

Ausbildungsseminar: Elektronentransport

Von Drude via Boltzmann bis Landauer

Drude: klassische Behandlung des Elektronengases

1897 Entdeckung des Elektrons (Thomson)

1900 Drude schlägt kinetische Gastheorie als Modell für Elektronentransport in Metallen vor.

Verschmelzen mehrere isolierte Atome zum Metall, dann können sich die Valenzelektronen frei zwischen den Ionen bewegen.

Die Elektronen bewegen sich geradlinig und kräftefrei zwischen Stößen, die von

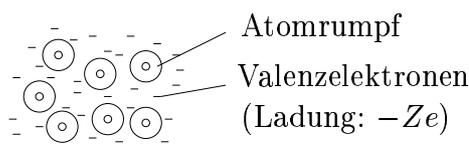


Abbildung 1: Metall

vernachlässigbar kurzer Dauer sind.

Strom

Elektronen werden durch ein äußeres Feld beschleunigt und durch Stöße mit Metallionen (=Dämpfung durch Reibung) abgebremst.

Annahmen/Näherungen

1. (a) Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zwischen den Stößen ist vernachlässigbar (independent electron approximation).
→ stellt sich als relativ gute Näherung heraus
- (b) Die Bewegung der Elektronen wird nicht von Ionen beeinflusst (free electron approximation).
→ schlechte Näherung

D.h. die Elektronen bewegen sich geradlinig und gleichförmig zwischen den Stößen, wenn kein äußeres Feld anliegt (statistische Verteilung) und mit äußerem Feld nur unter dem Einfluss des Feldes (nach Newton).

2. Stöße sind unverzügliche Ereignisse, die die Geschwindigkeit der Elektronen abrupt verringern (ohne Elektron-Elektron-Stöße).
3. $P(\text{Stoß})dt = dt/\tau$
 $P(\text{Stoß}) = Wk$ für Stoß; $dt = \text{infin. Zeitintervall}$; $\tau = \text{Relaxationszeit, mittlere Lebensdauer}$
 D.h. ein zufällig gewähltes Elektron hat im Schnitt τ Zeit ohne Stoß hinter und vor sich.
 Zusätzliche Annahme: τ ist unabhängig von Ort und Geschwindigkeit der Elektronen
4. Thermisches Gleichgewicht liegt nur unmittelbar während dem Stoß vor, d.h. Betrag und Richtung der Geschwindigkeit nach dem Stoß sind unabhängig von denen vor dem Stoß. Der Betrag hängt von Temperatur am Ort des Stoßes ab, die Richtungen ohne äußeres Feld sind statistisch verteilt.

Elektrische Leitfähigkeit

Ohmsches Gesetz (klassisch):

$$U = IR = EL$$

Definition von ρ :

$$E = \rho j \tag{1}$$

$\rho = \text{spez. Widerstand}$

$j = \text{Stromdichte}$

$$j = \frac{I}{F} \quad (F = \text{Fläche}) \Rightarrow R = \frac{\rho L}{F}$$

$$j = \frac{Q}{Fdt} = N \frac{q}{Fdt} = \frac{-enx}{dt} = -env \tag{2}$$

Betrachte zufällig gewähltes Elektron (also zur Zeit τ nach dem Stoß)

$$v_{\text{mittel}} = v_0 - \frac{e}{m} E \tau$$

v_0 ist die Geschwindigkeit unmittelbar nach dem Stoß, ihre Richtung statistisch verteilt.

\Rightarrow Sie liefert keinen Beitrag zur Durchschnittsgeschwindigkeit v_{mittel} .

$\frac{-e}{m} E \tau$ ist der Beitrag vom elektrischen Feld ($ma = qE$). Damit folgt für die Stromdichte

$$j = \frac{ne^2\tau}{m} E$$

bzw. für die Leitfähigkeit $\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{j}{E}$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad \text{oder} \quad \tau = \frac{m}{\rho ne^2}$$

Aussagen über τ :

τ hängt über ρ von der Temperatur T ab. Bei Zimmertemperatur ist ρ proportional zu T , bei tiefen Temperaturen sinkt es stärker.

τ hat bei Zimmertemperatur Werte zwischen 10^{-14} s und 10^{-15} s.

Damit beträgt die mittlere freie Weglänge $\ell = v_{\text{mittel}}\tau$ bei angenommener Isotropie ca. 1 Å. Dies entspricht dem Atomabstand und bestätigt damit das Modell von Drude.

Für tiefe Temperaturen jedoch erreicht ℓ bis zu 1000-fachen Atomradius. Somit kann das Drudemodell für tiefe Temperaturen nicht richtig sein.

Impuls

Der Impuls der Elektronen im Drudemodell ist gegeben durch

$$p(t) = mv_{\text{mittel}}$$

Wie sieht die zeitliche Entwicklung $p(t + dt)$ aus?

$$P(\text{Stoß bis } t + dt) = \frac{dt}{\tau} \Rightarrow \bar{P} = 1 - \frac{dt}{\tau}$$

Ohne Stoß wirkt nur die externe Kraft:

$$p(t + dt) = [p(t) + f(t)dt + O(dt^2)] \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right)$$

Stöße liefern keinen zusätzlichen Beitrag (nur $O(dt^2)$), denn $p_{\text{nach Stoß}}$ ist statistisch verteilt; deshalb nur Beitrag Kraft mal Wk)

$$p(t + dt) - p(t) = -\frac{dt}{\tau}p(t) + f(t)dt + O(dt^2)$$

$$\Rightarrow \frac{dp}{dt} = -\frac{p}{\tau} + f(t)$$

($-\frac{p}{\tau}$ = Reibungsdämpfung)

Hall-Effekt

1879 Hall: Kraft auf Ladungsträger bei Stromfluss im Magnetfeld
dabei baut sich Transversalspannung (E_y) auf

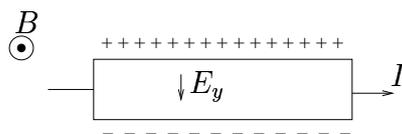


Abbildung 2: Hall-Experiment

Für die Kraft auf einen Leiter gilt allgemein:

$$f = -e \left(\vec{v} \times \vec{B} + \vec{E} \right)$$

Im stationären Zustand ist also

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e \left(\vec{v} \times \vec{B} + \vec{E} \right) - \frac{\vec{p}}{\tau} = 0$$

bzw.

$$\begin{aligned} \frac{m\vec{v}}{\tau} &= -e \left(\vec{v} \times \vec{B} + \vec{E} \right) \\ \left[\frac{m}{e\tau} + \vec{B} \times \right] \vec{v} &= \vec{E} \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{pmatrix} -\frac{m}{e\tau} & B \\ -B & -\frac{m}{e\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$$

Aus (1) und (2) folgt somit für ρ

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{m}{e^2\tau n} & \frac{-B}{en} \\ \frac{B}{en} & \frac{m}{e^2\tau n} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sigma} \begin{pmatrix} 1 & -\mu B \\ \mu B & 1 \end{pmatrix}$$

mit der Beweglichkeit $\mu = \frac{v}{E} = \frac{e\tau}{m}$.

Deshalb ist der longitudinale spezif. Widerstand $\rho_{xx} = \rho_{yy} = \frac{1}{\sigma}$ unabhängig von B und der Hallwiderstand $-\rho_{xy} = \rho_{yx} = \rho(H) = \frac{B}{en}$. Das Experiment zeigt jedoch ein völlig anderes nichtlineares Verhalten für tiefe Temperaturen und hohe Magnetfelder (siehe später: Quantenhalleffekt). Der transversale Hall-Widerstand nimmt bei kleinen Temperaturen einen treppenartigen Verlauf ein und der longitudinale spezifische Widerstand beginnt bei hohen Magnetfeldern zu oszillieren, wobei die Minima mit den Plateaupunkten des Hall-Widerstands übereinstimmen.

Schwächen

1. Für tiefe Temperaturen wird die mittlere freie Weglänge viel zu groß.
2. Experimentell stimmen die Ergebnisse beim Hall-Effekt nur für Zimmertemperatur und kleine Felder überein.

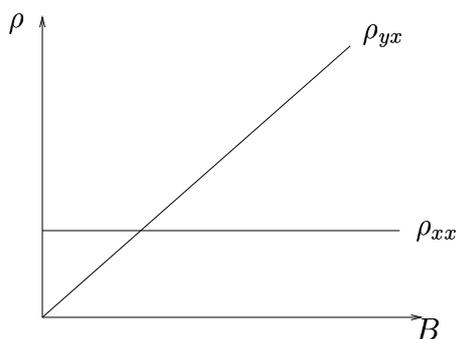


Abbildung 3: Hall-Effekt

Boltzmann: klassische Verteilungsfunktion

klassische (Ort und Zeit beliebig genau messbar) Verteilungsfunktion $f(r, v, t)$
 6-dim Raum = μ -space

Die zeitliche Entwicklung von f nennt man die Boltzmann Transportgleichung. Für $t \rightarrow \infty$ erhält man die Gleichgewichtsverteilung, die man auch gewinnen kann, ohne die Transportgleichung explizit zu lösen. Das Verfahren hierzu nennt man die wahrscheinlichste Verteilung.

Annahmen

1. Nur binäre Stöße (2 Stoßpartner)
2. Einfluss der Systemwände vernachlässigbar
3. Einfluss der externen Kraft auf Stoßrate vernachlässigbar
4. Ort und Geschwindigkeit unkorreliert (molekulares Chaos)

Herleitung

ohne Stöße würde sich Verteilung nicht ändern:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} = \left(v \nabla_r + \frac{f_{ext}}{m} \nabla_v + \frac{\partial}{\partial t} \right) f = 0$$

mit Stöße: $\frac{df}{dt} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{Stoß}$ womit auch Nichtgleichgewichtszustände beschrieben werden können.

Die Herleitung für den Gleichgewichtszustand basiert auf der Annahme der maximalen Entropie.

Zerlege μ -space in m Zellen $(\delta r)^3 (\delta v)^3$ für \vec{v} und \vec{r} mit Energien $E_j = m \vec{v}_j^2 / 2$ ($j =$

1...m)

N Teilchen werden nun auf Zellen verteilt, s.d. n_j Teilchen in Zelle j sind.

$$\sum_j n_j E_j = E \quad \sum_j n_j = N$$

Annahme für viele Teilchen: $N \gg m \gg 1$

Die möglichen Permutationen für ein bestimmtes m -Tupel sind dann

$$P(n) = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_m!}$$

Da jeder Zustand gleich wahrscheinlich ist, ist die wahrscheinlichste Konfiguration diejenige mit der größten Anzahl an Permutationen.

$$\max(P) = \max(\log P)$$

Variationsmethode nach Lagrange:

$$\delta(\log P) - \delta\left(\alpha \sum_j n_j + \beta \sum_j E_j n_j\right) = 0$$

Es folgt

$$\begin{aligned} -\log(n_{j,max}) - \alpha - \beta E_j &= 0 \\ n_{j,max} &= \exp(-\alpha - \beta E_j) = A e^{-\beta E(\vec{r}_j, \vec{v}_j)} \end{aligned}$$

Für Homogenität im Raum (Ortsunabh.) folgt

$$f(\vec{v}_j) = B e^{-\beta \frac{m v_j^2}{2}}$$

Normierung:

$$\int f(\vec{v}) d\vec{v} = 1$$

Lösung über Kugelkoordinaten.

$$\Rightarrow B = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}}$$

Durch Vergleich der mittleren Energie

$$\langle E \rangle \equiv \int d\vec{v} \frac{m v^2}{2} f(\vec{v}) = \frac{3}{2} \beta^{-1}$$

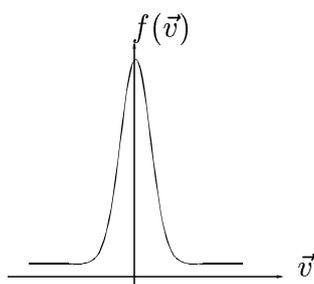


Abbildung 4: MB-Verteilung, vektoriell

mit der mittleren thermischen Energie $\langle E \rangle = \frac{3}{2} k_B T$ ergibt sich $\beta = \frac{1}{k_B T}$ und damit die **Maxwell-Boltzmann-Verteilung** (MB-Verteilung)

$$f(\vec{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}$$

Da die 3-dim Geschwindigkeitsdichte $f(\vec{v}) = f(v, \theta, \phi)$ nicht von der Raumrichtung abhängt, bietet sich die Betrachtung der 1-dim Geschwindigkeitsdichte $\tilde{f}(v)$ an. Sie ist definiert durch

$$\int \int \int v^2 \sin \theta f(\vec{v}) dv d\theta d\phi = \int_0^\infty \tilde{f}(v) dv$$

Damit ergibt sich die skalare MB-Verteilung

$$\tilde{f}(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}$$

Berücksichtigt man noch die räuml. Abhängigkeit, so muss man $f(\vec{v})$ noch mit

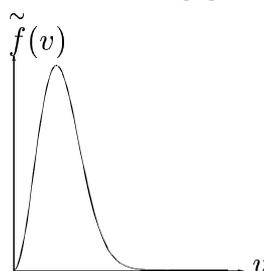


Abbildung 5: MB-Verteilung, skalar

der Ladungsträgerdichte $n(\vec{r})$ multiplizieren:

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = n(\vec{r}) f(\vec{v})$$

Diese Verteilung ist die wahrscheinlichste und jegliche beachtenswerte Abweichung davon ist extrem unwahrscheinlich. Deshalb ist die MB-Gleichung eine sehr wichtige Geschwindigkeitsverteilung im Vielteilchensystem.

Transportprozesse

Im Gleichgewicht bleiben die Erhaltungsgrößen (Energie, Impuls, Masse) der Mechanik unverändert. Die Dichte dieser Größen fluktuiert aber lokal um ihren Mittelwert, d.h. der lokale Gradient verändert sich ständig.

Stört man das Gleichgewicht einmalig, so stellt sich nach einiger Zeit wieder Gleichgewicht ein. Die Geschwindigkeit dieses Vorgangs beschreibt die Viskosität η .

Weitere Transportkoeffizienten sind die Wärmeleitfähigkeit λ und die Diffusionskonstante D . Einen stationären Nicht-Gleichgewichtszustand erreicht man, wenn man die Dichtegradienten global künstl. aufrecht erhält.

Zurück zum Kollisionsterm:

Setze phenomenologisch

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{Stoß}} = \frac{f_{eq} - f(v, r)}{\tau}.$$

Damit ergibt sich im stationären Zustand für die 1-dim Boltzmann-Gleichung:

$$\left(v \partial_r + \frac{e}{m} E \partial_v \right) f = \frac{f_{eq} - f(v, r)}{\tau}$$

Betrachte Stromdichte

$$j(r) = q \int v f(v, r) dv$$

Multipliziert man die Boltzmann-Gleichung mit v und integriert man anschl. über v , so erhält man auf der rechten Seite

$$\frac{1}{\tau} \left[\int v f_{eq} dv - \int v f(v, r) dv \right] = -\frac{1}{\tau} \int v f(v, r) dv = -\frac{j(r)}{q\tau}$$

da f_{eq} symmetrisch ist. Dieselbe Vorgehensweise auf der linken Seite führt zu

$$j(r) = -\frac{q^2 \tau}{m} E \int v \frac{\partial f}{\partial v} dv - q\tau \frac{\partial}{\partial r} \int v^2 f(v, r) dv$$

wobei das erste Integral ausgewertet $-n(r)$ und damit das zweite $n(r) \langle v^2 \rangle$ mit dem mittleren Geschwindigkeitsquadrat $\langle v^2 \rangle$ ergibt. Dieses wird durch die thermische Energie ausgedrückt:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}$$

Mit dem Diffusionskoeffizienten $D = \mu kT/q$ (Einsteinrelation) und der Beweglichkeit $\mu = q\tau/m$ gelangt man schließlich zur Driftdiffusionsstromdichte

$$j(r) = qn(r)\mu E(r) + qD \frac{dn}{dr}$$

Schwächen

Zwar stimmen die Ergebnisse besser mit den experimentellen Werten überein, jedoch werden die Quantisierungseffekte aus dem Hall-Experiment noch immer nicht berücksichtigt.

Landauer: Quantenmechanik

Näherung:

Der Strom in einem Leiter wird durch die Wahrscheinlichkeit ausgedrückt, dass ein Elektron durch den Leiter hindurchgeht.

Landauer bezog die lineare Antworttheorie (kleine Störungen) auf die Transmissionswahrscheinlichkeit und beschäftigte sich stark mit den Auswirkungen, wenn diese für Leiter nahezu 1 wird.

Betrachte einen Leiter der Länge l und Breite b zwischen 2 Kontakten L und R. Sein Leitwert berechnet sich nach dem Ohm'schen Gesetz zu

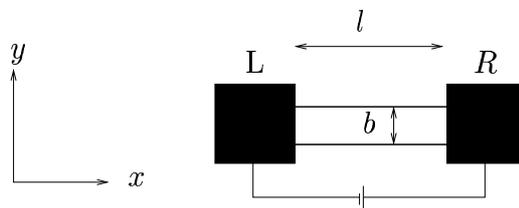


Abbildung 6: Leiter

$$G = \frac{\sigma b}{l}$$

Reduziert man die Länge immer weiter, so müsste der Leitwert schließlich gegen unendlich gehen.

Im Experiment findet man jedoch eine obere Grenze G_C , wenn die Länge des Leiters klein gegen die mittlere freie Weglänge wird.

Woher der Widerstand?

Er kommt von den Grenzflächen zwischen Leiter und Kontakten.

Innerhalb der Kontakte wird der Strom von unendlich vielen transversalen Moden getragen, innerhalb des Leiters nur von wenigen. Dies verlangt eine Neuverteilung des Stroms auf die stromführenden Moden.

Annahmen

1. zur Vereinfachung: $\beta \rightarrow \infty$
Damit kann man annehmen, dass nur wenige Energiekanäle zugänglich sind und sich der Stromfluss nur in einer schmalen Energiespanne $\mu_L < E < \mu_R$ abspielt.
2. Beim Eintritt der Elektronen vom Leiter in den Kontakt tritt keine Reflexion auf (andersrum schon!)
3. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird vernachlässigt.

Annahme 2 erlaubt uns folgenden Ansatz:

k Zustände im Leiter sind von Elektronen besetzt, die aus dem linken Kontakt kommen und $-k$ von Elektronen aus dem rechten Kontakt, wenn man k als die Wellenzahl in x -Richtung bezeichnet.

Da die Kontakte nicht reflektieren, besteht weder kausaler Zusammenhang zwischen den k Zuständen und dem rechten Kontakt noch zwischen den $-k$ Zuständen aus dem linken Kontakt. Folglich besteht der Strom effektiv aus all denjenigen k Zuständen, deren Energie zwischen μ_L und μ_R ist.

Experimente bestätigen sowohl den Widerstand an den Kontakten (bei $l = 0$ und verschiedenen Kontakten μ_L, μ_R) als auch die Existenz von Transversalmoden in extrem engen Leitern (Elektronenwellenleiter), wobei der Kontaktwiderstand umgekehrt proportional zur Anzahl M der Moden ist.

Extrem enge Leiter heißen auch 2-DEG-Leiter (2-dim Elektronengas).

2-DEG

Wie gelangt man zum 2-dimensionalen Leiter?

An der Grenzfläche eines p-n-Übergangs baut sich bekanntlich ein elektrisches

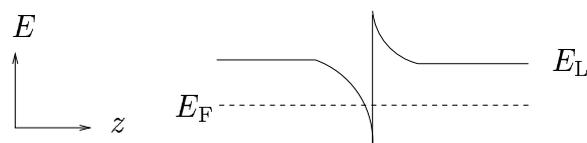


Abbildung 7: p-n-Übergang

Feld auf. Dadurch gleicht sich die jeweilige Fermienergie E_F der Materialien an und die Elektronendichte, also die Energie des Leitungsbandes E_L nimmt einen gepeakten Verlauf ein, dessen Tiefpunkt sich unterhalb der Fermienergie befindet. Gerade der Bereich unterhalb der Fermienergie ist leitend. Man kann nun durch Absenken der Temperatur die gequantelte Energie auf wenige Leitungskanäle

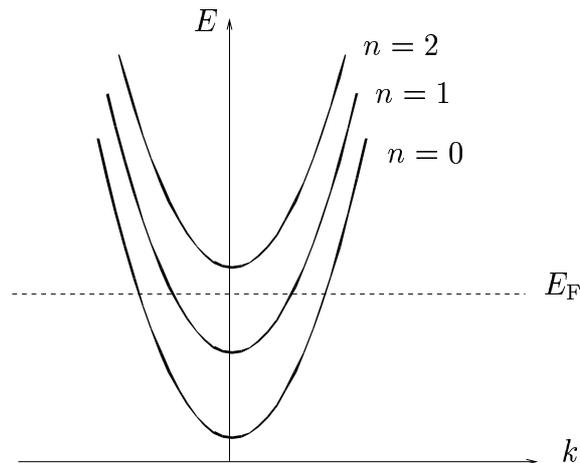


Abbildung 8: Energieeigenwerte

reduzieren. Im Extremfall bleibt nur ein einziger übrig (für die Richtung senkrecht zur Grenzfläche des p-n-Übergangs).

Um die offenen Leitungskanäle noch weiter zu reduzieren, legt man nun seitlich eine sogenannte Gatespannung an den Leiter an. Damit kann man sogar einen quasi eindimensionalen Leiter realisieren, denn nun werden die offenen Kanäle in der Richtung parallel zum Leiter eingeschränkt.

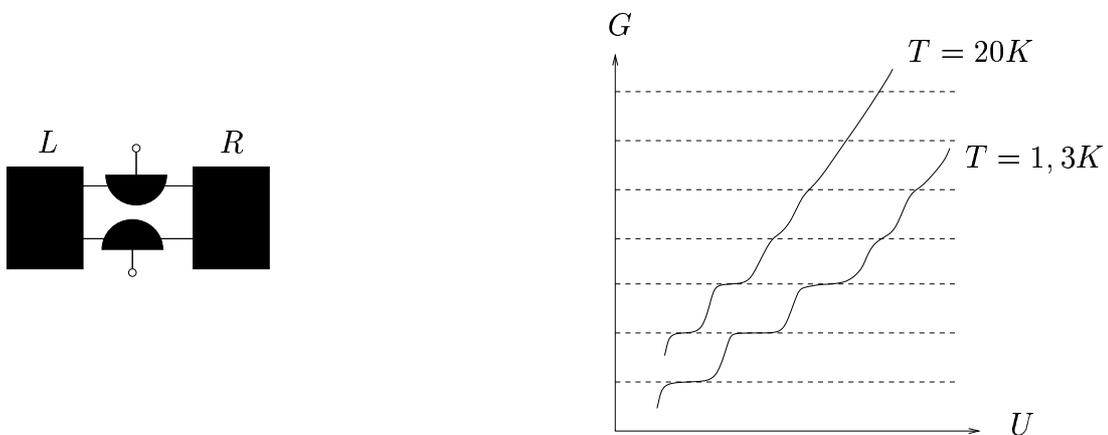


Abbildung 9: Gatespannung

Zusammenfassung

Das Ohm'sche Gesetz für den Leitwert muss korrigiert werden, wenn man sich in Richtung Mesoskopie bewegt.

1. Es gibt einen Kontaktwiderstand, der unabhängig von der Leiterlänge ist.

2. Die Leitfähigkeit nimmt nicht linear mit der Leiterbreite ab.

Abhilfe schafft die Landauer Formel

$$G = \frac{2e^2}{h} M \sum_n T_n$$

Herleitung für einen Kanal in einer Dimension

Es befindet sich eine Potentialbarriere in einem ballistischen Leiter (Transmissionsgrad $T=1$, keine Streuung), dessen linker Kontakt das Potential μ_L und dessen rechter Kontakt μ_R hat. Verwende die Fermi-Dirac-Verteilung f_L und f_R für die Elektronen, die aus den beiden Kontaktreservoirs kommen. Für den Strom zwischen den beiden Kontakten gilt allgemein

$$I = 2e \left[\int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} v(k) f_L(k) T(E(k)) - \int_0^\infty \frac{dk'}{2\pi} v(k') f_R(k') T(E(k')) \right]$$

Der Vorfaktor 2 steht für die Spinartung, $v(k)$ bezeichnet die Geschwindigkeit und $T(E(k))$ ist der Transmissionskoeffizient der Potentialbarriere. Für tiefe Temperaturen füllen die Elektronen in der linken Leiterhälfte die Energieniveaus bis zum Potential μ_L und die in der rechten Hälfte gerade die Niveaus bis μ_R auf. Nun transformiert man die Gleichung in ein Energieintegral

$$I = \frac{2e}{2\pi} \left[\int_0^{\mu_L} dE \left(\frac{dk}{dE} \right) v(k) T(E) - \int_0^{\mu_R} dE' \left(\frac{dk'}{dE'} \right) v(k') T(E') \right] = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE T(E)$$

wobei $\frac{dk}{dE} = \frac{1}{\hbar v}$ benutzt wird.

Unter der Annahme, dass die Spannung gering ist (Lineare Antworttheorie) und der Transmissionskoeffizient damit nicht von der Energie abhängt, kann man das Integral einfach ausführen.

$$I = \frac{2e}{h} T(\mu_L - \mu_R)$$

Somit ergibt sich für den Leitwert

$$G = \frac{I}{U} = \frac{2e^2}{h} T$$

Ergebnis

Entsprechend folgt die endgültige Landauer Formel, wenn man über alle auftretenden Transmissionsgrade summiert und alle zugänglichen Moden berücksichtigt.

$$G = \frac{2e^2}{h} M \sum_n T_n$$

Bemerkenswert ist die Größenordnung des Leitwerts pro Mode und für $T=1$. Der Term $\frac{2e^2}{h}$ beträgt ca. $26 k\Omega$ liegt also im problemlos messbaren Bereich.

Schwächen

Die von Landauer gelieferten theoretischen Ergebnisse stimmen sehr gut mit den Experimenten überein. Leider bezieht sich die 'Lineare Antworttheorie' wie aus den Annahmen ersichtlich nur auf kleine Störungen.

Literatur

- [1] S. Datta *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, 1997)
- [2] D.K. Ferry, S.M. Goodnick *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, 1999)
- [3] A. Schenk *Halbleiterbauelemente - Physikalische Grundlagen und Simulationen* (Integrated Systems Laboratory, ETH Zurich, 2003)