Physik der Kondensierten Materie 1

Rudolf Gross

WS 2020/2021

Teil 25

Vorlesungsstunde: 09.02.2021

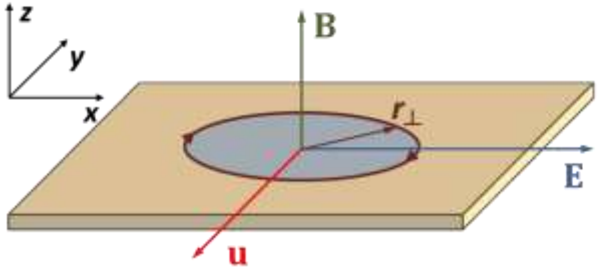
Zusammenfassung: Teil 24, 04.02.2021/1

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

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

geschlossene Bahnbewegung
(k-Raum Trajektorie um 90° gedreht und skaliert)

Translationsbewegung
mit Driftgeschwindigkeit $\mathbf{u} \perp \mathbf{E}, \mathbf{B}$



Trajektorie im k-Raum:

häufig sehr gute Näherung

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

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

➔ ***mittlere Bewegungskomponente durch geschlossene Bahnbewegung verschwindet***

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

• ***Streuprozesse***

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

Berechnung mit qm Störungstheorie

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

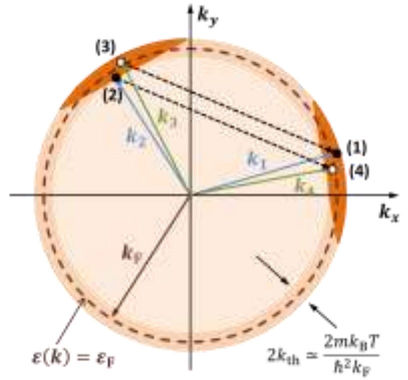
Zusammenfassung: Teil 24, 04.02.2021/2

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

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

Unterdrückung um Faktor $\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 \approx 10^{-10}$ @ 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:***

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

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

Vorwärtsstreuung: $\theta = 0°$, Wichtungsfaktor: 0
Rückwärtsstreuung: $\theta = 180°$, 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:

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

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

- ***Elektron-Verunreinigung-Streuung:***

Neutrale Störstellen:

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

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

Querschnittsfläche   relative Höhe des Potenzials

Zusammenfassung: Teil 24, 04.02.2021/3

- ***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***)

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

- ***Elektron-Phonon-Streuung:***

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

(i) hohe T $(T \gg \Theta_\mathrm{D})$: $\overline{\Delta^2} = \frac{\hbar^2 q_\mathrm{D}^2 k_\mathrm{B} T}{M k_\mathrm{B}^2 \Theta_\mathrm{D}^2}$ ⇒ $\frac{1}{\ell} \simeq n_A S_A \frac{\hbar^2 q_\mathrm{D}^2 k_\mathrm{B} T}{M k_\mathrm{B}^2 \Theta_\mathrm{D}^2}$ ⇒ $\boxed{\rho_\mathrm{ph}(T) \propto \frac{T}{M\Theta_\mathrm{D}^2}}$

(ii) tiefe T $(T \ll \Theta_\mathrm{D})$ $\frac{1}{\ell} \simeq n_A \sigma_A \frac{\hbar^2 q_\mathrm{D}^2 k_\mathrm{B} T}{M k_\mathrm{B}^2 \Theta_\mathrm{D}^2}\left(\frac{T}{\Theta_\mathrm{D}}\right)^4 \int_0^{\Theta_\mathrm{D}/T} \frac{4x^4}{(\exp(x)-1)}\,\mathrm{d}x$ ⇒ $\boxed{\rho_\mathrm{ph}(T) \propto \left(\frac{T}{\Theta_\mathrm{D}}\right)^5}$ **(Bloch-Grüneisen -Gesetz)**

$$x = \frac{\hbar\omega_q}{k_\mathrm{B}T} = \frac{\Theta_\mathrm{D}}{T}\frac{q}{q_\mathrm{D}}$$

9.4 Boltzmann-Transportgleichung

- **Boltzmann-Transportgleichung wurde bereits zur Beschreibung des Ladungs- und Wärmetransports von freien Elektronen benutzt**

  – Zuwachs des mittleren Impulses durch äußere Kräfte: $\frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t}\Big|_{\mathrm{Kraft}} = \mathbf{F}/\hbar$

  – Impulsrelaxation durch Streuprozesse: $\frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t}\Big|_{\mathrm{Streu}} = -\frac{\langle \mathbf{k} \rangle - \langle \mathbf{k} \rangle^{\mathbf{0}}}{\boldsymbol{\tau}}$

  – Geschwindigkeit der freien Elektronen: $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}/m$

  ➔ **mittlere Geschwindigkeit hängt von der Besetzungswahrscheinlichkeit $f(\mathbf{k})$ der Zustände ab**

  ➔ **Besetzungswahrscheinlichkeit $f(\mathbf{k})$ wird mit Boltzmann-Transportgleichung bestimmt**

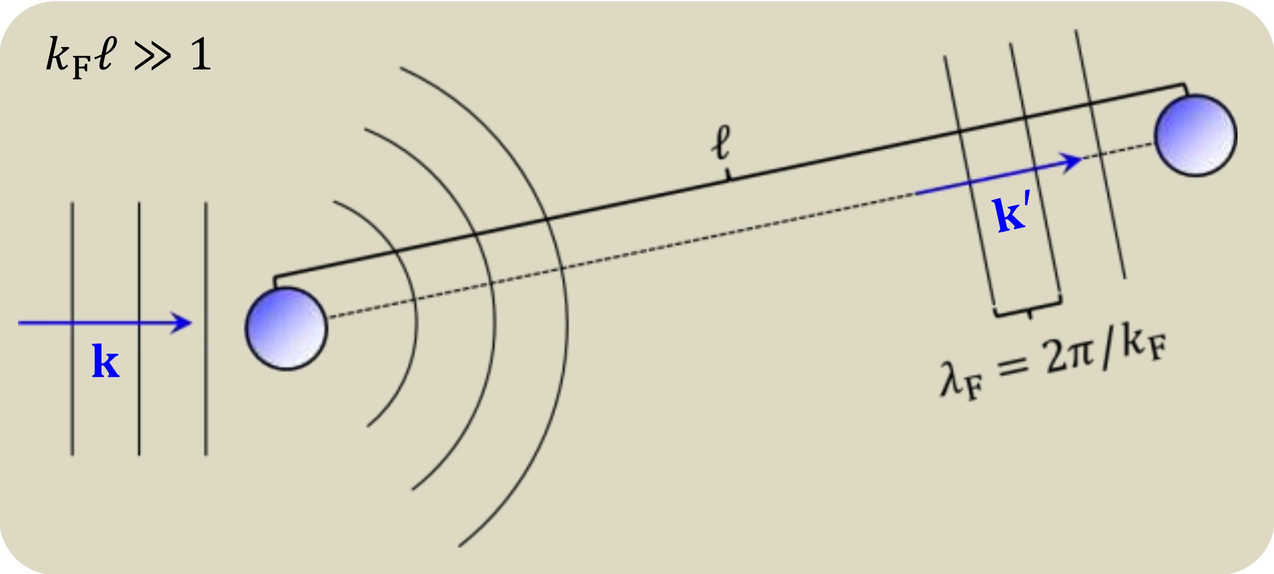
- **Jetzt:**
  Bewegung von Kristallelektronen unter Wirkung von äußeren Kräften und relaxierenden Streuprozessen

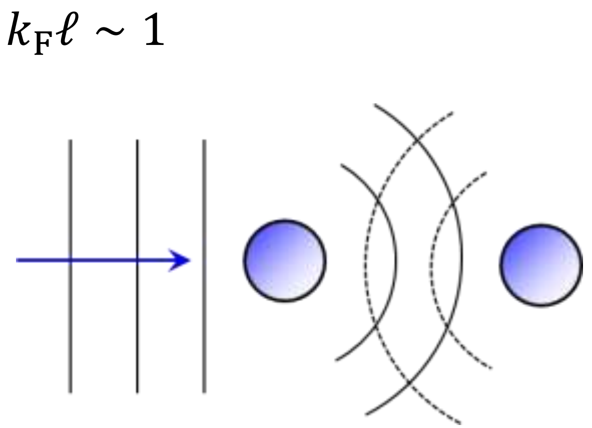
  – Zuwachs des mittleren Impulses durch äußere Kräfte: $\frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t}\Big|_{\mathrm{Kraft}} = \mathbf{F}/\hbar$

  – Impulsrelaxation durch Streuprozesse: $\frac{\partial \langle \mathbf{k} \rangle}{\partial t}\Big|_{\mathrm{Streu}} = -\frac{\langle \mathbf{k} \rangle - \langle \mathbf{k} \rangle^{\mathbf{0}}}{\boldsymbol{\tau}}$

  – Geschwindigkeit der freien Elektronen: $\mathbf{v}_n = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$

- **Grundannahme: Transportprozesse können semiklassisch beschrieben werden**





Voraussetzung:

- Beschreibung der Elektronen durch Bloch-Wellen mit wohldefiniertem Impuls
- erfordert

$$\lambda_F \gg \ell \qquad \text{bzw.} \qquad k_F \ell \gg 1$$

9.4.1 Boltzmann-Gleichung und Relaxationszeit

- **Wiederholung: Ladungs- und Wärmestromdichte**

Ladungsstromdichte

$$\mathbf{J}_q = \frac{q}{4\pi^3}\int \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3k$$

Wärme- oder Energiestromdichte

$$\mathbf{J}_h = \frac{1}{4\pi^3}\int \underbrace{[\varepsilon(\mathbf{k})-\mu]}_{\xi(\mathbf{k})}\,\mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3k$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon(\mathbf{k})}{\partial\mathbf{k}}$$

wir benötigen

- Bandstruktur $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ (bereits diskutiert in Kapitel 8)
- Besetzungswahrscheinlichkeit $f\left(\varepsilon_n(\mathbf{k})\right)$ (erfolgt jetzt)

(Bandindex n wird meist weggelassen)

- **Wodurch kommen Änderungen der Besetzungswahrscheinlichkeit $f\left(\varepsilon_n(\mathbf{k})\right)$ von Zuständen zustande?**

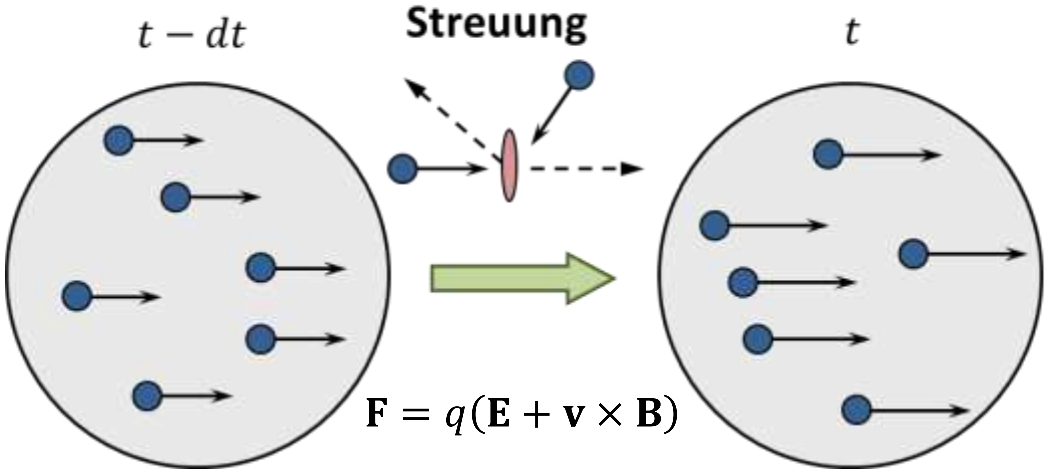
im Wesentlichen durch drei Prozesse

- **treibende externe Kräfte**, z.B. durch externe elektrische und magnetische Felder oder Temperaturgradienten
- **Diffusion** aufgrund von Schwankungen der räumlichen Elektronendichte
- **Impulsrelaxation durch Streuprozesse**

➔ **Beschreibung durch Boltzmann-Gleichung**

9.4.1 Boltzmann-Gleichung und Relaxationszeit

- zeitliche Änderung der Besetzungswahrscheinlichkeit in einem Testvolumen



Zeit $t - \mathrm{d}t$:	$\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k})\mathrm{d}t$	$\mathbf{k} - \frac{\mathbf{F}}{\hbar}\,\mathrm{d}t$
Zeit t:	$\mathbf{r}$	$\mathbf{k}$

$$f\left(\mathbf{r} - \mathbf{v}\mathrm{d}t, \mathbf{k} - \frac{\mathbf{F}}{\hbar}\mathrm{d}t, t - \mathrm{d}t\right) \Longrightarrow f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

$$\Rightarrow \quad f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f\left(\mathbf{r} - \mathbf{v}\mathrm{d}t, \mathbf{k} - \frac{\mathbf{F}}{\hbar}\mathrm{d}t, t - \mathrm{d}t\right) + \left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t}\right)_{\mathrm{Streu}} \mathrm{d}t$$

$$\Rightarrow \quad \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f\left(\mathbf{r} - \mathbf{v}\mathrm{d}t, \mathbf{k} - \frac{\mathbf{F}}{\hbar}\mathrm{d}t, t - \mathrm{d}t\right)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t}\right)_{\mathrm{Streu}}$$

9.4.1 Boltzmann-Gleichung und Relaxationszeit

- **Boltzmann-Gleichung**

$$\frac{\mathrm{d}f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t} + \left(\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial \mathbf{r}}\right)\left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t}\right) + \left(\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial \mathbf{k}}\right)\left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{\mathrm{d}t}\right) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t}\right)_{\text{Streu}}$$

– wir verwenden: $\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r},t)}{\hbar} = -\frac{1}{\hbar}\,\nabla_r \varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{k},t)$, $\quad \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{v}$, $\quad \frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\,\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{k},t) = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\hbar \mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)$

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t} + \underbrace{\mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\cdot\nabla_r f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}_{\text{Diffusionsterm (räumliche Gradienten der Verteilungsfunktion)}} \underbrace{- \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\,\nabla_r \varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\cdot\mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}_{\text{Feldterm (bestimmt durch die wirkenden Kräfte)}} = \left(\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t}\right)_{\text{Streu}}$$

z.B. $\mathbf{F} = -\nabla_r \varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{k},t) = q\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + q\mathbf{v}\times\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$

– stationärer Zustand:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\cdot\nabla_r f(\mathbf{r},\mathbf{k},t) - \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\,\nabla_r \varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\cdot\mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t}\right)_{\text{Streu}}$$

9.4.1 Boltzmann-Gleichung und Relaxationszeit

- Diskussion von einfachem Fall: stationärer Zustand, $\mathbf{E} \neq 0, \mathbf{B} = 0$, räumlich homogene Probe

$$\mathbf{F} = -\nabla_r \varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = q\mathbf{E}$$

$$\nabla_r f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = 0$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \cdot \nabla_r f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \nabla_r \varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t}\right)_{\text{Streu}}$$

$$\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} q\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} \Rightarrow \left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} = q\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}$$

Integro-Differentialgleichung

Problem bei der Lösung stellt der Streuterm dar, da dieser im Allgemeinen durch ein Streuintegral gegeben ist

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} \propto \int d\mathbf{k}' \left([1 - f(\mathbf{k})] P_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}') - [1 - f(\mathbf{k}') P_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} f(\mathbf{k})]\right) \qquad \text{mit } \mathrm{P}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \propto |\langle \mathbf{k}' | \mathcal{H}^p | \mathbf{k} \rangle|^2 = \left| \int \mathrm{d}^3 r\, \Psi^*_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \mathcal{H}^p \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right|^2$$

- Vereinfachungen:
  - Linearisierung ➔ Beschränkung auf kleine Abweichungen vom Gleichgewicht
  - Relaxationszeit-Näherung ➔ Beschreibung der Streuprozesse mit einfacher Relaxationsrate τ^{-1}

9.4.2 Linearisierte Boltzmann-Gleichung

- **Annahme: Abweichungen von der Gleichgewichtsverteilungsfunktion $f_0(\mathbf{k})$ sind klein**

$$f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = f_0(\mathbf{k}) + \delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) \qquad \text{mit} \qquad f_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_0(\mathbf{k})-\mu_0}{k_B T_0}\right)+1}$$

  – für die Gradienten gilt, da $f_0, \varepsilon_0, \mu_0, T_0$ räumlich und zeitlich konstant sind:

$$\nabla_{\mathbf{r}} f = \nabla_{\mathbf{r}} \delta f \qquad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial\, \delta f}{\partial t} \qquad \nabla_{\mathbf{k}} f = \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon = \frac{\partial f}{\partial \epsilon}\, \hbar \mathbf{v} \qquad \nabla_{\mathbf{r}} \varepsilon = \nabla_{\mathbf{r}} \delta\varepsilon$$

  – einsetzen in die Boltzmann-Transportgleichung

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) \cdot \nabla_r f(\mathbf{r},\mathbf{k},t) - \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \nabla_r \varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{k},t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t}\right)_{\text{Streu}}$$

ergibt: $$\frac{\partial\, \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \delta f - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{r}} \delta\varepsilon \cdot \frac{\partial f}{\partial \epsilon}\, \hbar \mathbf{v} = \left(\frac{\partial\, \delta f}{\partial \mathrm{t}}\right)_{\text{Streu}}$$

immer noch kompliziertes Streuintegral δI_{Streu}

$$\frac{\partial\, \delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t} + \underbrace{\mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}_{\text{Diffusionsterm}} \underbrace{- \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \nabla_{\mathbf{r}} \delta\varepsilon(\mathbf{k},\mathbf{r},t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}_{\text{Feldterm}} = \left(\frac{\partial\, \delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} = \delta I_{\text{Streu}}$$

linearisierte Boltzmann-Transportgleichung

9.4.3 Relaxationszeitansatz

- **Approximation des komplizierten Streuterms durch einfachen Relaxationszeitansatz**

$$\left(\frac{\partial\, \delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial \mathrm{t}}\right)_{\text{Streu}} = \delta I_{\text{Streu}} = -\frac{f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) - f_0^{\text{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\tau(\mathbf{k})} = -\frac{g(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\tau(\mathbf{k})}$$

Beschreibung aller Streuprozesse durch eine $\mathbf{k}$-abhängige Streuzeit $\tau(\mathbf{k})$

– Verwendung von ***lokaler Gleichgewichtsverteilungsfunktion*** $f_0^{\text{loc}}[\varepsilon(\mathbf{k},\mathbf{r},t), \mu(\mathbf{r},t), T(\mathbf{r},t)]$

$$f_0^{\text{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = \frac{1}{\exp\left(\frac{[\varepsilon_0(\mathbf{k}) + \delta\varepsilon(\mathbf{r},t)] - [\mu_0 + \delta\mu(\mathbf{r},t)]}{k_{\mathrm{B}}\,[T_0 + \delta T(\mathbf{r},t)]}\right) + 1}$$

hierbei geben $\delta\varepsilon(\mathbf{r},t), \delta\mu(\mathbf{r},t)$ und $\delta T(\mathbf{r},t)$ die lokalen Änderungen der potenziellen Energie $\varepsilon = \varepsilon_0 + \delta\varepsilon$, des chemischen Potenzials $\mu = \mu_0 + \delta\mu$ und der Temperatur $T = T_0 + \delta T$ an

Beispiel: es wirken nur elektrische und magnetische Felder

es gilt: $\delta\varepsilon(\mathbf{r},t) = q\phi(\mathbf{r},t) - q\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$

($\mathbf{F} = -\nabla_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon(\boldsymbol{r},t) = q\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + q\mathbf{v}\times\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$, für Elektronen: $q = -e$)
$\phi(\mathbf{r},t) =$ elektrostatische Potenzial, $\mathbf{A}(\mathbf{r},t) =$ Vektorpotenzial

– ***neue Verteilungsfunktion*** $g(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$: gibt Abweichung von $f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$ von $f^{\text{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$:

$$g(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) - f_0^{\text{loc}}[\varepsilon(\mathbf{k},\mathbf{r},t), \mu(\mathbf{r},t), T(\mathbf{r},t)] = f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) - f_0^{\text{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$$

9.4.3 Relaxationszeitansatz

- **lokale Gleichgewichtsverteilungsfunktion $f_0^{\rm loc}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$**

$$f_0^{\rm loc}[\varepsilon(\mathbf{k},\mathbf{r},t),\mu(\mathbf{r},t),T(\mathbf{r},t)] \qquad \text{mit } \varepsilon=\varepsilon_0+\delta\varepsilon,\ \mu=\mu_0+\delta\mu,\ T=T_0+\delta T$$

– sind $\delta\varepsilon(\mathbf{r},t), \delta\mu(\mathbf{r},t)$ und $\delta T(\mathbf{r},t)$ klein, so können wir $f_0^{\rm loc}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$ in Taylor-Reihe entwickeln und nach 1. Entwicklungsglied abbrechen:

$$f_0^{\rm loc}(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = f_0(\mathbf{k}) + \frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\delta\varepsilon + \frac{\partial f_0}{\partial\mu}\delta\mu + \frac{\partial f_0}{\partial T}\delta T + \ \dots$$

wir benutzen: $\frac{\partial f_0}{\partial T} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\frac{\varepsilon-\mu}{T} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\frac{\xi}{T}$, $\quad \frac{\partial f_0}{\partial\mu} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)$

$$\Rightarrow\quad \delta f^{\rm loc}(\mathbf{k},\mathbf{r},t) \simeq f_0^{\rm loc}(\mathbf{k},\mathbf{r},t) - f_0(\mathbf{k}) = \frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\left[\delta\varepsilon-\delta\mu-\frac{\xi}{T}\delta T\right] = -\underbrace{\frac{1}{4k_{\rm B}T\cosh^2\frac{\xi}{2k_{\rm B}T}}}_{\varphi_k\,=\,-\partial f_0/\partial\varepsilon}\left[\delta\varepsilon-\delta\mu-\frac{\xi}{T}\delta T\right]$$

➔ lokale Abweichung $\delta f^{\rm loc}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$ von Gleichgewichtsverteilungsfunktion $f_0(\mathbf{k})$

$$\delta f^{\rm loc}(\mathbf{k},\mathbf{r},t) \simeq -\frac{1}{4k_{\rm B}T\cosh^2\frac{\xi}{2k_{\rm B}T}}\left[\delta\varepsilon-\delta\mu-\frac{\xi}{T}\delta T\right] = -\varphi_k\left[\delta\varepsilon-\delta\mu-\frac{\xi}{T}\delta T\right]$$

enthält Effekte von $\varepsilon=\varepsilon_0+\delta\varepsilon$, $\mu=\mu_0+\delta\mu$ und $T=T_0+\delta T$, wobei $\delta\varepsilon(\mathbf{r},t)=q\phi(\mathbf{r},t)-q\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$

9.4.3 Relaxationszeitansatz

- **Lokale Teilchen, Ladungs- und Energiedichte**

  – lokale Abweichung von Gleichgewichtsverteilungsfunktion $\delta f^{\mathrm{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = -\varphi_k \left[\delta\varepsilon - \delta\mu - \frac{\xi}{T}\delta T\right]$ $\qquad \xi = \varepsilon - \mu_0$

  enthält Effekte von $\varepsilon = \varepsilon_0 + \delta\varepsilon$, $\mu = \mu_0 + \delta\mu$ und $T = T_0 + \delta T$, wobei $\delta\varepsilon(\mathbf{r},t) = q\phi(\mathbf{r},t) - q\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$

  – $\delta f^{\mathrm{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$ ist verbunden mit lokalen Abweichungen der ***Teilchen-, Ladungs-*** und ***Energiedichte***

- **Lokale Teilchendichte**

$$\delta n(\mathbf{r},t) = \frac{2}{V}\int Z(\mathbf{k})\,\delta f^{\mathrm{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)d^3k = \frac{1}{4\pi^3 V}\int \delta f^{\mathrm{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)d^3k = \frac{1}{V}\int D(\varepsilon)\,\delta f^{\mathrm{loc}}(\varepsilon(\mathbf{k}),\mathbf{r},t)\,d\varepsilon$$

$$\delta n(\mathbf{r},t) = -\frac{1}{V}\int D(\varepsilon)\,\varphi_k\left[\delta\varepsilon - \delta\mu - \frac{\xi}{T}\delta T\right]d\varepsilon = -\frac{1}{V}\int D(\varepsilon)\underbrace{\frac{1}{4k_\mathrm{B}T\cosh^2\frac{\xi}{2k_\mathrm{B}T}}}_{\simeq\,\delta(\varepsilon-\mu_0)}\left[\delta\varepsilon - \delta\mu - \frac{\varepsilon-\mu_0}{T}\delta T\right]d\varepsilon$$

$\simeq \delta(\varepsilon - \mu_0)$ für nicht allzu hohe Temperaturen

- **Lokale Teilchen- und Ladungsdichte**

$$\delta n(\mathbf{r},t) \simeq \frac{1}{V}\int D(\varepsilon)\,\delta(\varepsilon-\mu_0)\left[-\delta\varepsilon+\delta\mu+\frac{\varepsilon-\mu_0}{T}\delta T\right]d\varepsilon$$

für $\delta\varepsilon(\mathbf{r},t) = q\phi(\mathbf{r},t)$

$$\delta n(\mathbf{r},t) = \frac{D(\mu_0)}{V}[\delta\mu(\mathbf{r},t) - q\phi(\mathbf{r},t)]$$ *Teilchendichte*

$$\delta\rho(\mathbf{r},t) = q\delta n(\mathbf{r},t) = \frac{q\,D(\mu_0)}{V}[\delta\mu(\mathbf{r},t) - q\phi(\mathbf{r},t)]$$ *Ladungsdichte*

- **Lokale Energiedichte**

$$\delta\tilde{\varepsilon}(\mathbf{r},t) = -\frac{1}{V}\int \varepsilon\, D(\varepsilon)\underbrace{\frac{1}{4k_\mathrm{B}T\cosh^2\frac{\xi}{2k_\mathrm{B}T}}}_{\simeq\,\delta(\varepsilon-\mu_0)\,=\,\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)}\left[\delta\varepsilon-\delta\mu-\frac{\varepsilon-\mu_0}{T}\delta T\right]d\varepsilon = \mu\,\delta n(\mathbf{r},t) + c_V(T)\,\delta T(\mathbf{r},t)$$

$$\delta\tilde{\varepsilon}(\mathbf{r},t) = \mu_0\,\delta n(\mathbf{r},t) + c_V(T)\,\delta T(\mathbf{r},t)$$ *Energiedichte*

es gilt:

$$c_V = \frac{1}{V}\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial T}\int \varepsilon\, D(\varepsilon) f(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

mit $\frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\frac{\epsilon-\mu_0}{T}$ folgt

$$c_V = \frac{1}{V}\int \varepsilon\, D(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\frac{\epsilon-\mu_0}{T}\,d\varepsilon$$

- **Linearisierte Boltzmann-Gleichung für $g(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$**

  – Ausgangspunkt: ***linearisierte Boltzmann-Transportgleichung***

$$\frac{\partial\,\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\cdot\nabla_{\mathbf{r}}\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) - \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\nabla_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon(\mathbf{k},\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) = \left(\frac{\partial\,\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} = \delta I_{\text{Streu}}$$

  – es gilt $g = f - f_0^{\text{loc}} = f - f_0 - \left(f_0^{\text{loc}} - f_0\right) = \delta f - \delta f^{\text{loc}} \Rightarrow \delta f = g + \delta f^{\text{loc}}$

  – Einsetzen von $\delta f = g + \delta f^{\text{loc}}$ in linearisierte Boltzmann-Transportgleichung ergibt:

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial\,(g+\delta f^{\text{loc}})}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}\left(g+\delta f^{\text{loc}}\right) + \varphi_k\nabla_{\mathbf{r}}\delta\epsilon\cdot\mathbf{v} = -\frac{g}{\tau}$$

mit $\delta f^{\text{loc}} = -\varphi_k\left[\delta\varepsilon - \delta\mu - \frac{\xi}{T}\delta T\right]$ erhalten wir

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial\left\{-\varphi_k\left[\delta\varepsilon - \delta\mu - \frac{\xi}{T}\delta T\right]\right\}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}g + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}\left\{-\varphi_k\left[\delta\varepsilon - \delta\mu - \frac{\xi}{T}\delta T\right]\right\} + \varphi_k\nabla_{\mathbf{r}}\delta\epsilon\cdot\mathbf{v} = -\frac{g}{\tau}$$

9.4.3 Relaxationszeitansatz

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial\left\{-\varphi_k\left[\delta\varepsilon - \delta\mu - \frac{\xi}{T}\delta T\right]\right\}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} g + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}\left\{-\varphi_k\left[\delta\varepsilon - \delta\mu - \frac{\xi}{T}\delta T\right]\right\} + \varphi_k \nabla_{\mathbf{r}}\delta\epsilon\cdot\mathbf{v} = -\frac{g}{\tau}$$

– wir verwenden $\delta\varepsilon = q\phi - q\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}$, $\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{r}}\phi - \partial\mathbf{A}/\partial t$ und $\delta n = (\delta\mu - q\phi)D(\mu_0)/V$ und erhalten

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}\right] g + \varphi_k \frac{\partial}{\partial t}\left[q\mathbf{v}\cdot\mathbf{A} + \frac{\delta n}{D(\mu)/V} + \frac{\xi}{T}\delta T\right] - \varphi_k \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}\underbrace{\left[q\phi + ev\cdot A - \delta\mu - \frac{\xi}{T}\delta T - q\phi - ev\cdot A\right]}_{-\frac{\delta n}{D(\mu)/V} - \frac{\xi}{T}\delta T - q\phi} = 0$$

$$\Rightarrow \left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}\right] g + \varphi_k \frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\delta n}{D(\mu)/V} + \frac{\xi}{T}\delta T\right] - \varphi_k \mathbf{v}\cdot\left[\underbrace{q\mathbf{E}}_{q\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{r}} q\phi - q\,\partial\mathbf{A}/\partial t} - \nabla_{\mathbf{r}}\frac{\delta n}{D(\mu)/V} - \frac{\xi}{T}\nabla_{\mathbf{r}}\delta T\right] = 0$$

$q\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{r}} q\phi - q\,\partial\mathbf{A}/\partial t$ (eichinvariantes $\mathbf{E}$-Feld)

– multiplizieren mit τ:

$$\left[\tau\frac{\partial}{\partial t} + 1 + \tau\,\mathbf{v}\cdot\nabla_r\right] g + \varphi_k \tau\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\delta n}{D(\mu_0)/V} + \frac{\xi}{T}\delta T\right] - \tau\varphi_k \mathbf{v}\cdot\left[q\mathbf{E} - \nabla_{\mathbf{r}}\frac{\delta n}{D(\mu_0)/V} - \frac{\xi}{T}\nabla_{\mathbf{r}}\delta T\right] = 0$$

➔ wir vernachlässigen Terme in höherer Ordnung: $\tau\frac{\partial}{\partial t}$ und $\tau\,\mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}$ (2. Zeit- und Ortsableitungen)

9.4.3 Relaxationszeitansatz

$$g(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = \tau\varphi_k \mathbf{v}\cdot\Bigg[\underbrace{q\,\mathbf{E}(\mathbf{r},t) - \nabla_\mathbf{r}\frac{\delta n(\mathbf{r},t)}{D(\mu_0)/V} - \frac{\xi}{T}\nabla_\mathbf{r}\delta T(\mathbf{r},t)}_{\textit{verallgemeinerte Kraft A}}\Bigg]$$

die Funktion $g(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$ ist Ausgangspunkt für die Berechnung der Transportkoeffizienten

$$\varphi_k = \frac{1}{4k_\mathrm{B}T\cosh^2\frac{\xi}{2k_\mathrm{B}T}1} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)$$

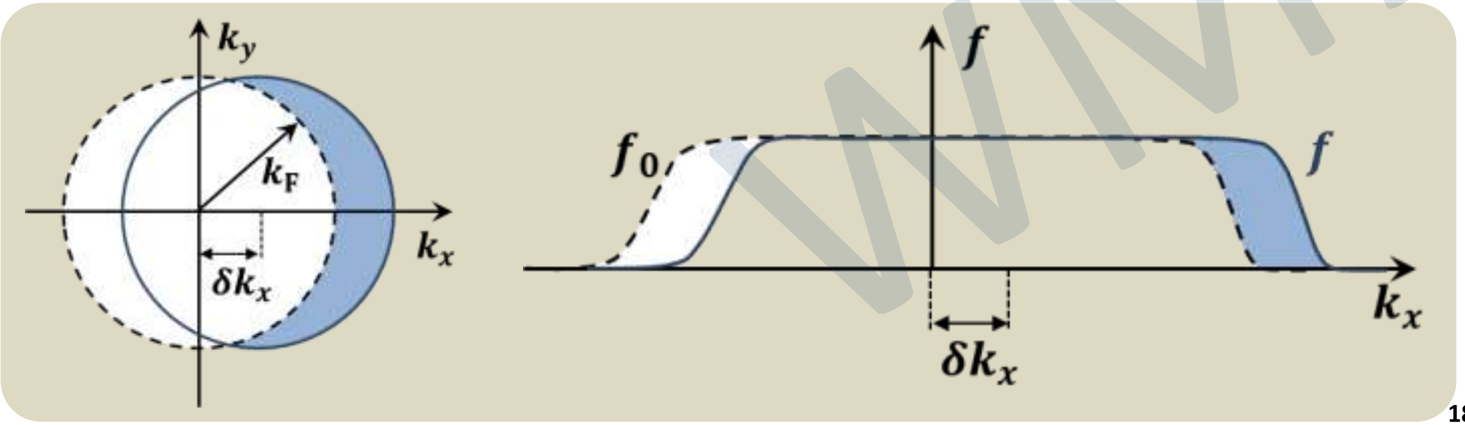
Beispiel: räumlich homogener Fall, keine Temperaturgradienten: $\nabla_\mathbf{r}\delta n = 0, \nabla_\mathbf{r}\delta T = 0, f_0^\mathrm{loc} = f_0$

$$g(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = g(\mathbf{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\tau\,\mathbf{v}\cdot q\mathbf{E} = -\frac{\partial f_0}{\partial k}\frac{\tau q\,\mathbf{v}\cdot\mathbf{E}}{|\nabla_\mathbf{k}\varepsilon|} = -\frac{\partial f_0}{\partial k}\frac{\tau q\,\mathbf{v}\cdot\mathbf{E}}{\hbar\,v} = -\frac{\partial f_0}{\partial k}\cdot\frac{qE\tau}{\hbar}$$

da $f = f_0 + g \simeq f_0 - \frac{\partial f_0}{\partial k}\cdot\frac{qE\tau}{\hbar} = f^\mathrm{loc} - \frac{\partial f_0}{\partial k}\cdot\delta k$ mit $\delta k = \frac{qE\tau}{\hbar}$, kann f als Entwicklung von f_0 aufgefasst werden:

$$\Rightarrow\quad f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}-\delta\mathbf{k}) = f_0\left(\mathbf{k} - \frac{q\mathbf{E}\tau}{\hbar}\right)$$

entspricht einer um $\delta\mathbf{k} = \frac{q\mathbf{E}\tau}{\hbar}$ verschobene Fermi-Kugel



- Berechnung der Transportkoeffizienten mit $g(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$

➔ wir diskutieren nur den stationären und räumlich homogenen Fall ($\nabla_{\mathbf{r}} \delta n(\mathbf{r}, t) = 0$) und nehmen $B = 0$ an

$$g(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \tau \varphi_k \mathbf{v} \cdot \left[q\, \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta n(\mathbf{r}, t)}{D(\mu_0)/V} - \frac{\xi}{T} \nabla_{\mathbf{r}} \delta T(\mathbf{r}, t) \right] = \tau \varphi_k \mathbf{v} \cdot \underbrace{\left[q\, \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \frac{\xi}{T} \nabla_{\mathbf{r}} \delta T(\mathbf{r}, t) \right]}_{\text{verallgemeinerte Kraft } \mathcal{A}\,(\mathbf{r},t)}$$

$$\varphi_k = \frac{1}{4 k_\mathrm{B} T \cosh^2 \frac{\xi}{2 k_\mathrm{B} T} 1} = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

$$g(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \tau(\mathbf{k})\, \varphi_k\, \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}(\mathbf{r}, t) = \tau(\mathbf{k}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{A}(\mathbf{r}, t)$$

- **elektrische Stromdichte**

$$\mathbf{J}_\mathrm{q} = \frac{q}{4\pi^3\hbar}\int \boldsymbol{\nabla}_\mathbf{k}\,\varepsilon(\mathbf{k})\,f(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3k = \frac{q}{4\pi^3}\int \mathbf{v}(\mathbf{k})\,f(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3k$$

mit $f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + g(\mathbf{k})$

$$\mathbf{J}_\mathrm{q} = \underbrace{\frac{q}{4\pi^3}\int \mathbf{v}(\mathbf{k})\,f_0(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3k}_{=0} + \frac{q}{4\pi^3}\int \mathbf{v}(\mathbf{k})\,g(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3k = \frac{q}{4\pi^3}\int \mathbf{v}(\mathbf{k})\,g(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3k$$

mit $g(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = \tau(\mathbf{k})\,\varphi_k\mathbf{v}(\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r},t) = \tau(\mathbf{k})\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\mathbf{v}(\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r},t)$ und $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r},t) = q\,\mathbf{E}(\mathbf{r},t) - \frac{\xi}{T}\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{r}\delta T(\mathbf{r},t)$ erhalten wir

$$\mathbf{J}_\mathrm{q} = \frac{q}{4\pi^3}\int \mathbf{v}(\mathbf{k})\,g(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3k$$

$$= \frac{q}{4\pi^3}\int \tau(\mathbf{k})\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\mathbf{v}(\mathbf{k})\otimes\mathbf{v}(\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}^3k$$

dyadisches Produkt

$$x\otimes y = x\cdot y^T = \begin{pmatrix} x_1\\ \vdots\\ x_m\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} y_1 & \cdots & y_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1y_1 & \cdots & x_1y_n\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ x_my_1 & \cdots & x_my_n\end{pmatrix}$$

Aufteilen des Volumenintegrals in Integrale über Schalen konstanter Energie: $\mathrm{d}^3k = \mathrm{d}S_\varepsilon\mathrm{d}k_\perp = \mathrm{d}S_\varepsilon\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{|\nabla_\mathbf{k}\varepsilon|} = \mathrm{d}S_\varepsilon\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\hbar v(\mathbf{k})}$

$$\mathbf{J}_\mathrm{q} = \frac{q}{4\pi^3\hbar}\iint \mathrm{d}S_\varepsilon\mathrm{d}\varepsilon\,\frac{\tau(\mathbf{k})\,\mathbf{v}(\mathbf{k})\otimes\mathbf{v}(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\cdot q\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{q}{4\pi^3\hbar}\iint \mathrm{d}S_\varepsilon\mathrm{d}\varepsilon\,\frac{\tau(\mathbf{k})\,\mathbf{v}(\mathbf{k})\otimes\mathbf{v}(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\cdot\left[\frac{\xi(\mathbf{k})}{T}\boldsymbol{\nabla}_\mathbf{r}\delta T(\mathbf{r},t)\right]$$

da wegen $k_\mathrm{B}T \ll \varepsilon_\mathrm{F}$ die Temperaturverschmierung der Fermi-Verteilung sehr klein ist, können wir meist als sehr gute Näherung $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \simeq \delta(\varepsilon - \varepsilon_\mathrm{F})$ verwenden

➔ **es verbleibt nur Integral über die Fermi-Fläche $S_\varepsilon = S_\mathrm{F}$**

$$\mathbf{J}_\mathrm{q} = \frac{q}{4\pi^3} \int \tau(\mathbf{k}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \otimes \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)\, \mathrm{d}^3 k \quad \Rightarrow \quad \mathbf{J}_\mathrm{q} = \frac{q}{4\pi^3} \int\limits_{\varepsilon = \varepsilon_\mathrm{F}} dS_\mathrm{F} \frac{\tau(\mathbf{k})\, \mathbf{v}(\mathbf{k}) \otimes \mathbf{v}(\mathbf{k})}{\hbar v(\mathbf{k})} \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$$

mit $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t) = q\, \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \frac{\xi}{T} \boldsymbol{\nabla}_\mathbf{r} \delta T(\mathbf{r}, t)$ erhalten wir

$$\mathbf{J}_\mathrm{q} = \frac{q}{4\pi^3 \hbar} \int\limits_{\varepsilon = \varepsilon_\mathrm{F}} dS_\mathrm{F} \frac{\tau(\mathbf{k})\, \mathbf{v}(\mathbf{k}) \otimes \mathbf{v}(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})} \cdot q\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{q}{4\pi^3 \hbar} \int\limits_{\varepsilon = \varepsilon_\mathrm{F}} dS_\mathrm{F} \frac{\tau(\mathbf{k})\, \mathbf{v}(\mathbf{k}) \otimes \mathbf{v}(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})} \cdot \left[-\frac{\xi(\mathbf{k})}{T} \boldsymbol{\nabla}_\mathbf{r} \delta T(\mathbf{r}, t)\right]$$

➔ **elektrische Stromdichte wird sowohl durch elektrisches Feld und Temperaturgradienten getrieben**

➔ **Ladungstransport ist immer mit Wärmetransport verbunden und umgekehrt**

thermoelektrische Kopplung

- **Wärmestromdichte**

$$\mathbf{J}_\mathrm{h} = \frac{1}{4\pi^3\hbar}\int \xi(\mathbf{k})\, \nabla_\mathbf{k}\, \varepsilon(\mathbf{k})\, f(\mathbf{k})\, \mathrm{d}^3k = \frac{1}{4\pi^3}\int \xi(\mathbf{k})\, \mathbf{v}(\mathbf{k})\, f(\mathbf{k})\, \mathrm{d}^3k \qquad \text{mit } f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + g(\mathbf{k})$$

$$\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \boldsymbol{\mu_0}$$

$$\mathbf{J}_\mathrm{h} = \underbrace{\frac{1}{4\pi^3}\int \xi(\mathbf{k})\, \mathbf{v}(\mathbf{k})\, f_0(\mathbf{k})\, \mathrm{d}^3k}_{=0} + \frac{1}{4\pi^3}\int \xi(\mathbf{k})\, \mathbf{v}(\mathbf{k})\, g(\mathbf{k})\, \mathrm{d}^3k = \frac{1}{4\pi^3}\iint \xi(\mathbf{k})\, \mathbf{v}(\mathbf{k})\, g(\mathbf{k})\, \frac{\mathrm{d}S_\varepsilon}{\hbar v(\mathbf{k})}\mathrm{d}\varepsilon$$

mit $g(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = \tau(\mathbf{k})\,\varphi_k \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r},t) = \tau(\mathbf{k})\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r},t)$ und $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r},t) = q\,\mathbf{E}(\mathbf{r},t) - \frac{\xi}{T}\nabla_\mathbf{r}\delta T(\mathbf{r},t)$ erhalten wir

$$\mathbf{J}_\mathrm{h} = \frac{1}{4\pi^3\hbar}\iint \xi(\mathbf{k})\,\tau(\mathbf{k})\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)\frac{\mathbf{v}(\mathbf{k}) \otimes \mathbf{v}(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})} \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r},t)\ \mathrm{d}S_\varepsilon \mathrm{d}\varepsilon$$

$$\mathbf{J}_\mathrm{h} = \frac{1}{4\pi^3\hbar}\iint \mathrm{d}S_\varepsilon \mathrm{d}\varepsilon\, \frac{\xi(\mathbf{k})\tau(\mathbf{k})\,\mathbf{v}(\mathbf{k}) \otimes \mathbf{v}(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \cdot q\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{4\pi^3\hbar}\iint \mathrm{d}S_\varepsilon \mathrm{d}\varepsilon\, \frac{\xi(\mathbf{k})\tau(\mathbf{k})\,\mathbf{v}(\mathbf{k}) \otimes \mathbf{v}(\mathbf{k})}{v(\mathbf{k})}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \cdot \left[-\frac{\xi(\mathbf{k})}{T}\nabla_\mathbf{r}\delta T(\mathbf{r},t)\right]$$

➔ **Wärmestromdichte wird sowohl durch elektrisches Feld und Temperaturgradienten getrieben**

➔ **Wärmetransport ist immer mit Ladungstransport verbunden und umgekehrt**

Zusammenfassung: Teil 25, 09.02.2021/1

- *Ladungs- und Wärmetransport in Festkörpern*

$$\mathbf{J}_q = \frac{q}{4\pi^3}\int \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k})\, \mathrm{d}^3k \qquad \mathbf{J}_h = \frac{1}{4\pi^3}\int \xi(\mathbf{k})\, \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3k \qquad \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon, \qquad \xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$$

➔ außer Bandstruktur $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ wird Verteilungsfunktion $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ unter Wirkung äußerer Kräfte benötigt

- *Boltzmann-Transportgleichung* ➔ beschreibt die Änderung von $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ durch Wechselspiel von

(i) *antreibenden Kräften*
(ii) *Diffusion*
(iii) *relaxierenden Streuprozessen*

$$\frac{\partial f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{r}}\varepsilon(\mathbf{k},\mathbf{r},t) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left(\frac{\partial f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t}\right)_{\mathrm{Streu}}$$

Diffusion ***äußere Kräfte*** ***Streuprozesse***

komplizierte Integro-Differentialgleichung → Vereinfachung durch (i) *Linearisierung*
(ii) *Relaxationszeit-Näherung*

- *linearisierte Boltzmann-Transportgleichung*

➔ Abweichung $\delta f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) - f_0(\mathbf{k})$ von Gleichgewichtsverteilung $f_0(\mathbf{k})$ soll klein sein

für die Gradienten gilt, da $f_0, \varepsilon_0, \mu_0, T_0$ räumlich und zeitlich konstant sind:

$$\nabla_{\mathbf{r}} f = \nabla_{\mathbf{r}} \delta f \qquad \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial\, \delta f}{\partial t} \qquad \nabla_{\mathbf{k}} f \simeq \frac{\partial f}{\partial \epsilon}\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon = \frac{\partial f}{\partial \epsilon}\,\hbar\mathbf{v} \qquad \nabla_{\mathbf{r}}\varepsilon = \nabla_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon$$

$$\frac{\partial\, \delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) - \frac{\partial f}{\partial \epsilon}\nabla_r \delta\epsilon(\mathbf{r},t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \delta I_{\mathrm{Streu}}$$

$$\delta\varepsilon(\mathbf{r},t) = q\phi(\mathbf{r},t) - q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},t)$$

$$\mathbf{F} = -\nabla_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon(\mathbf{r},t) = q\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t)$$

Zusammenfassung: Teil 25, 09.02.2021/2

- ***Relaxationszeit-Näherung*** für komplizierten Streuterm

$$\left(\frac{\partial\, \delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial \mathrm{t}}\right)_{\text{Streu}} = -\frac{f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) - f_0^{\text{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\tau(\mathbf{k})} = -\frac{g(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\tau(\mathbf{k})}$$

$$g(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) - f_0^{\text{loc}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$$

➔ Beschreibung aller Streuprozesse durch eine k-abhängige Streuzeit $\tau(\mathbf{k})$

➔ Verwendung von Abweichung $g(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$ lokaler Gleichgewichtsverteilungsfunktion $f^{\text{loc}}[\varepsilon(\mathbf{k},\mathbf{r},t),\mu(\mathbf{r},t),T(\mathbf{r},t)]$

- ***linearisierte Boltzmann-Transportgleichung für $g(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$***

$$g(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = \tau(\mathbf{k})\varphi_k \mathbf{v}\cdot\left[q\,\mathbf{E}(\mathbf{r},\mathbf{t}) - \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\frac{\delta n(\mathbf{r},t)}{D(\mu)/V} - \frac{\xi}{T}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\delta T(\mathbf{r},t)\right]$$

verallgemeinerte Kraft: $\mathcal{A} = q\mathbf{E} - \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\frac{\delta n}{D(\mu)/V} - \frac{\xi}{T}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\delta T$

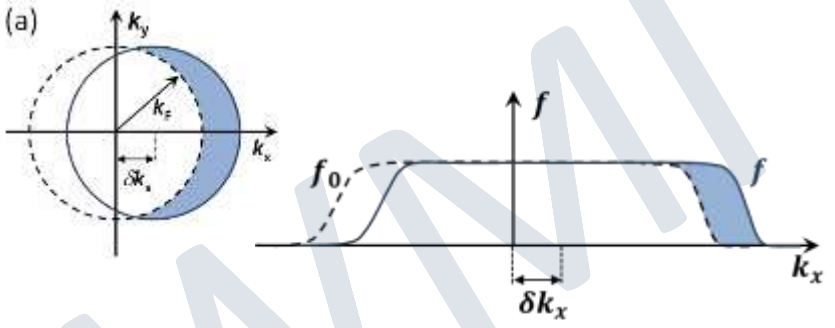
$$\varphi_k = \frac{1}{4k_\mathrm{B}T\cosh^2\frac{\xi}{2k_\mathrm{B}T}1} = -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$$

Beispiel: homogener Fall, keine Temperaturgradienten: $\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\delta n = 0,\ \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\delta T = 0$

$$g = -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\tau\mathbf{v}\cdot q\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} f\,\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial \varepsilon}\tau q\,\mathbf{v}\cdot\mathbf{E} = -\frac{\partial f}{\partial k}\frac{qE\tau}{\hbar}$$

da $f = f^{\text{loc}} + g = f^{\text{loc}} - \frac{\partial f}{\partial k}\frac{qE\tau}{\hbar} = f^{\text{loc}} - \frac{\partial f}{\partial k}\delta k$ ➔ $f = f^{\text{loc}}\left(k - \frac{qE\tau}{\hbar}\right) = f^{\text{loc}}(k-\delta k)$

$\Rightarrow$ f entspricht einer um δk verschobenen Gleichgewichtsverteilung



- ***allgemeine Transportgleichungen (B = 0, Relaxationszeitnäherung)***

➔ es wirkt Kraft aufgrund von elektrischem Potentialgradient (**E**-Feld) und Temperaturgradient (kein **B**-Feld)

➔ $$g(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = \tau(\mathbf{k})\varphi_k \mathbf{v}\cdot\left[q\,\mathbf{E}(\mathbf{r},\mathbf{t}) - \frac{\xi}{T}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\delta T(\mathbf{r},t)\right]$$

$$\mathbf{J}_q = \frac{1}{4\pi^3}\int e\mathbf{v}(\mathbf{k})g(\mathbf{k})d^3k \qquad \mathbf{J}_h = \frac{1}{4\pi^3}\int \xi(\mathbf{k})\mathbf{v}(\mathbf{k})g(\mathbf{k})d^3k$$

➔ Einsetzen in Ausdrücke für Stromdichten liefert elektrischen und Wärmestrom