma_k \big|_{El-Ph} = 0$, so $\sigma_k(t) = f\left(\vec{k} - \frac{q}{\hbar}\vec{E}_L t\right)$

f ist eine beliebige Funktion, geg. durch Anfangsbeding. f. t=0

$\sigma_k(0) \equiv f(\vec{k})$ = z.B. Fermiverteilg.

<u>Interpretation:</u> Verteilungsfunktion / Besetzungszahl $\sigma_k(t)$ verschiebt sich im Verlauf der Zeit im $\vec{k}$-Raum:



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

⇕

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = q\vec{E}_L$$

Newton $\dot{\vec{p}} = q\vec{E}_L$

(deBroglie: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$)

b) i.a. auf Zeitskalen > El-Ph-Streuzeit ist die bisherige Behandlung schlecht, denn f. Standardmodelle, parabolische Bandstruktur und ∞ Ausdehnung d. Bands $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ f. $k \in [0, +\infty]$

$$\langle j \rangle \equiv j = \frac{q}{V}\sum_k \sigma_k \hbar^{-1} \nabla_k \varepsilon_k = \frac{q}{Vm^*}\sum_k f\left(\vec{k} - \frac{q\vec{E}_L}{\hbar}t\right)\hbar\vec{k}$$

↗ Verschiebungstheorem

Integrationsvariable $\vec{k} \longrightarrow \vec{k} + \frac{q\vec{E}_L}{\hbar}t$

$$= \frac{q}{Vm^*} \sum_k \underbrace{f(\vec{k})\Big(\hbar\vec{k}}_{\substack{=0,\ \text{weil} \\ \text{ungerade Funktion}}} + \frac{q\vec{E}t}{\hbar}\Big) \quad , \quad f(\vec{k}, t=0) = \text{Fermifunktion (gerade)}$$

$$= \frac{q}{Vm^*} \sum_k f(k) \frac{q\vec{E}t}{\hbar} = \frac{q^2}{m^*} \underbrace{n_0}_{\text{El-Dichte}} \frac{E}{\hbar} t \xrightarrow[t\to\infty]{} \underline{\underline{\infty}}$$

$\Rightarrow$ Stoßzeit

c) die Argumentation in (b) ist gewagt denn ∞ ausgedehntes Band $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ $\nexists$, Wellenpaket wird reflektiert an Zonengrenzen

$$j = \frac{q}{L} \sum_k \sigma_k \hbar^{-1} \partial_k \varepsilon_k$$

1d

$\underbrace{\delta_{k - \frac{qE}{\hbar}t}}_{f(k - \frac{qE}{\hbar}t)}$

nur 1 Zustand besetzt (Annahme)

echte Bandstruktur an tight Binding

$\varepsilon_0 \cos(ka)$ a: Zellgröße

ε_0 Vorfaktor, Energieeinheit

$$= \frac{q\varepsilon_0 a}{L\hbar} \sin\left(\frac{qaE}{\hbar} t\right)$$

Offensichtlich oszilliert Strom mit Frequenz $\frac{qaE}{\hbar} \hat{=}$ <u>Blochoszillation</u>

wenn $\omega_{Bl} = \frac{qaE}{\hbar} \gg \Gamma_{el-ph}$ werden diese Oszillation beobachtet.

11.4. Elektrischer Widerstand

Ziel: El-Phononanteil am el. Widerstand

$$\frac{\partial}{\partial t}\sigma_k\Big|_{el-ph} = -\underbrace{\Gamma^k_{out}}_{=}\sigma_k + \underbrace{\Gamma^k_{in}}_{=}(1-\sigma_k)$$

$$= -\overbrace{\sum_q W_{k\to k+q}(1-\sigma_{k+q})}\sigma_k + \overbrace{\sum_q W_{k+q\to k}\,\sigma_{k+q}}(1-\sigma_k)$$

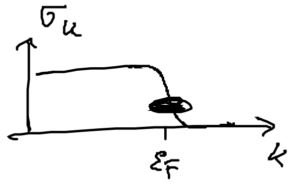
Annahmen f. Lsg. der Gleichg.:

a) Übergangsraten W werd. f. „heißen" Festkörper ausgerechnet

T so hoch, daß $n_q + 1 \approx n_q$ (Phononzahl $\gg 1$)

$$\Rightarrow \quad W_{k\to k+q} = W_{k+q\to k} = W_{qk}$$

b) Streuprozesse find. bei $\sigma_k \ll 1$ statt



$$\Rightarrow \quad \partial_t \sigma_k\Big|_{El-Ph} = -\sum_q W_{k\to k+q}\,\sigma_k + \sum_q W_{k+q\to k}\,\sigma_{k+q}$$

(Gleichg. wird linear)

c) linearisier. um klein. Felder $\sigma_k = \underbrace{\sigma_k^0}_{\substack{\text{ohne Feld}\\ \text{(Fermifunktion)}}} + \underbrace{\sigma_k^1}_{\substack{\text{klein. Feld-}\\ \text{induzierte Änderg.}}}$

$$\partial_t \sigma_k\Big|_{El-Ph} = \left.\begin{matrix} -\sum_q W_{k\to k+q}\,\sigma_k^0 + \sum_q W_{k+q\to k}\,\sigma_{k+q}^0 \end{matrix}\right\} = 0, \text{ denn Gleichgewicht}$$

$$-\underbrace{\sum_q W_{k\to k+q}\,\sigma_k^1}_{\displaystyle -\frac{1}{\tau_k}\sigma_k^1} + \underbrace{\sum_q W_{k+q\to k}\,\sigma^1_{k+q}}$$

$-\frac{1}{\tau_k}\sigma_k^1$

Zerfallszeit $\tau_k = \gamma_k^{-1}$

(d.h. El-Ph. WW wird Zustand k mit γ_k entleert)

Annahme $W \approx$ konstant

$$= W \sum_q \sigma^{(1)}_{k+q} = W \sum_q \sigma_q^{(1)} = 0$$

antisymmetrisch (später)

jetzt Bewegungsgl. f. σ_k mit Feld u. El-Ph-Streuung:

$$\left(\partial_t + \frac{q\vec{E}}{\hbar}\cdot\vec{\nabla}_k\right)\left(\sigma_k^0 + \sigma_k^1\right) = -\gamma_k\,\sigma_k^1$$

$\dot{\sigma}_k^0 = 0$, $\vec{E}\cdot\vec{\nabla}_k\,\sigma_k^1 \approx 0$; ist Term 2. Ordg. Feld

$$\partial_t\,\sigma_k^1 = -\frac{q\vec{E}}{\hbar}\cdot\vec{\nabla}_k\,\sigma_k^0 - \gamma_k\,\sigma_k^1$$

Lösg. f. σ_k^1:

$$\sigma_k^1(t) = \int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{-\gamma_k(t-t')}\left(-\frac{q\vec{E}_L}{\hbar}\cdot\vec{\nabla}_k\sigma_k^0\right)\theta(t')$$

„0"

Einschalten d. Felds

$$\sigma_k^1 = -\frac{e^{-\gamma_k(t-t')}}{\gamma_k}\,\frac{q\vec{E}_L}{\hbar}\cdot\vec{\nabla}_k\sigma_k^0\Bigg|_0^t$$

$$\boxed{\sigma_k^1 = -\frac{q\vec{E}_L\cdot\vec{\nabla}_k\sigma_k^0}{\hbar\,\gamma_k}\left(1 - e^{-\gamma_k t}\right) \xrightarrow[t\to\infty]{} -\frac{q\vec{E}_L\cdot\vec{\nabla}_k\sigma_k^0}{\gamma_k\,\hbar}}$$

Bemerkungen:

a) σ_k^1 bestimmt Änderung der Verteilungsfunktion nach Anschalten des elektr. Felds E_L

b) $t \gg \gamma_k^{-1}$ $\quad \sigma_k^1 = -q \dfrac{\vec{E}\cdot\vec{\nabla}_k \sigma_k^0}{\hbar \gamma_k} \quad \cancel{\xrightarrow{t\to\infty}} \infty$

$\hat{=}$ stationärer Strom, ausbalanciert durch WW Feld und El-Ph. Streuung

<u>Berechng d. Stroms:</u>

$$\vec{j} = \frac{q}{V}\sum_k \underbrace{(\sigma_k^0 + \overbrace{\sigma_k^1)\, \hbar^{-1}\vec{\nabla}_k \varepsilon_k}^{\text{symmetrisch} \neq 0}}_{\text{antisymmetrisch} \to 0} = \frac{q}{V}\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k\, \hbar^{-1}\vec{\nabla}_k \varepsilon_k \sigma_k^1$$

$q = -e$

$$\vec{j} = \frac{-e^2}{(2\pi)^3}\int d^3k\; \hbar^{-1}\vec{\nabla}_k \varepsilon_k\, \hbar^{-1}\underbrace{\vec{E}_L\cdot\vec{\nabla}_k \sigma_k^0}_{\vec{E}_L\cdot\vec{\nabla}_k\varepsilon_k \frac{\partial}{\partial\varepsilon_k}\sigma_k^0(\varepsilon_k)}\frac{1}{\gamma_k}$$

Def: $v_k^\alpha \equiv \dfrac{\vec{\nabla}_k \varepsilon_k}{\hbar}$ Elektronengeschwindigkeit

$$\boxed{\begin{array}{ll} j^\alpha = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta} E^\beta & \sigma_{\alpha\beta}: \text{Leitfähigkeitstensor} \\ \beta,\alpha = \{x,y,z\} & \sigma_{\alpha\beta} = -\dfrac{e^2}{(2\pi)^3}\int d^3k\, \partial_{\varepsilon_k}\sigma_k^0\, \gamma_k^{-1}\, v_k^\alpha v_k^\beta \end{array}}$$

Bemerkungen:

a) $j_\alpha \sim E_\beta$:
- ohmsch gesetz, anisotrop
- $\sigma_{\alpha\beta}$ hat Tensorcharakter
- im isotropen Fall $\varepsilon_{\vec{k}} = \varepsilon_{|\vec{k}|}$
  ist $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_0 \delta_{\alpha\beta} \mathrel{\hat{=}}$ Zahl

b) Drude modell - Grenzfall:

$$\vec{j} = -\frac{e^2}{\hbar^2 (2\pi)^3} \int d^3k \; \underbrace{\vec{\nabla}_k \varepsilon_k \; \vec{E}_L \cdot \vec{\nabla}_k}_{\text{"}\sim\text{"}} \sigma_k^{0} \quad \cdot \;\checkmark$$

isotrop, parabolisches Band $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

partielle Integration bezgl. $\vec{\nabla}_k$

$$= \frac{e^2}{m^*} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \, \sigma_k^{(0)} \, \vec{E}_L \, \frac{1}{\gamma_k}$$

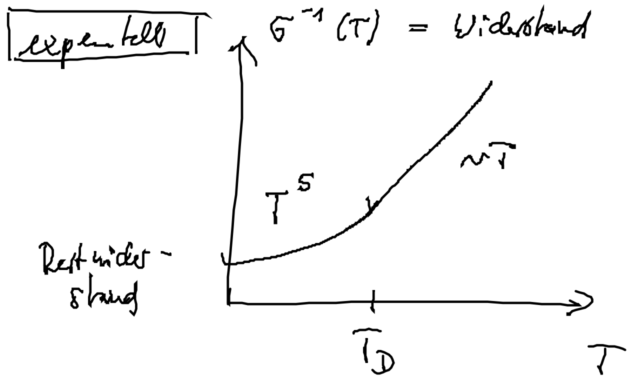
$\gamma_k = \gamma = \text{konst}$

$$= \underbrace{\frac{e^2 n_{el}}{m^* \gamma}}_{\text{Drude modell}} \vec{E} \quad \mathrel{\hat{=}} \text{Drude modell}$$

n_{el} = El-Dichte

11.5. Temperaturabhängigkeit d. elektrischen Widerstands

$\boxed{\text{experimentell}}$



Bloch-Grüneisen-Verhalten

$$\partial_t \sigma_k^1\Big|_{el-ph} = -\sum_q W_{k\to k+q}\left(\sigma_k^1 - \sigma_{k+q}^1\right) \quad \text{f. } n_q \gg 1$$

Ansatz im isotropen System

$$(*) \quad \sigma_k^1 = \underbrace{\alpha(t)}_{\text{Vorfaktoren}}\, \vec E_L\cdot\vec\nabla_k\, \sigma_k^0 = \alpha\, \vec E_L\cdot\vec e_k\, \partial_k\, \sigma_k^0 \quad \text{(Kugelkoord.)}$$

$$\vec e_k = \frac{\vec k}{|\vec k|}$$

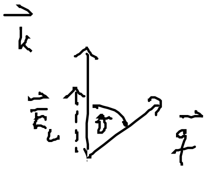
$$\dot\sigma_k^{(1)} = -\sum_q W_{k\to k+q}\,\alpha(t)\left(\vec E_L\cdot\frac{\vec k}{|\vec k|}\,\partial_k\sigma_k^0 - \vec E_L\cdot\frac{\vec k+\vec q}{|\vec k+\vec q|}\,\partial_{k+q}\,\sigma^0_{k+q}\right)$$

Streuung findet f. kleine q (akustische Phonon ω_q^{ph}) statt

$k \swarrow$ mitteln, $k = k$ weglassen

$$\approx -\sum_q W_{k\to k+q}\,\alpha(t)\left(\frac{\vec E_L\cdot\vec q}{|\vec k|}\,\partial_k\,\sigma_k^0\right)$$

$$\vec E_L = E_L\,\vec e_z$$



$$= -\sum_q W_{k\to k+q}\, \alpha(t)\, \frac{\cos\vartheta\, E_L\, q}{k}\, \underbrace{\partial_k \sigma_k^{0}}_{} \quad \text{nach } (*)$$

$$= -\underbrace{\sum_q W_{k\to k+q} \cdot \frac{\cos\vartheta\, q}{k}}_{} \,\sigma_k^{(1)}$$

$$\dot{\sigma}_k^{(1)} = -\gamma_k\, \sigma_k^{(1)}$$

$$\boxed{\gamma_k = \sum_q W_{k\to k+q}\, \frac{q\cos\vartheta}{k}} \quad \sim \sigma^{-1} \sim \underline{\underline{W}}$$

ist jetzt zu berechnen.