12. Kvantmekanisk beskrivning av resistivitet

I Drudes klassiska teori för elektronerna i metaller förklaras den elektriska resistiviten som en konsekvens av elekronernas kollisioner med jongittret och därmed sammanhängande energiförlust. I den kvantmekaniska beskrivningen av elektrongasen i ett periodiskt gitter är resistiviteten uteslutande en följd av imperfektioner i gittrets periodiska struktur. I ett perfekt periodiskt gitter beskrivs elektrontillstånden som Bloch-tillstånd $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$, som är stationära. Detta innebär att grupphastigheten

$$\vec{v}_g = \nabla_{\vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k})$$

för varje tillstånd är en tidsoberoende konstant vektor. Det finns ingen mekanism för degradering av elektronernas hastighet i ett perfekt gitter som därför bör vara supraledande om nollpunktsenergin inte tas i beaktande. Jonernas termiska vibrationsrörelse leder till avvikelser från perfekt periodicitet i gittret och därmed till att en ändlig resistivitet uppstår.

En fullständigt periodisk jonpotential är helt statisk:

$$U^{per}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} V(\vec{r} - \vec{R}).$$

Om jonernas avvikelser $\vec{u}(\vec{R})$ från sina jämviktslägen tas i beaktande blir den verkliga potentialfunktionen

$$\begin{aligned} U(\vec{r}) &= \sum_{\vec{R}} V(\vec{r} - \vec{R} - \vec{u}(\vec{R})) \\ &= U^{per}(\vec{r}) - \sum_{\vec{R}} \vec{u}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} V(\vec{r} - \vec{R}) + \ldots \end{aligned}$$

Korrektionstermen som är lineär i avvikelserna $\vec{u}$ kan tas i beaktande som en störningsterm H' som bör adderas till den fullständigt periodiska hamiltonoperatorn för växelverkan mellan elektronerna och jonerna. Denna kommer at leda till transitioner mellan olika Bloch-tillstånd, och möjliggör därmed att elektronernas energi och hastighet kan förandras, vilket är orsaken till resistiviteten.

Störningstermen kan beskrivas som en operator för kreation och absorption av fononer:

I kreationsprocessen för en fonon med rörelsemängden $\vec{q}$ och energin $\hbar\omega(\vec{q})$ gäller

$$\varepsilon_{\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}) = \varepsilon_{\vec{k}}, \quad \vec{q} + \vec{k}' = \vec{k}.$$

Vid motsvarande absorptionsprocess gäller

$$\varepsilon_{\vec{k}'} = \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\omega(\vec{q}), \quad \vec{q} - \vec{k} = \vec{k}'.$$

Dessa ekvationer kan sammanfattas i formen

$$\omega(\vec{q}) = \pm\frac{1}{\hbar}[\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}].$$

Denna ekvation begränsar de tillåtna vågvektorerna $\vec{q}$ som kan uppträda i transitionsprocesserna. Fononenergin $\hbar\omega(\vec{q})$ är mycket mindre än Ferminenergin ε_F so att $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}$ skiljer sig mycket litet från $\varepsilon_{\vec{k}}$.

Antalet fononer med energin $\hbar\omega(\vec{q})$ är

$$n(\vec{q}) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega(\vec{q})} - 1}.$$

Vid höga temperaturer är β litet och

$$n(\vec{q}) \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega(\vec{q})}.$$

Då antalet fononer är proportionellt mot T blir resistiviteten också proportionell mot T, eftersom fononantalet bestämmer raten för degradering av elektronhastigheten. Vid höga temperaturer - dvs rumstemperatur och högre gäller således att

$$\rho \sim T.$$

Vid låga temperaturer gäller att enbart fononer vars energi $\hbar\omega(\vec{q}) \lesssim k_B T$ kan emitteras och absorberas av elektroner. Detta följer av att de enda elektroner som kan delta i spridningsprocesser är de vars energi ligger inom ett område kring Fermienergin ε_F vars bredd är $k_B T << \varepsilon_F$. Då $\hbar\omega(\vec{q})$ är litet gäller att $\omega \sim cq$. Detta leder til att

$$|q| \lesssim \frac{k_B T}{\hbar c},$$

och därigenom till att endast en subyta med lineär dimension $\sim T$ (och area $\sim T^2$) av ytan

$$\omega(\vec{q}) = \pm\frac{1}{\hbar}[\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}]$$

kan bidra tillåtna fononvågvektorer till emissions- och absorptionsprocesserna.

Vidare bör tas i beaktande att vid låga temperaturer elektron-fononväxelverkans styrka är proportionell mot $\sqrt{T}$. Då denna uppträder kvadrerad i träffytan för spridningsprocesser gäller att resistiviteten vid låga temperaturer blir proportionell mot T^3:

$$\rho \sim T^3.$$

Det faktum att fononenergierna $\hbar\omega(\vec{q})$ är mycket små i jämförelse med elektronenergierna $\varepsilon_{\vec{k}}$ och $\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}$ gör att $\vec{k} \approx \vec{k}+\vec{q}$ vid låga temperaturer, vilket innebär att elektron-fonon spridningar träffytan är koncentrerad till vinklar i en smal kon kring $\vec{k}$ - dvs den är framåtpikad.

Denna geometriska effekt tillför en ytterligare faktor

$$\begin{aligned}(1 - cos\theta) &= 2sin^2\theta/2 \\ &= \frac{1}{2}(\frac{q}{k_F})^2\end{aligned}$$

till spridningsraten. Då $q \sim T$ ger denna faktor upphov till en ytterligare faktor T^2 till resistiviteten vilken småledes blir proportionell mot T^5:

$$\rho \sim T^5$$

vid mycket låga temperaturer.