



Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 24**

Vorlesungsstunde: 04.02.2021

• *Bewegung von Kristallelektronen (nur ein Band, $T = 0$)*

gefüllte Bänder

$$J_q = \frac{q}{4\pi^3\hbar} \int_{1.BZ} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k = 0$$

elektrische Stromdichte
verschwindet

teilweise gefüllte Bänder

$$J_q = \frac{+q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{besetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k = \frac{-q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{unbesetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k$$

unbesetzte Zustände = fiktive
Teilchen mit Ladung $+e$
→ „Lochkonzept“

• *Eigenschaften von Elektronen und Löchern:*

i. Wellenvektor $\mathbf{k}_h = \Sigma \mathbf{k} - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e$

→ $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$

ii. Energie $\varepsilon_h(\mathbf{k}) = -\varepsilon_e(\mathbf{k})$

→ $\varepsilon_h(\mathbf{k}) = -\varepsilon_e(\mathbf{k})$

iii. effektive Masse (Vorzeichenwechsel bei \mathbf{k} und ε)

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_h = \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{-\partial^2 \varepsilon(k)}{(-\partial k)(-\partial k)} \right] = -\left(\frac{1}{m^*}\right)_e$$

→ $m_h^* = -m_e^*$

iv. Geschwindigkeit (Vorzeichenwechsel bei \mathbf{k} und ε)

$$\mathbf{v}_h(\mathbf{k}_h) = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right]_h = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{-\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{-\partial \mathbf{k}} \right]_e = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$$

→ $\mathbf{v}_h(\mathbf{k}_h) = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$

v. Bewegungsgleichungen

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_e}{dt} = \mathbf{F} = -e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B})$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_h}{dt} = \mathbf{F} = +e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B})$$

→ „Löcher“ bewegen sich wie
„Teilchen“ mit positiver Ladung

• Elektronen mit negativer effektiver Masse:

Elektronen mit einer negativen Ladung und einer negativen effektiven Masse (e.g. an Oberkante von Band) reagieren auf Kräfte genauso wie ein entsprechendes Teilchen mit einer positiven Ladung und positiven effektiven Masse

• semiklassische Bewegung im homogenen Magnetfeld

Bewegungsgleichungen:

$\varepsilon(\mathbf{k})$ und $\mathbf{k} \parallel \mathbf{B}$ sind

Konstanten der Bewegung

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = (-e)[\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] = \frac{(-e)}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)]$$

Bewegung im k-Raum:

- Bewegung erfolgt auf Flächen $\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const.}$, da $\partial \varepsilon / \partial t = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = (-e)[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \cdot \mathbf{v} = 0$
- Bahnkurven liegen in Ebene senkrecht zu \mathbf{B}

Bewegung im Ortsraum:

- Bahn in Ebene $\perp \mathbf{B} \Leftrightarrow$ der um 90° gedrehten und mit \hbar/eB skalierten Bahn im k-Raum
- gleichförmige Bewegung parallel zu \mathbf{B}

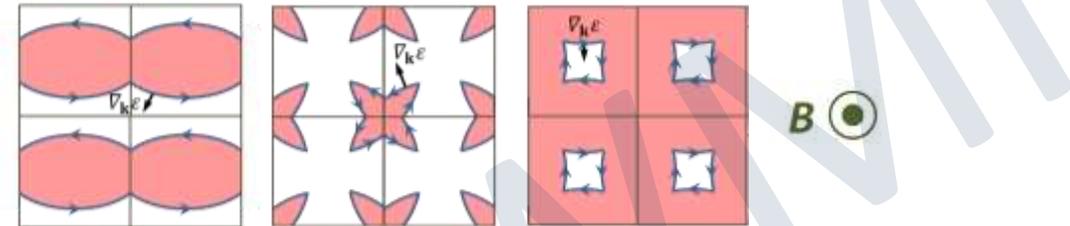
Elektron- und lochartige Bahnen:

- Umlaufsinn gegen (elektronartig) und im Uhrzeigersinn (lochartig)

• offene und geschlossene Bahnen

abhängig davon, ob Fermi-Fläche innerhalb der BZ offen oder geschlossen ist

- freie Elektronen: nur geschlossene Bahnen → Kreise



• Zyklotron-Frequenz

Umlauffrequenz der Kristallelektronen auf $\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const}$ – Fläche \perp Feldrichtung

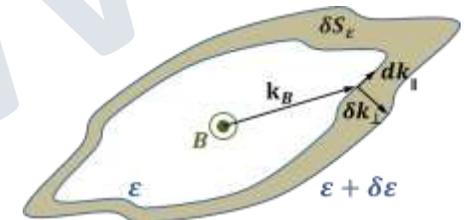
- freie Elektronen: $\omega_c = eB/m$

- Bandelektronen: $\omega_c = eB/m_c$

$$\omega_c = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S_\varepsilon(\mathbf{k}_B)}{\partial \varepsilon} \right)^{-1}$$

$$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S_\varepsilon(\mathbf{k}_B)}{\partial \varepsilon}$$

Zyklotron Masse



9.2.5 Semiklassische Bewegung in $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$

- Bewegung von Kristallelektronen im Ortsraum für gekreuzte elektrische und magnetische Felder

- Bewegungsgleichung für Bewegung in Ebene senkrecht zu \mathbf{B} (zunächst ohne \mathbf{E} -Feld)

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] = (-e)[\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}]$$

$$\hat{\mathbf{B}} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e) \hat{\mathbf{B}} \times [\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}] = (-e) \underbrace{[\dot{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\hat{\mathbf{B}} \cdot \dot{\mathbf{r}})]}_{\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})} = (-e)B [\dot{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{B}} \cdot \dot{\mathbf{r}})] = (-e)B \dot{\mathbf{r}}_{\perp}$$

- Integration ergibt

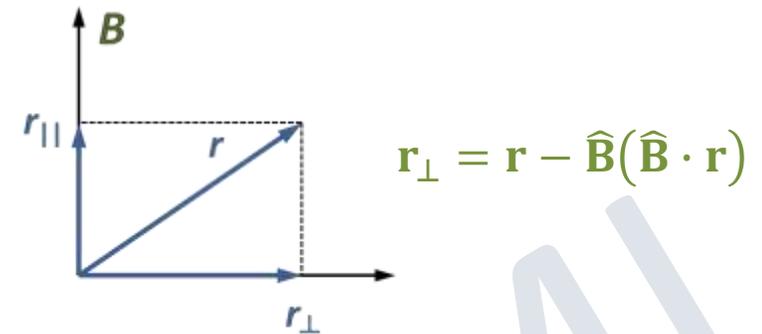
$$\mathbf{r}_{\perp}(t) - \mathbf{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)]$$

- zusätzliche Komponente durch \mathbf{E} -Feld

$$\hat{\mathbf{B}} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)B \dot{\mathbf{r}}_{\perp} + \hat{\mathbf{B}} \times (-e)\mathbf{E} = (-e)B \dot{\mathbf{r}}_{\perp} + eE(\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{B}})$$

- Integration ergibt

$$\mathbf{r}_{\perp}(t) - \mathbf{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] + \frac{E}{B} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{B}}) t$$

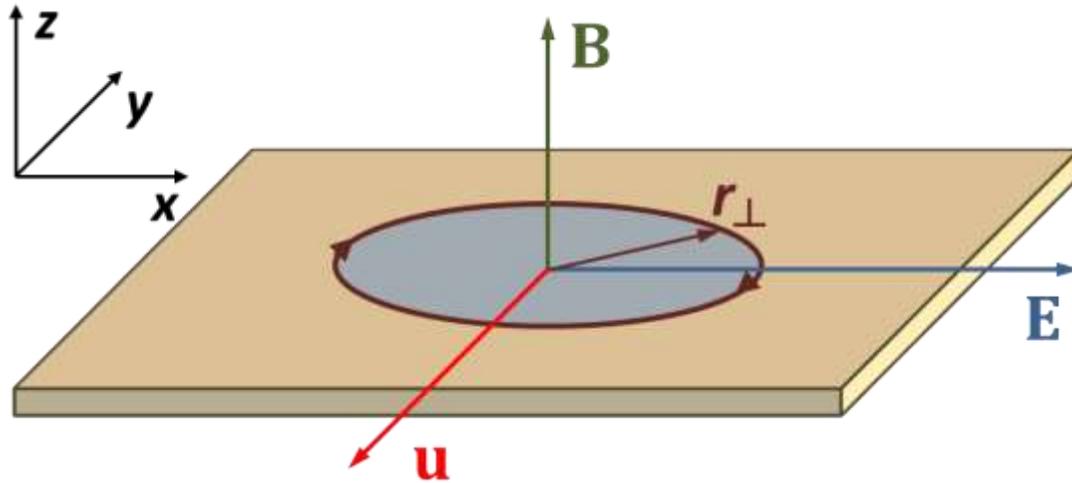


zusätzliche Geschwindigkeitskomponente

$$\mathbf{u} = \frac{E}{B} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{B}}), \quad \mathbf{u} \perp \mathbf{E}, \mathbf{B}$$

9.2.5 Semiklassische Bewegung in $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$

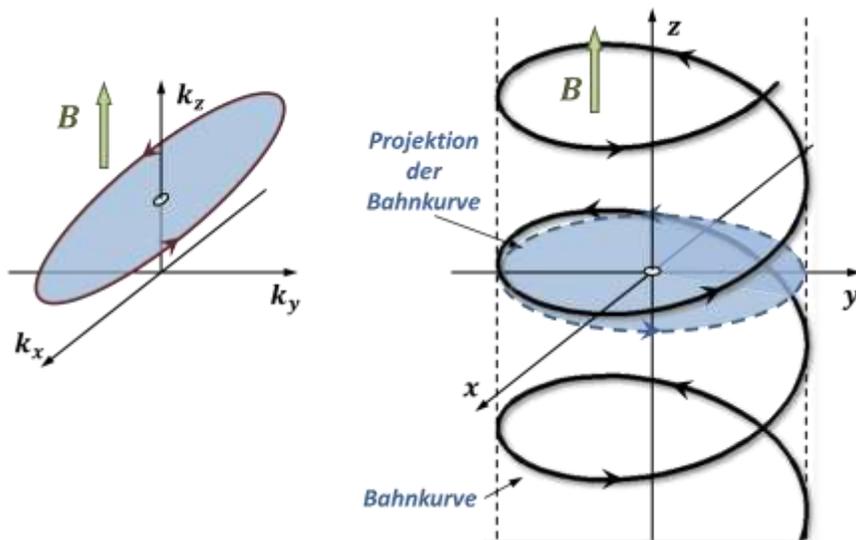
- Bewegung von Kristallelektronen im Ortsraum für $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$ ($\mathbf{B} \parallel \hat{z}$)



Projektion der Ortsraum-Trajektorie in die Ebene \perp zum Magnetfeld:

$$\mathbf{r}_{\perp} = \mathbf{r} - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{r})$$

ohne E-Feld:



mit E-Feld:

Bewegung im Ortsraum ist Überlagerung von **Bewegung auf geschlossener Bahn** und **Translationsbewegung** mit Driftgeschwindigkeit $\mathbf{u} \perp \mathbf{B}, \mathbf{E}$

9.2.5 Semiklassische Bewegung in $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$

- Bewegung von Kristallelektronen im k -Raum für $\mathbf{E} \perp \mathbf{B}$ ($\mathbf{B} \parallel \hat{\mathbf{z}}$)

– Bewegungsgleichung: $\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F} = (-e)[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]$

$$\mathbf{E} = -\frac{E}{B} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{B}}) \times \mathbf{B} = -\mathbf{u} \times \mathbf{B} \quad \nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k})/\hbar$$

$$\Rightarrow \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = e \mathbf{u} \times \mathbf{B} - \frac{e}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}] \simeq -\frac{e}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}}\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}]$$

$$\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}$$

analoge Gleichung zu Fall $\mathbf{E} = 0$, aber mit geänderter Energie $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})$

→ k -Raum-Trajektorien sind durch Schnittlinien von Ebenen senkrecht zu \mathbf{B} mit den Flächen $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \text{const.}$ gegeben

→ meist sehr gute Näherung für im Experiment verwendete \mathbf{E} - und \mathbf{B} -Felder: $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) \simeq \varepsilon(\mathbf{k})$

Abschätzung (wir verwenden $k < \frac{2\pi}{a} \simeq 10^9 \text{ m}^{-1}$ sowie $E \simeq 10^2 \text{ V/m}$, $B = 1 \text{ T}$)

$$\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} < \hbar \cdot \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{E}{B} \simeq 10^{-4} \text{ eV} \quad \Rightarrow \quad \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} \ll \varepsilon_{\text{F}} \text{ (einige eV)}$$

9.2.6 Hall-Effekt und Magnetwiderstand im Hochfeldgrenzfall

- Diskussion von Hall-Effekt und Magnetwiderstand unter folgenden Voraussetzungen
 - das anliegende Magnetfeld groß ist (typischerweise einige Tesla)
 - $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})$ weicht nur wenig von $\varepsilon(\mathbf{k})$ ab

Abschätzung zu Gültigkeit der Annahmen:

$$\text{mit } k \simeq k_F \simeq 10^9 \text{ 1/m, } E = 10^2 \text{ V/m, } B = 1 \text{ T} \rightarrow u = \frac{E}{B} \simeq 10^2 \text{ m/s folgt:}$$

$$\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} \simeq 10^{-34} \cdot 10^{11} / 1.6 \times 10^{-19} \simeq 10^{-4} \text{ eV} \ll \varepsilon_F \simeq 5 \text{ eV}$$

- Hall-Effekt und Magnetwiderstand hängen stark davon ab, ob alle besetzten (oder unbesetzten) Zustände auf geschlossenen Bahnen liegen

WMI

9.2.6 Hall-Effekt und Magnetwiderstand im Hochfeldgrenzfall

- Hall-Effekt, geschlossene Bahnen

- wir gehen von *hohen Magnetfelder* und *reinen Proben/tiefen Temperaturen* aus $\rightarrow \omega_c \tau \gg 1$
 \rightarrow **Elektronen können zwischen zwei Stoßprozessen mehrere Kreisbahnen durchlaufen**

- Ausgangspunkt:

$$\mathbf{r}_\perp(t) - \mathbf{r}_\perp(0) = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] + \frac{E}{B} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{B}}) t = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] + \mathbf{u} t$$

- für $t = \tau \gg$ Umlaufzeit ($\omega_c \tau \gg 1$) gilt:

$$\frac{\mathbf{r}_\perp(\tau) - \mathbf{r}_\perp(0)}{\tau} = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times \underbrace{\frac{[\mathbf{k}(\tau) - \mathbf{k}(0)]}{\tau}}_{\text{mittelt sich für } t = \tau \gg \text{Umlaufzeit zu Null weg, da } \mathbf{k}(\tau) - \mathbf{k}(0) \text{ beschränkte Funktion ist (geschlossene Trajektorien)}} + \mathbf{u}$$

mittelt sich für $t = \tau \gg$ Umlaufzeit zu Null weg, da $\mathbf{k}(\tau) - \mathbf{k}(0)$ beschränkte Funktion ist (geschlossene Trajektorien)

- \rightarrow **für große t verschwindet mittlere Bewegungskomponente durch Kreisbewegung und es bleibt nur Driftbewegung \mathbf{u} übrig**

9.2.6 Hall-Effekt und Magnetwiderstand im Hochfeldgrenzfall

- Hall-Effekt, geschlossene Bahnen

- elektrische Stromdichte senkrecht zu Magnetfeld und elektrischem Feld

$$\lim_{\tau/T \rightarrow \infty} \mathbf{J}_{\perp} = (-e)n \mathbf{u} = n_e(-e) \frac{E}{B} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{B}}) \quad (\text{alle besetzten Zustände besitzen geschlossene Trajektorien})$$

$$\lim_{\tau/T \rightarrow \infty} \mathbf{J}_{\perp} = (+e)n \mathbf{u} = n_h(+e) \frac{E}{B} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{B}}) \quad (\text{alle unbesetzten Zustände besitzen geschlossene Trajektorien})$$

- **Interpretation:** Lorentz-Kraft ist für $\omega_c \tau \rightarrow \infty$ so effektiv, dass sie Energieaufnahme in \mathbf{E} -Feld verhindert
 - Driftbewegung \mathbf{u} senkrecht zu angelegtem \mathbf{E} -Feld
 - Hall-Winkel $\approx 90^\circ$

- **Experiment:** $\mathbf{J}_{\perp} = 0 \rightarrow$ es baut sich Hall-Feld E_y auf bis $\mathbf{F}_E = \mathbf{F}_L$

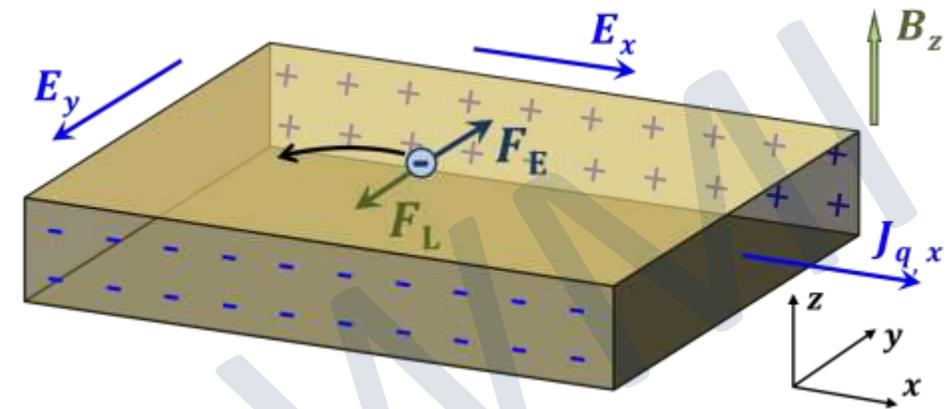
$$(-e)E_y = (-e)v_x B_z \quad \text{bzw.} \quad (+e)E_y = (+e)v_x B_z$$

mit $J_x = n_e(-e)v_x$ bzw. $J_x = n_h(+e)v_x$ folgt

$$E_y = \frac{1}{n_e(-e)} J_x B_z \quad \text{bzw.} \quad E_y = \frac{1}{n_h(+e)} J_x B_z$$

und damit die Hall-Konstanten $R_H = \frac{E_y}{B J_x}$:

$$R_H = -\frac{1}{n_e} \quad (\text{Elektronen}) \quad R_H = +\frac{1}{n_h e} \quad (\text{Löcher}) \quad \omega_c \tau \gg 1$$



9.2.6 Hall-Effekt und Magnetwiderstand im Hochfeldgrenzfall

- Hall-Effekt, geschlossene Bahnen

$$R_H = -\frac{1}{n_e e} \quad (\text{Elektronen}) \quad R_H = +\frac{1}{n_h e} \quad (\text{Löcher}) \quad \omega_c \tau \gg 1$$

- Ergebnis für Elektronen entspricht demjenigen, dass wir für freie Elektronen erhalten haben
 - ➔ **Hall-Konstante liefert Vorzeichen und Dichte der Ladungsträger**
- für die unbesetzten Zustände (Löcher) erhalten wir eine **positive Hall-Konstante**
 - ➔ unbesetzte Zustände können als Löcher mit positiver Ladung aufgefasst werden
 - ➔ **semiklassisches Modell liefert Erklärung für experimentell beobachtete positive Hall-Konstante**



9.2.6 Hall-Effekt und Magnetwiderstand im Hochfeldgrenzfall

- **Hall-Effekt: Kompensationseffekte**

- in vielen Materialien tragen mehrere Bänder zum Hall-Effekt bei → **Mehrband-Modell für Hall-Effekt**
- vorherige Betrachtung gilt für jedes Band separat
 - ➔ gemessener Hall-Effekt ergibt **effektive Ladungsträgerdichte**
 - ➔ **Kompensationseffekte** bei elektronen- und lochartigen Bahnen in verschiedenen Bändern

- **Beispiel: Material mit fast vollständig gefüllter 1. BZ und fast leerer 2. BZ**

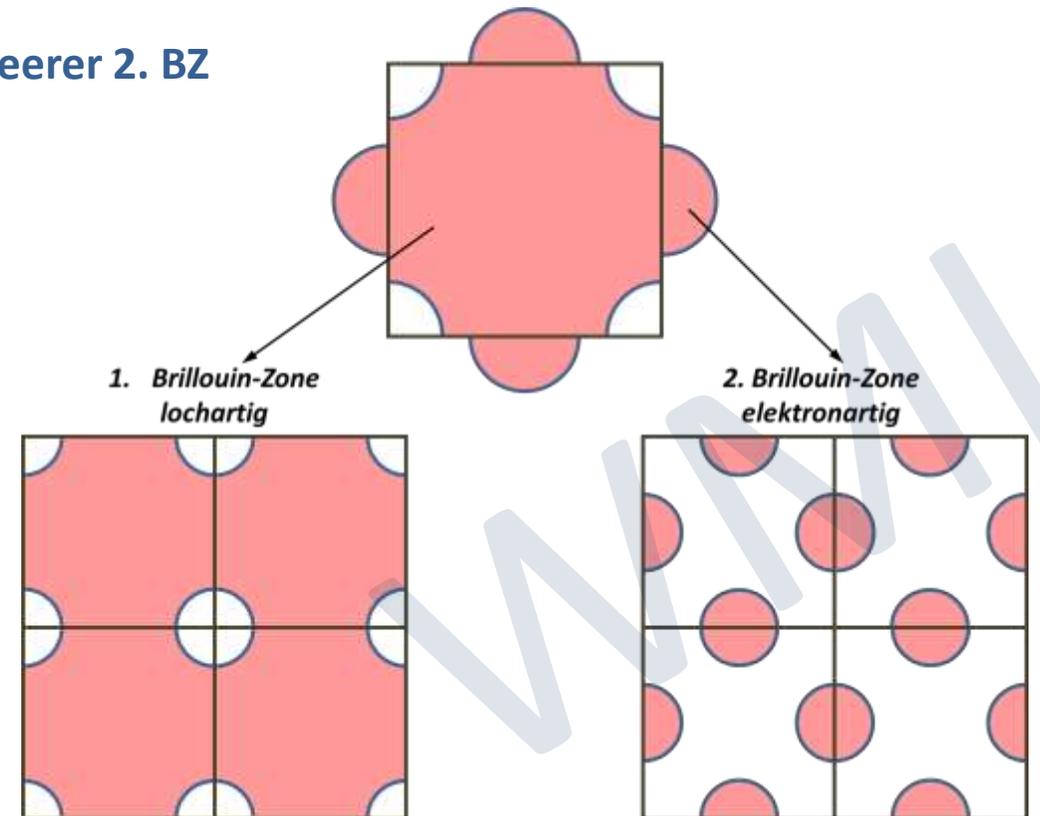
1. Band:

- alle geschlossenen Bahnen sind lochartig
- positive Hall-Konstante

2. Band:

- alle geschlossenen Bahnen sind elektronartig
- negative Hall-Konstante

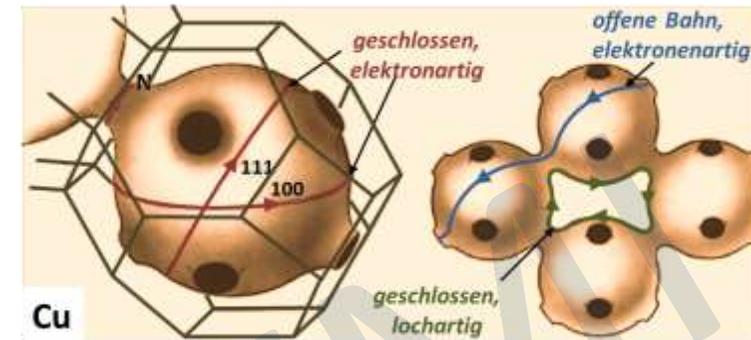
➔ **gemessene Hall-Konstante ist aufgrund von Kompensationseffekten klein**



9.2.6 Hall-Effekt und Magnetwiderstand im Hochfeldgrenzfall

- Hall-Effekt und Magnetwiderstand: offene und geschlossene Bahnen
 - Verhalten ändert sich signifikant, wenn einige Bahnen offen sind
 - keine periodische Bewegung der Ladungsträger auf geschlossenen Bahnen mehr
 - Aufnahme von Energie aus \mathbf{E} -Feld wird nicht verhindert
 - falls sich offenen Bahnen im Ortsraum in Richtung von $\hat{\mathbf{n}}$ erstrecken, so erwarten wir, dass Strom in diese Richtung auch im Fall hoher \mathbf{B} nicht verschwindet und proportional zur Projektion des \mathbf{E} -Feldes auf $\hat{\mathbf{n}}$ ist

$$\mathbf{J} = \underbrace{\sigma_0 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E}) \hat{\mathbf{n}}}_{\text{Beitrag der offenen Bahnen}} + \underbrace{\sigma_1 \cdot \mathbf{E}}_{\text{Beitrag der geschlossenen Bahnen}}, \quad \begin{cases} \sigma_0 \rightarrow \text{const.} & \text{für } \mathbf{B} \rightarrow \infty \\ \sigma_1 \rightarrow 0 & \text{für } \mathbf{B} \rightarrow \infty \end{cases}$$



bei Vorliegen von offenen und geschlossenen Bahnen kann der Hall-Effekt und Magnetwiderstand sehr komplex sein

➔ Behandlung in Spezialvorlesungen

9.3 Streuprozesse

- **bisher:** Diskussion der Bewegung der Ladungsträger zwischen zwei Streuprozessen
- **jetzt:** **Diskussion der Streuprozesse**
 → haben zentrale Bedeutung für das Verständnis des elektrischen und des Wärmewiderstands
- **Drude-Modell:**
 - es wurde ursprünglich falsche Annahme gemacht, dass die Streuung an den Atomrümpfen erfolgt
 → mittlere freie Weglänge $\ell \simeq \text{\AA}$
- **Bloch-Sommerfeld-Modell:**
 - Kristallelektronen können mit Bloch-Wellen beschrieben werden:
 - stationäre Lösungen der Schrödinger-Gleichung: $|\Psi|^2 = \text{const.}$ → keine Streuung an perfektem Kristallgitter
 - **Streuung nur durch Abweichungen von perfekter Kristallperiodizität**
- **Streuprozesse von Bloch-Elektronen kommen durch folgende Mechanismen zustande**
 - i. Abweichungen von strenger Periodizität des Kristallgitters:
 - **Kristalldefekte (Fehlstellen, Fremdatome, Versetzungen, etc.)** → zeitunabhängig
 - **Phononen (Magnonen, ...)** → zeitabhängig
 - ii. Elektron-Elektron-Streuung

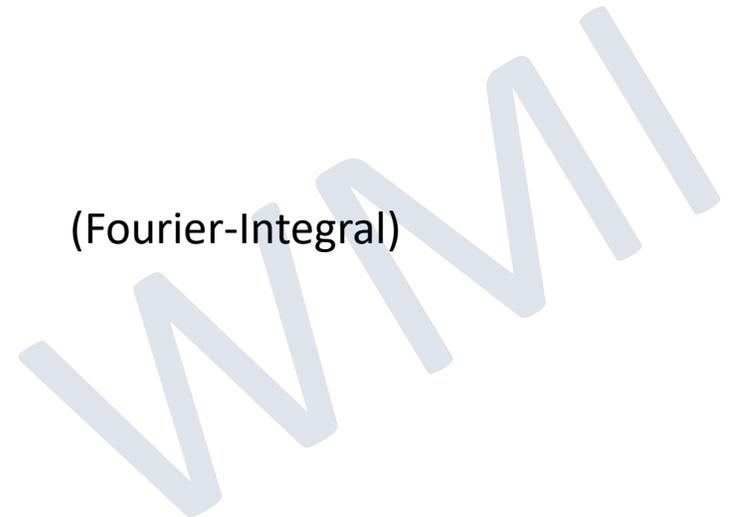
9.3.1 Beschreibung von Streuprozessen

- Beschreibung der Kristallelektronen als Bloch-Wellenpakete mit Wellenvektor \mathbf{k}
- Streuprozesse: beschrieben durch Wahrscheinlichkeit $P_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ des Übergangs eines Zustands $\Psi_{\mathbf{k}}$ nach $\Psi_{\mathbf{k}'}$

$$P_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \propto |\langle \mathbf{k}' | \mathcal{H}^p | \mathbf{k} \rangle|^2 = \left| \int d^3r \underbrace{\Psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r})}_{\text{Blochwelle}} \mathcal{H}^p \underbrace{\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}_{\text{Störpotenzial}} \right|^2$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | \mathcal{H}^p | \mathbf{k} \rangle &= \int d^3r u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \mathcal{H}^p u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \int d^3r \underbrace{u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}^p u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}_{\text{Streudichte } \rho(\mathbf{r}, t)} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} \end{aligned}$$

(Fourier-Integral)



9.3.1 Beschreibung von Streuprozessen

- \mathcal{H}^p ist **zeitunabhängig**
 - statische Gitterfehler: **Fehlstellen, Fremdatome, Versetzungen, ...**
 - nur elastische Streuprozesse möglich: $\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}) = 0$

- \mathcal{H}^p ist **zeitabhängig**
 - zeitabhängige Streuer: **Phononen, Magnonen, ...**
 - auch inelastische Streuprozesse möglich : $\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}) = \pm \hbar \omega(\mathbf{q})$

Beispiel: Streuung an einem Phonon mit Wellenvektor \mathbf{q} → $\mathcal{H}^p \propto e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$

$$\langle \mathbf{k}' | \mathcal{H}^p | \mathbf{k} \rangle = \int d^3r u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \mathcal{H}^p u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \propto \int d^3r u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}}$$

da $u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gitterperiodisch ist und deshalb in Fourier-Reihe nach reziproken Gittervektoren \mathbf{G} entwickelt werden kann, ist Matrixelement nur dann von Null verschieden, wenn

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q} = \mathbf{G} \quad (\text{Impulserhaltung für Streuung an Phonon})$$

9.3.1.1 Elektron-Elektron-Streuung

- Erwartung: Streuwahrscheinlichkeit für Elektron-Elektron-Streuung sehr hoch
 - ➔ etwa 1 Elektron pro Einheitszelle
 - ➔ starke Coulomb-Wechselwirkung
- aber: **Elektron-Elektron-Streuung wird durch Pauli-Prinzip stark unterdrückt**
 - ➔ Phasenraumproblem: die meisten möglichen Streuzustände sind Pauli-geblockt
 - ➔ Unterdrückung proportional zu $(k_B T / \varepsilon_F)^2 < 10^{-4}$ @ 300° C

Steuwahrscheinlichkeit für Elektron-Elektron-Streuung

$$P_{e-e}(T) = S_{e-e} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2$$

➔ Streuquerschnitt ohne Pauli-Prinzip

➔ Reduktion durch Pauli-Prinzip

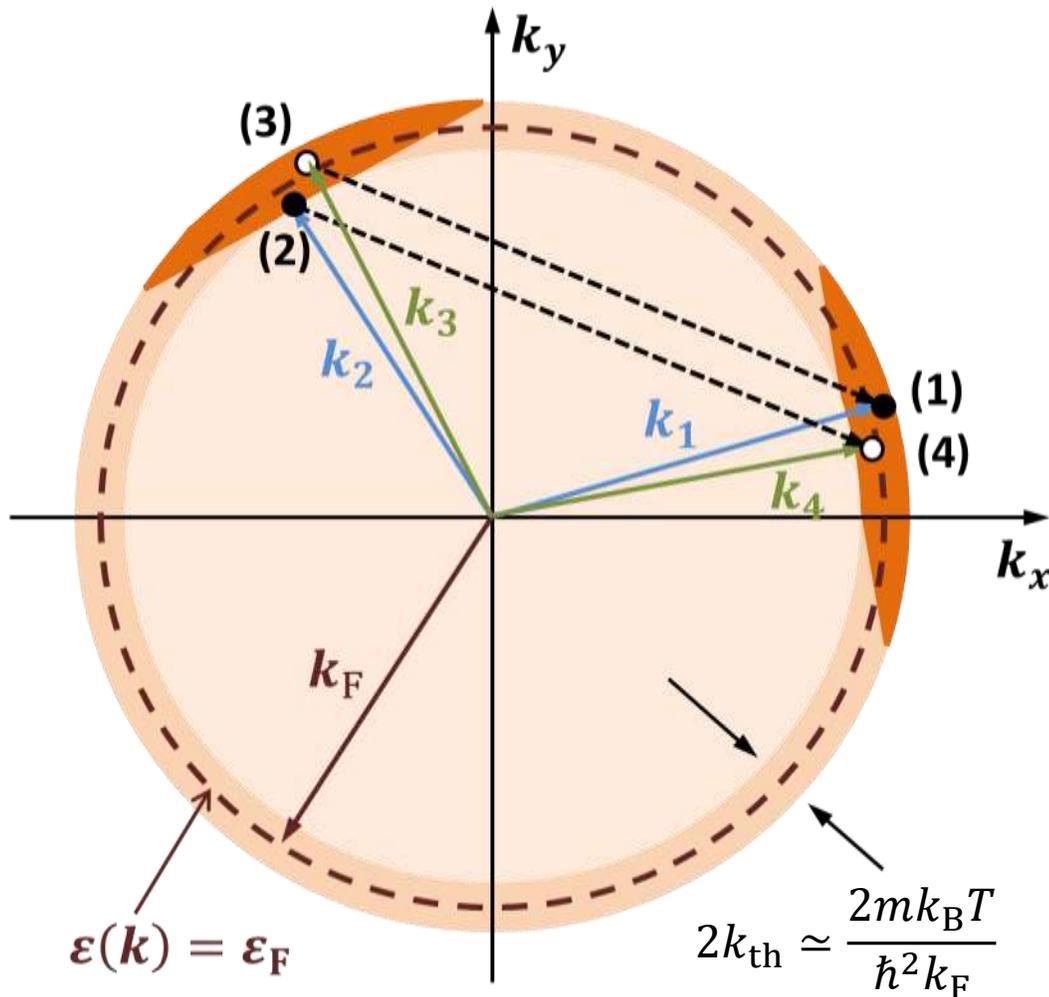
Beispiel: $T = 1$ K, $k_B T = 0.1$ meV, $\varepsilon_F = 10$ eV ➔ $(k_B T / \varepsilon_F)^2 \approx 10^{-10}$

bei höheren T wird der Faktor $(k_B T / \varepsilon_F)^2$ zwar größer, aber hier wird die Elektron-Phonon-Streuung dominant

➔ reine e-e-Streuung kann – wenn überhaupt – nur in sehr reinen Materialien bei tiefen T beobachtet werden

9.3.1.1 Elektron-Elektron-Streuung

- Energie und Impulserhaltung bei der e-e-Streuung



Energieerhaltung: wegen Pauli-Blocking

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4 \geq 2\varepsilon_F - 2k_B T$$

Impulserhaltung:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 + \mathbf{G}$$

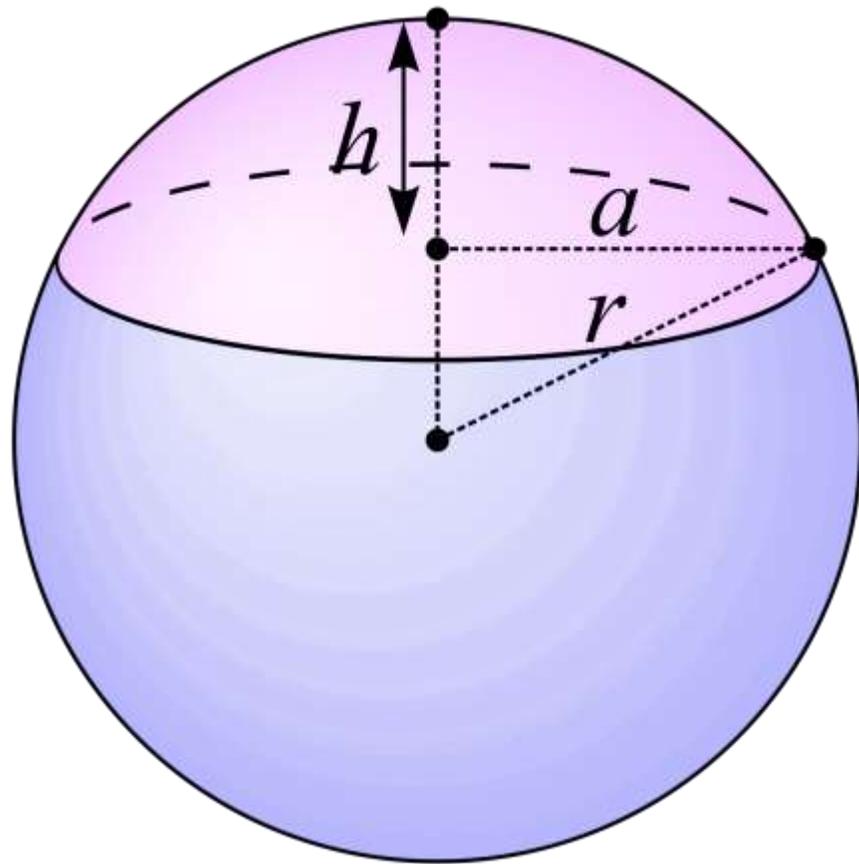
$$\Rightarrow \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2 \quad (\mathbf{G} = 0)$$

$\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2$ erfordert, dass Verbindungslinien (1)-(3) und (2)-(4) in Streudiagramm parallel verlaufen müssen

→ mögliche Streuzustände müssen in Kugelkalotte der Höhe $h \approx k_{th}$ liegen

9.3.1.1 Elektron-Elektron-Streuung

- Volumen V_K der Kugelkalotte



$$V_K = \frac{\pi h^2}{3} (3r - h)$$

mit $r = k_F$ und $h = k_{th}$ erhalten wir

$$V_K = \frac{\pi k_{th}^2}{3} \underbrace{(3k_F - k_{th})}_{\approx 3k_F}$$

$$\Rightarrow V_K \approx \pi k_{th}^2 k_F$$

$$\Rightarrow \frac{V_K}{V_{\text{Fermi-Kugel}}} = \frac{\pi k_{th}^2 k_F}{\frac{4}{3} \pi k_F^3} \approx \frac{k_F^2 k_{th}^2}{k_F^4} \propto \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2$$

$$2k_{th} \approx \frac{2mk_B T}{\hbar^2 k_F} \Rightarrow k_{th}^2 k_F^2 \propto k_B T$$

9.3.2 Streuquerschnitte

- **Streuquerschnitte und Matthiessen-Regel**

- Dichte der Streuzentren: n_S
 - Streuquerschnitt: S
- ➔
- Streurate $\tau^{-1} \propto \ell^{-1} = n_S S$
 - freie Weglänge $\ell = 1/n_S S$

- Vorliegen von mehreren unterschiedlichen Streuern mit Dichten n_{Si} , Streuquerschnitten S_i und Streuraten τ_i^{-1}

$$\frac{1}{\ell} = \sum \frac{1}{\ell_i} = \sum n_{Si} S_i \Rightarrow \rho = \sum \rho_i \quad \text{Matthiessen-Regel}$$

- **Berechnung der Streuquerschnitte mit Hilfe der Streutheorie (1. und 2. Bornsche Näherung)**

- totaler Streuquerschnitt S_i ergibt sich durch Integration des differentiellen Streuquerschnitts σ_i über Raumwinkel

$$\frac{1}{\ell_i} = n_{Si} S_i = n_{Si} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (1 - \cos \theta) \sigma_i(\theta) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi$$

Vorwärtsstreuung: $\theta = 0^\circ$, **Wichtungsfaktor: 0**
 Rückwärtsstreuung: $\theta = 180^\circ$, **Wichtungsfaktor: 2**

Wichtungsfaktor (Streuung in Rückwärtsrichtung trägt mehr zu Impulsrelaxation bei)

9.3.2 Streuquerschnitte

- **Neutrale Störstellen: Potenzialstreuung**

- **Beispiel:** Au oder Ag in einem Cu-Gitter
- Beschreibung durch kastenförmiges Potenzial mit Radius r_0 und Höhe V_0 → **Potenzialstreuung**

$$S = \pi r_0^2 \left(\frac{V_0}{\varepsilon_F} \right)^2 = \pi r_0^2 \left(\frac{k_V^2}{k_F^2} \right)^2$$

(ohne Herleitung)

Querschnittsfläche

relative Höhe des Potentials

- **Geladene Störstellen: Conwell-Weiskopf-Streuung**

- **Beispiel:** Zn (1-fach geladen), Ga (2-fach geladen), Ge (3-fach geladen), As (4-fach geladen) in einem Cu-Gitter
- Störstellen sind geladen und stellen **abgeschirmtes Coulomb-Potenzial** dar: $V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-i k_s r}$

→ **Rutherford-artiges Streuproblem**

(Abschirmlänge k_s^{-1} muss mit Thomas-Fermi- (Metalle) oder Debye-Hückel-Modell (Halbleiter) berechnet werden)

9.3.2 Streuquerschnitte

- differentieller Wirkungsquerschnitt von abgeschirmtem Coulomb-Potenzial

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[k_s^2 + 4k_F^2 \sin^2(\theta/2)]^2}$$

$Z =$ Valenzdifferenz

- totaler Wirkungsquerschnitt

$$S \simeq 2\pi \underbrace{\left(\frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 k_F^2} \right)^2}_{\text{Querschnittsfläche } \pi r_0^2 \propto Z^2, \text{ unabhängig von } T} \int_0^{2\pi} \frac{1}{[k_s^2/k_F^2 + 4 \sin^2(\theta/2)]^2} (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta$$

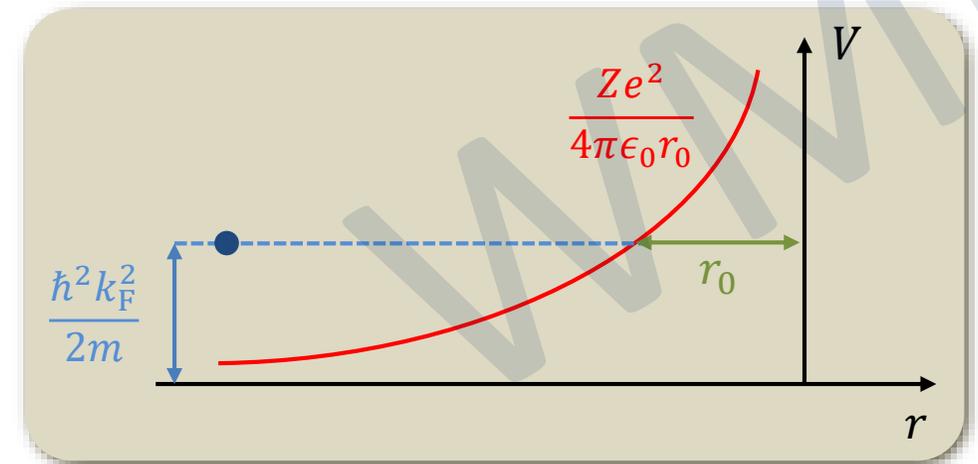
\simeq Querschnittsfläche $\pi r_0^2 \propto Z^2$, unabhängig von T

- Abschätzung von r_0 :

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \quad \rightarrow \quad r_0 = \frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 k_F^2}$$

Lindesche Regel:

Beitrag durch geladene Störstellen ist unabhängig von T und proportional zu Z^2



9.3.2 Streuquerschnitte

- **Streuung an Phononen**

- genaue Modellierung ist komplexes Problem → wir beschränken uns auf **qualitative Diskussion**
- **Ansatz:** ortsabhängige Dehnung/Kompression $\Delta(r)$ des Gitters ändert lokale Elektronendichte $n(r)$
→ Potenzialfluktuation

- lokale Änderung $\delta n(r)$ der Elektronendichte n_0

$$\delta n(r) = n_0 \Delta(r)$$

- Umrechnung in lokale Änderung $\delta \varepsilon_F(r)$ der Fermi-Energie ε_F

$$\delta n(r) = \frac{D(\varepsilon_F)}{V} \delta \varepsilon_F(r) \Rightarrow \delta \varepsilon_F(r) = \frac{\delta n(r)}{D(\varepsilon_F)/V} = \frac{n_0 \Delta(r)}{D(\varepsilon_F)/V} = \frac{2}{3} \varepsilon_F \Delta(r)$$

$$D(\varepsilon_F) = \frac{3}{2} V \frac{n_0}{\varepsilon_F}$$

→
$$\delta \varepsilon_F(r) = \frac{2}{3} \varepsilon_F \Delta(r)$$

9.3.2 Streuquerschnitte

- Abschätzung von $\Delta(r)$

i. hohe Temperaturen ($T \gg \Theta_D$)

Annahme:

Streuwahrscheinlichkeit ist proportional zum quadratischen Mittelwert $\overline{u^2}$ der Auslenkung der Atome aus ihrer Ruhelage

mit $\frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}M\omega_q^2x^2 \simeq \frac{1}{2}k_B T$ erhalten wir: $\overline{u^2} \simeq \frac{k_B T}{M\omega_q^2}$

mit $\overline{\Delta^2} \simeq \overline{u^2}/a^2$ ergibt sich: $\overline{\Delta^2} \simeq \frac{k_B T}{M\omega_q^2 a^2}$

für grobe Abschätzung ersetzen wir ω_q durch Debye-Frequenz $\omega_D = k_B \Theta_D / \hbar$ und $a \simeq 1/q_D$ und erhalten

$$\overline{\Delta^2} = \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2} \quad (T \gg \Theta_D)$$

Streuquerschnitt und mittlere freie Weglänge:

ähnlich zu Potenzialstreuer benutzen wir $S = S_A \overline{\Delta^2} \simeq S_A \left(\frac{\delta \varepsilon_F}{\varepsilon_F} \right)^2$ mit $S_A = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sigma_A(\theta) d\theta d\varphi$

(gewichteter Streuquerschnitt eines einzelnen Atoms)

$$\frac{1}{\ell} \simeq n_A S \simeq n_A S_A \overline{\Delta^2} \simeq n_A S_A \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2} \quad (T \gg \Theta_D)$$

9.3.2 Streuquerschnitte

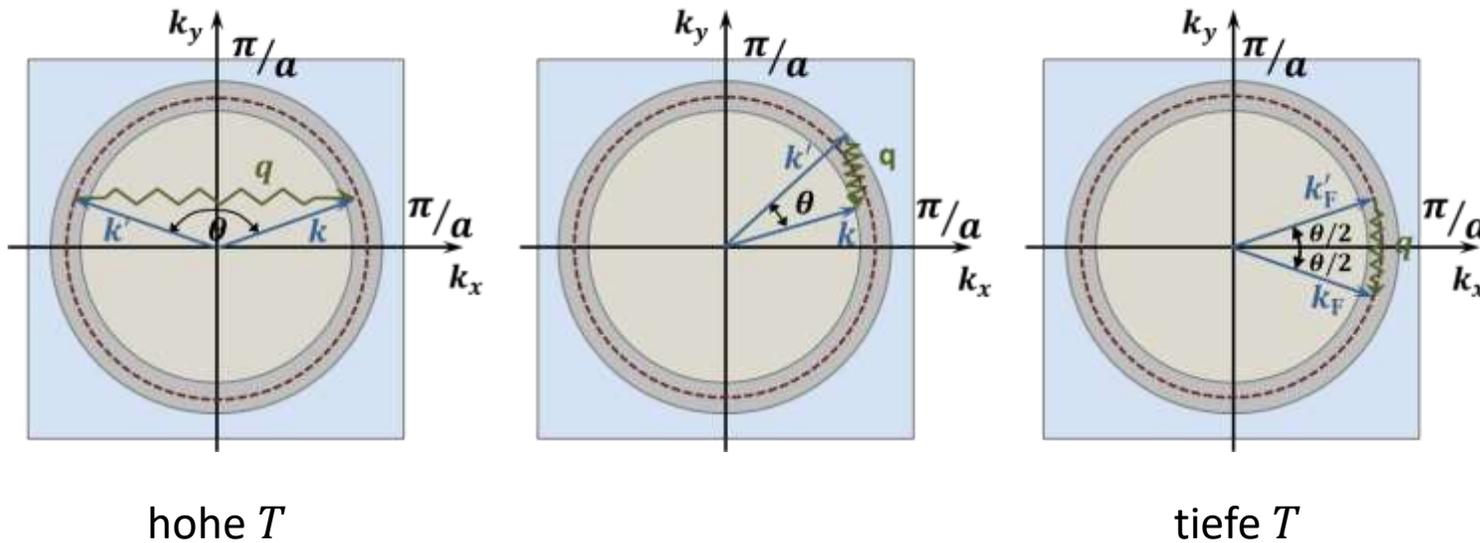
spezifischer Widerstand

$$\rho_{\text{ph}} = \frac{mv_F}{ne^2\ell} \propto n_A S_A \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2} \quad (T \gg \Theta_D) \quad \Rightarrow \quad \rho_{\text{ph}} \propto \frac{T}{M \Theta_D^2} \quad (T \gg \Theta_D)$$

ii. niedrige Temperaturen ($T \ll \Theta_D$)

zusätzlich zu berücksichtigen:

- Besetzung der Phononen-Moden $n(\omega_q) = [\exp(\hbar\omega_q/k_B T) - 1]^{-1}$
- kleine Phononen-Impulse erlauben nur kleine Streuwinkel \rightarrow **zusätzlicher T -abhängiger Wichtungsfaktor**



es gilt:

$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{q_{\text{max}}}{2k_F}, \quad \frac{q_{\text{max}}}{q_D} \simeq \frac{T}{\Theta_D}$$

\rightarrow maximaler Streuwinkel:

$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{q_D}{2k_F} \frac{T}{\Theta_D}$$

9.3.2 Streuquerschnitte

mittlere freie Weglänge

$$S_A = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \underbrace{(1 - \cos \theta) \sigma_A(\theta) \sin \theta}_{\sigma_A 8 \sin^3 \frac{\theta}{2} d\left(\sin \frac{\theta}{2}\right)} d\theta d\varphi$$

mit Vereinfachung: $\sigma_A(\theta) \simeq \sigma_A$

$$\frac{1}{\ell} \simeq n_A S_A \simeq n_A S_A \overline{\Delta^2} \simeq n_A S_A \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2}$$

wir benutzen $\sin \frac{\theta}{2} = \frac{q_D}{2k_F} \frac{T}{\Theta_D}$ und die Substitution $x = \frac{\hbar \omega_q}{k_B T} = \frac{\Theta_D}{T} \frac{q}{q_D}$

$$\frac{1}{\ell} \simeq n_A S_A \simeq n_A S_A \overline{\Delta^2} \simeq n_A \sigma_A \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^4 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{4x^4}{(\exp(x) - 1)} dx$$

$$\frac{1}{\ell_i} = n_{Si} S_i = n_{Si} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (1 - \cos \theta) \sigma_i(\theta) \sin \theta d\theta d\varphi$$

9.3.2 Streuquerschnitte

Auswertung des Integrals ergibt

$$\frac{1}{\ell} \approx n_A S_A \approx n_A S_A \overline{\Delta^2} \approx n_A \sigma_A \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^4 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{4x^4}{(\exp(x) - 1)} dx$$

$$\Rightarrow 1 \text{ für } T \ll \Theta_D$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^4 \text{ für } T \gg \Theta_D$$

$$\rho_{\text{ph}}(T) \propto \frac{1}{\ell(T)} \propto \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5$$

$$\rho_{\text{ph}}(T) \propto \frac{1}{\ell(T)} \propto T$$

Bloch-Grüneisen-Gesetz

nur grobe Näherung, da viele vereinfachende Annahmen gemacht wurden

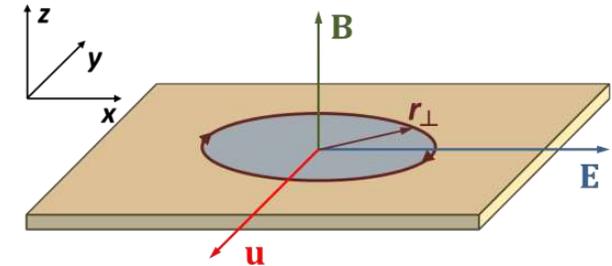
bereits bekannter Hochtemperaturgrenzfall

➔ zufriedenstellende Übereinstimmung mit gemessenem $\rho(T)$ von vielen Metallen

• **semiklassische Bewegung in gekreuzten E- und B-Feldern (Trajektorie im Ortsraum)**

$$\mathbf{r}_\perp(t) - \mathbf{r}_\perp(0) = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] + \frac{E}{B} (\hat{\mathbf{E}} \times \hat{\mathbf{B}}) t = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)] + \mathbf{u} t$$

\swarrow **geschlossene Bahnbewegung**
 (k -Raum Trajektorie um 90° gedreht und skaliert)
 \nwarrow **Translationsbewegung**
 mit Driftgeschwindigkeit $\mathbf{u} \perp \mathbf{E}, \mathbf{B}$



Trajektorie im k -Raum:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = (-e)(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = e \mathbf{u} \times \mathbf{B} - \frac{e}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \times \mathbf{B} = -\frac{e}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon} \times \mathbf{B} \quad \text{mit } \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} \approx \varepsilon(\mathbf{k})$$

häufig sehr gute Näherung

→ k -Raum-Trajektorien sind durch Schnittlinien von Ebenen $\perp \mathbf{B}$ mit den Flächen $\varepsilon(\mathbf{k}) = const$ gegeben

• **Hall-Effekt** (Grenzfall $\omega_c \tau \gg 1$, hohe B -Felder, reine Proben, niedrige T)

für $t = \tau \gg$ Umlaufzeit $1/\omega_c$ gilt:
$$\frac{\mathbf{r}_\perp(\tau) - \mathbf{r}_\perp(0)}{\tau} = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times \underbrace{\frac{[\mathbf{k}(\tau) - \mathbf{k}(0)]}{\tau}}_{\text{im Mittel} = 0 \text{ für } \omega_c \tau \gg 1} + \mathbf{u}$$

→ **mittlere Bewegungskomponente durch geschlossene Bahnbewegung verschwindet**

Hall-Koeffizient: $R_H = E_y / B J_x$ →
$$R_H = -\frac{1}{n_e e} \quad (\text{Elektronen}) \quad R_H = +\frac{1}{n_h e} \quad (\text{Löcher})$$

• **Streuprozesse**

- Abweichungen von strenger Periodizität des Kristallgitters:
 - **Kristalldefekte** (Fehlstellen, Fremdatome, Versetzungen, etc.) → H^p zeitunabhängig (elastisch)
 - **Phononen** → H^p zeitabhängig (inelastisch)
- Elektron-Elektron-Streuung

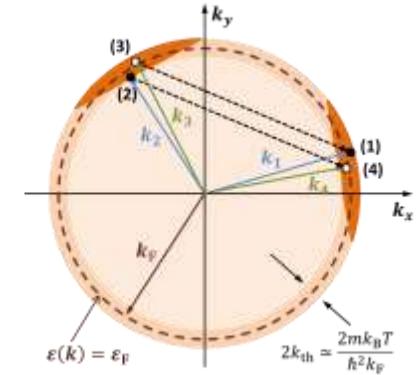
Berechnung mit qm Störungstheorie

$$P_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \propto |\langle \mathbf{k}' | \mathcal{H}^p | \mathbf{k} \rangle|^2 = \left| \int d^3r \Psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}^p \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right|^2$$

- **Elektron-Elektron-Streuung:** starke Reduktion der möglichen Streuzustände durch Pauli-Blocking

$$P_{e-e}(T) = S_{e-e} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2$$

Unterdrückung um Faktor $\left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \approx 10^{-10}$ @ 1K
 $\approx 10^{-5}$ @ 300 K



- tiefe T : Elektron-Verunreinigung-Streuung dominiert
- hohen T : Elektron-Phonon-Streuung dominiert

- **Streuquerschnitte S_i und freie Weglängen ℓ_i :**

$$\frac{1}{\ell_i} = n_{si} S_i$$

$$\frac{1}{\ell_i} = n_{si} S_i = n_{si} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \underbrace{(1 - \cos \theta)}_{\text{Wichtungsfaktor}} \underbrace{\sigma_i(\theta)}_{\text{differentieller Wirkungsquerschnitt}} \sin \theta \, d\theta \, d\phi$$

Vorwärtsstreuung: $\theta = 0^\circ$, Wichtungsfaktor: 0
 Rückwärtsstreuung: $\theta = 180^\circ$, Wichtungsfaktor: 2

n_{si} : Dichte von Streuzentren,
 S_i : Streuquerschnitt

- **Matthiessen-Regel (1864):**

bei Vorliegen mehrerer voneinander unabhängiger Streuprozesse können reziproke Werte der mittleren freien Weglängen addiert werden:

$$\frac{1}{\ell} = \sum n_{si} S_i = \frac{1}{\ell_1} + \frac{1}{\ell_2} + \frac{1}{\ell_3} + \dots$$

$$\rho = \frac{mv}{ne^2} \sum \frac{1}{\ell_i} = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \dots$$

- **Elektron-Verunreinigung-Streuung:**

Neutrale Störstellen:

- Streuquerschnitte sind in etwa T -unabhängig:
- T -unabhängiger Beitrag zu Widerstand

$$S = \pi r_0^2 \left(\frac{V_0}{\epsilon_F} \right)^2 = \pi r_0^2 \left(\frac{k_V^2}{k_F^2} \right)^2$$

↑ Querschnittsfläche ↑ relative Höhe des Potentials

• Elektron-Verunreinigung-Streuung:

Geladene Störstellen:

- Streuquerschnitte sind in etwa T -unabhängig und $\propto Z^2$ (Quadrat der Valenzdifferenz):
- T -unabhängiger Beitrag zu Widerstand (**Lindesche Regel**)

$$\rho \propto S \simeq 2\pi \underbrace{\left(\frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 k_F^2} \right)^2}_{\text{Querschnittsfläche } \propto Z^2, \text{ unabhängig von } T} \int_0^{2\pi} \frac{1}{[k_s^2/k_F^2 + 4 \sin^2(\theta/2)]^2} (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta$$

Querschnittsfläche $\propto Z^2$, unabhängig von T

• Elektron-Phonon-Streuung:

ortsabhängiger Dehnung $\Delta(r)$ des Gitters erzeugt Streupotenzial $\delta\varepsilon_F(r) = \frac{\overbrace{\delta n(r)}^{n_0 \Delta(r)}}{D(\varepsilon_F)/V} = \frac{2}{3} \varepsilon_F \Delta(r)$

(i) hohe T ($T \gg \Theta_D$): $\overline{\Delta^2} = \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2} \rightarrow \frac{1}{\ell} \simeq n_A S_A \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2} \rightarrow \rho_{\text{ph}}(T) \propto \frac{T}{M \Theta_D^2}$

(ii) tiefe T ($T \ll \Theta_D$) $\frac{1}{\ell} \simeq n_A \sigma_A \frac{\hbar^2 q_D^2 k_B T}{M k_B^2 \Theta_D^2} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^4 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{4x^4}{(\exp(x) - 1)} dx \rightarrow \rho_{\text{ph}}(T) \propto \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5$ (**Bloch-Grüneisen-Gesetz**)

$$x = \frac{\hbar \omega_q}{k_B T} = \frac{\Theta_D}{T} \frac{q}{q_D}$$