

## weiter zu III Elektrischer Transport und Widerstand

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

- Drude  $m \dot{v} = q E - \underbrace{\frac{m}{\tau} v}_{\text{phänomenologische Reibungskraft}}$

Lösung  $v = \frac{q \tau}{m} E$

→ Strom  $j = n q v = \frac{n q^2 \tau}{m} E = \sigma E$  Ohmsches Gesetz

- Quantenmechanische Beschreibung

$$j = \frac{1}{2} \frac{q}{\Omega} \sum_{n_1, m_1} \langle \psi_{n_1}^x(r) | [p - q A] | \psi_{n_2}(r) \rangle a_{n_1}^\dagger a_{n_2} + h.c.$$

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

- Elektronen im elektrischen Feld

$$\text{Hilf-feld} = -1q \sum_k E_{\text{ext}} \cdot \underbrace{D_k}_{\uparrow} a_k^\dagger a_k$$

$$i \hbar \dot{f}_k = -1q E \cdot D_k f_k$$

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

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

$$j \rightarrow \infty \quad \text{für } t \rightarrow \infty$$

Einführung von Elektron-Phonon bzw.  
Elektron-Elektron-Streuung ist entscheidend  
→ 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 Elektronenansatzes. Die Lösung ist numerisch anspruchsvoll, da mehrere mehr-dimensionalen Integrale auftauchen

Näherung: Schwache Elektron-Phonon-WW → Boseverteilung für Phononen  
Linearisierung  $f_k(t) = f_k^0 + f_k^1(t)$   
Gleichgewichtverteilung (Fermi-Funktion)  $f_k^0$   
Störung durch el. Feld  $f_k^1(t)$

Markov-Approximation, d.h. keine Gedächtniseffekte

$$\dot{f}_k \Big|_{\text{el-ph}} = \underbrace{- \sum_q W_{k \rightarrow k+q}}_{\text{Ausstreuung}} f_k (1-f_{k+q}) + \underbrace{\sum_q W_{k+q \rightarrow k}}_{\text{Einstreuung}} (1-f_k) f_{k+q}$$

Schwache Besetzung mit Elektronen, d.h.

$$f_k, f_{k+q} \ll 1$$

$$\dot{f}_k |_{el-ph} \approx - \sum_q W_{k \rightarrow k+q} f_k + \sum_k W_{k+q \rightarrow k} f_{k+q}$$

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

$$\left. \begin{aligned} \dot{f}_k |_{el-ph} = & - \sum_q W_{k \rightarrow k+q} f_k^0 + \sum_q W_{k+q \rightarrow k} f_{k+q}^0 \\ & - \sum_q W_{k \rightarrow k+q} f_k^1 + \sum_q W_{k+q \rightarrow k} f_{k+q}^1 \end{aligned} \right\} = 0$$

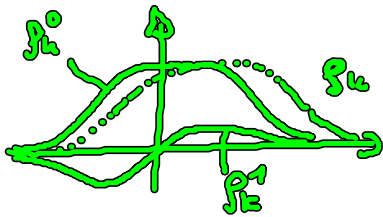
d. h. stationäre Lösung  $\dot{f}_k^0 = 0$   
d. h. Ein- und Ausstrahlung sind gleich groß

$$\Rightarrow \dot{f}_k^1 = - \sum_q W_{k \rightarrow k+q} (f_k^1 - f_{k+q}^1)$$

$\uparrow$  wird vernachlässigt bzw. es wird in einem effektiven  $\tau$  mit berücksichtigt

$W_{k \rightarrow k+q} \approx W_{k+q \rightarrow k}$  unter Vernachlässigung des Terms der spontanen Phononenmission  $n_{q+1} \approx n_q$

$$f_k^1 - f_k - f_k^0 \quad \sum_q f_{k+q}^1 W_{k \rightarrow k+q} \approx W \sum_q f_{k+q}^1 \approx 0$$



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

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

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

Lösung  $f_k(t) = f_k^0 e^{-t/\tau}$

# Gesamtgleichung für elektrischen Transport

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

Beschleunigung im E-Feld
↑

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

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

$\sim E^2$

hier nur Interesse an linearer Antwort

Lineare DGL 1. Ordnung

$$p_k^1(t) = \int_0^t dt' e^{-\gamma(t-t')} \left[ - \frac{q\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k p_k^0 \right]$$

Eintrittszeitpunkt
↑
inhomogenität

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

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

## Grenzfall-Betrachtung

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

$\tau$  groß  $\rightarrow \gamma$  klein : Taylor-Entwicklung der Exponentialfunktion

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

$$\Rightarrow p_k^1(t) \approx -\frac{q\vec{E}}{\hbar} \vec{v}_k p_k^0 t \sim t$$

$$p_k^1(t) \rightarrow \infty \quad \text{für } t \rightarrow \infty$$

unphysikalisches Grenzfall der freien Bewegung

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

Es bildet sich eine stationäre Lösung aus

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

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

### Berechnung des Stroms

$$\vec{j} = \frac{q}{m^*} \frac{1}{V} \sum_k \underbrace{(p_k^0 + p_k^1)}_{\substack{\text{antisymmetrisch} \\ \rightarrow \text{verschwindet bei} \\ \text{der Integration}}}$$

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

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

$$= \partial \epsilon_k p_k^0 \underbrace{\nabla_k \epsilon_k}_{\text{innere Ableitung}} \quad \frac{\partial}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial k}$$

für parabolische Bandstruktur

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

$$\nabla_k \epsilon_k = \frac{\hbar^2 \vec{k}}{m^*} = \vec{v}_k \hbar$$

↑  
elektrische  
Geschwindigkeit

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

$$\vec{j} = -\frac{q^2}{T} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k (\vec{v}_k \cdot \vec{E}) \vec{v}_k \partial \epsilon_k p_k^0$$

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

mit dem Leitfähigkeitstensor

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{q^2}{(2\pi)^3 T} \int d^3k v_k^\alpha v_k^\beta \partial \epsilon_k p_k^0$$

In isotropen Medien wird es zu einem Skalar

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

### 5. Temperaturabhängigkeit des Widerstands

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

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

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

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

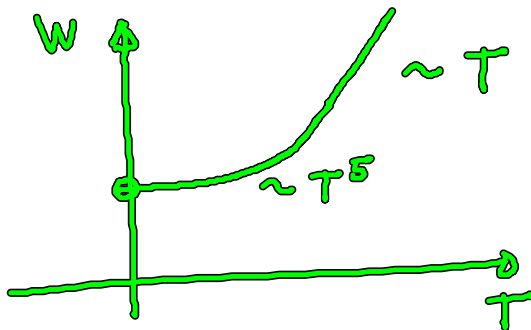
Widerstand

$$W = \frac{1}{\sigma} \sim \frac{1}{T} = r$$

$W \sim T$  für hohe  $T$

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

Block-Grüneisen-Verhalten



experimentelle  
Beobachtung

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

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