Kristallelektronen im konst. Magnetfeld $\underline{B} = (0,0,B)$

$$\hat{\underline{B}} := \frac{\underline{B}}{|\underline{B}|}$$

(1) $\hbar \dot{\underline{k}} = -e\, \underline{v}_g(\underline{k}) \times \underline{B} \quad \Rightarrow \quad \dot{k}_{\parallel} := \dot{\underline{k}} \cdot \hat{\underline{B}} = 0 \quad \Rightarrow k_{\parallel} = \text{const.}$

(2) $\dot{\underline{r}} = \underline{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_n(\underline{k}) \quad \Rightarrow \quad \dot{E}_n = \nabla_k E_n \cdot \dot{\underline{k}} = -e\, \underline{v}_g \cdot (\underline{v}_g \times \underline{B}) = 0$

$$\Rightarrow E_n(\underline{k}) = \text{const}$$

$k_{\parallel}(t=0) = 0$

$\Rightarrow$ Elektronenbeweg. im $\underline{k}$-Raum entlang der Schnittkurve

(a) einer Ebene $\perp$ $\underline{B}$

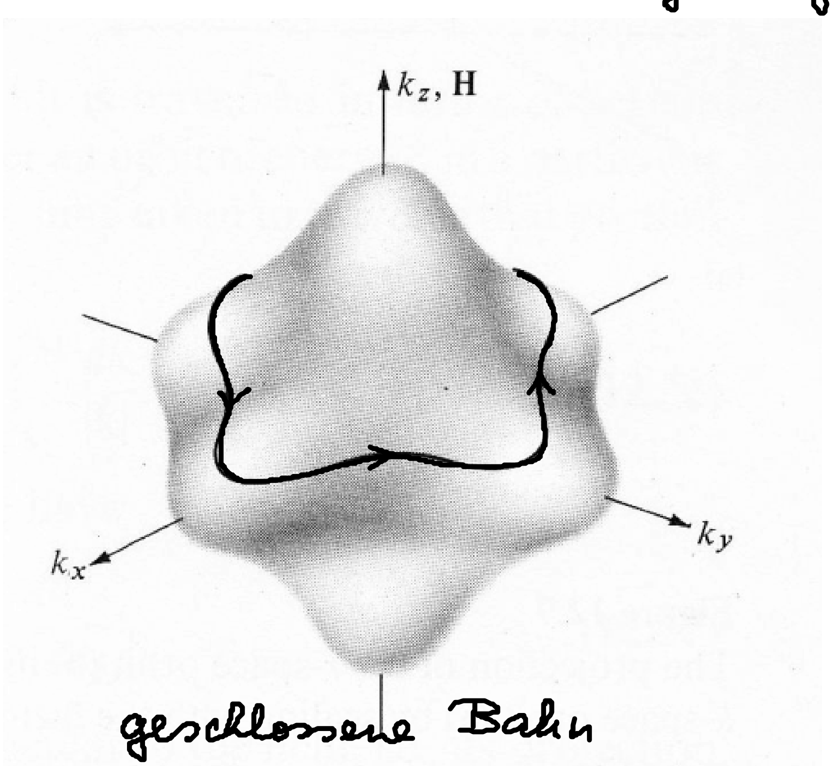
(b) der Energiefläche $E_n(\underline{k}) = \text{const.}$

<u>NB</u>: Nur für ein isotropes Band ergibt sich eine Kreisbahn (wie beim freien El.): $E_n(\underline{k}) \overset{\text{parab.}}{\sim} k^2 \Rightarrow$ Energiekugel

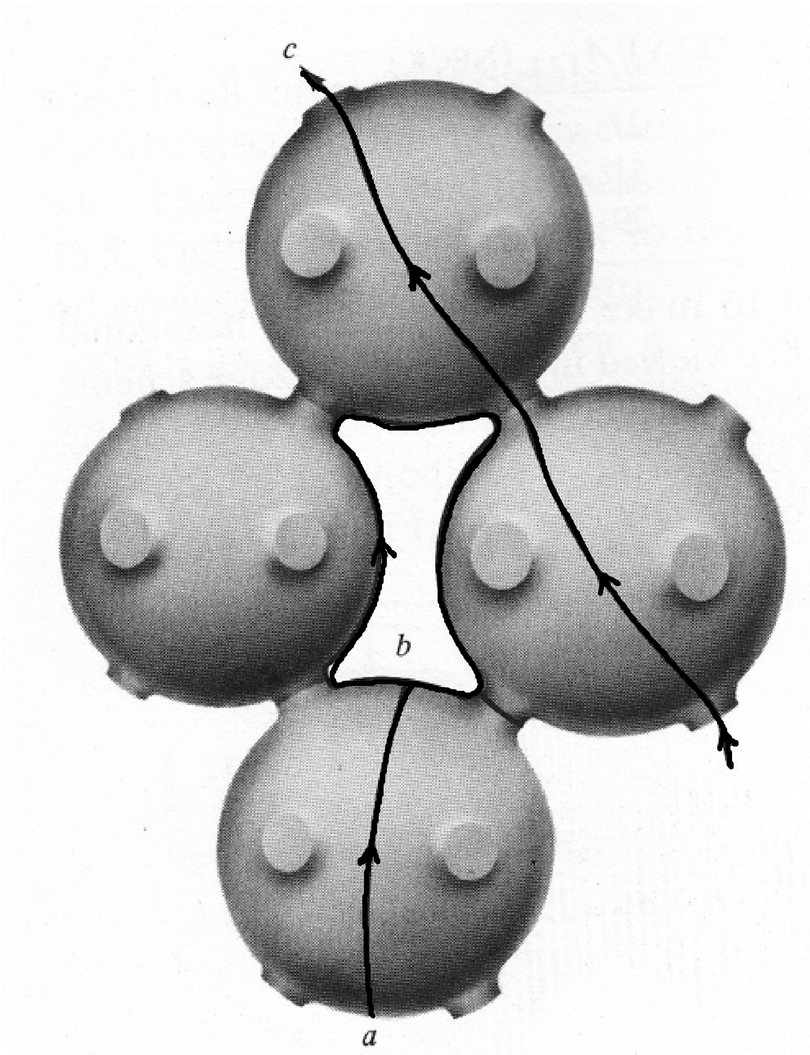
Es gibt <u>geschlossene</u> u. <u>offene</u> Bahnen!

Semiklass. Bahnen im homog. Magnetfeld (im $\underline{k}$-Raum)

(aus Ashcroft-Mermin)



geschlossene Bahn

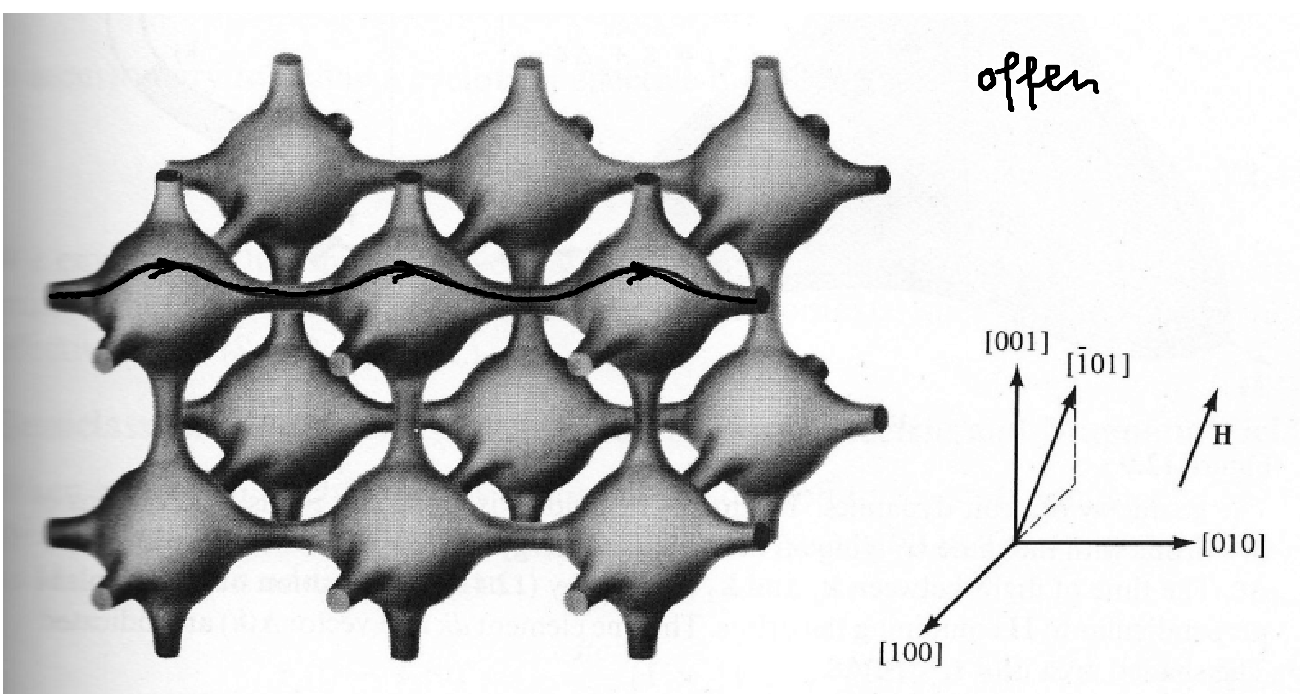


a) geschlossene El. bahn

b) geschlossene Lochbahn

c) offene Bahn

Edelmetall (Cu, Ag, Au)



offen

offene Bahn

Bahn im Ortsraum:

Proj. auf Ebene $\perp \underline{B}$: $\underline{r}_\perp := \underline{r} - \hat{\underline{B}}(\hat{\underline{B}}.\underline{r})$

$$(1) \underset{\text{bac-cab}}{\Rightarrow} \hat{\underline{B}} \times \hbar\dot{\underline{k}} = -eB(\dot{\underline{r}} - \hat{\underline{B}}(\hat{\underline{B}}.\dot{\underline{r}})) = -eB\dot{\underline{r}}_\perp .$$

integriert: $\underline{r}_\perp(t) - \underline{r}_\perp(0) = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\underline{B}} \times (\underline{k}(t) - \underline{k}(0))$

d.h. die Proj. der Bahn im Ortsraum $\perp \underline{B}$
= Bahn im $\underline{k}$-Raum um 90° um $\hat{\underline{B}}$-Achse gedreht.

6. Transporteigenschaften

Response der Kristallelektronen auf äußere el. oder magn. Felder oder Temp.gradienten:

- Beschleunigung
- Energie-, Impulsrelax. durch Stöße mit Phononen, Störstellen, Oberflächen, andere Ladungsträger

$\Big\}$ stationärer Transport von Ladung, Imp., Energie

$\Rightarrow$ außerhalb des thermodyn. Gleichgewichts:

NB: (i) Fern vom thermodyn. Gleichgewicht, wo nichtlin. dyn. Gln. gelten, können auch nichtstationäre Transportphänomene (el. Instab., spontane Oszillationen, Chaos, selbstorganisierte raum-zeitl. Strukturbildung) auftreten.

(ii) Transportprozesse sind dissipativ (irreversibel)

$\Rightarrow$ thermodyn.-statist. Beschreibung
(QM ist reversibel, reicht nicht aus)

6.1 Verteilungsfkt. der Elektronen

Statist. Beschreib. des Viel-El.-Systems durch klass. Verteilungsfkt. $f(\underline{r}, \underline{k}, t)$ im Phasenraum $\{(\underline{r}, \underline{k})\}$

Eigentlich: Wellenpaket aus Blochzuständen hat Unschärfe Δr, Δk $\quad (\Delta r \, \Delta k \geq \frac{1}{2})$

$\Rightarrow$ Gültigkeitsgrenzen der semiklass. Beschreibung, falls die Felder u. Temperaturgradienten auf Längen $L \sim \Delta r$ variieren.

(Nanostrukturen ; ultrakurze Dynamik)
nm ; fs

$\Longrightarrow$ Quantentransport, Quantenkinetik (VL WS 10/11)
Nichtgleichgew. Statistik

Wahrscheinlichkeitsverteilung:

$f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, z\, d^3r\, d^3k$ = Anzahl der El. in Vol. d^3r bei $\underline{r}$ mit Blochvekt. in d^3k bei $\underline{k}$

$z\, d^3k = \frac{2}{(2\pi)^3} d^3k$ Zustandsdichte der El. im $\underline{k}$-Raum (mit Spin) = Zahl der Zust. pro Grundvol.

f Besetzungswahrsch.

Verteilung im thermodyn. Gleichgewicht

großkanonische Verteilung: System im thermischen Gleichgew. (d.h. Energieaustausch mit Wärmebad der Temp. T) und im chem. Gleichgew. (d.h. Teilchenaustausch mit Reservoir des chem. Pot. μ_0) sowie festes Vol. V

Prinzip der vorurteilsfreien Schätzung (Jaynes):

Entropie $S = -kI = -k \langle \ln \hat{\varrho} \rangle$ maximal unter den Nebenbed.

$\sum_n p_n = 1$ (Normierung) $\quad p_n = \langle n|\hat{\varrho}|n\rangle$

$\langle H\rangle = Sp(\hat{\varrho} H) = U$ (innere Energie)

$\langle \hat{N}\rangle = Sp(\hat{\varrho}\hat{N}) = N$ (mittlere Elektronenzahl)

$\hat{\varrho}$ statist. Op., $\hat{N}$ Teilchenzahlop.

Die Variation liefert die großkanon. Verteilung (= Wahrscheinl., das System in einem Mikrozustand n zu finden, $n \equiv (N_n, E_n^{ges})$)

$$\boxed{p_n = \Xi^{-1} \exp\left(\frac{-E_n^{ges} + \mu_0 N_n}{kT}\right)}$$

N_n mikr. El. zahl
E_n^{ges} mikr. N_n-Teilchen-Energie

mit der großkanon. Zustandssumme

$$\Xi = \sum_n \exp\left(\frac{-E_n^{ges} + \mu_0 N_n}{kT}\right)$$

$\left.\begin{array}{l}\beta = \frac{1}{kT} \\ \alpha = -\frac{\mu_0}{kT}\end{array}\right\}$ Lagrange-par. zu $\langle H\rangle, \langle\hat{N}\rangle$

In der phänomenolog. Thermodynamik:

gibbs'sche Fundamentalgl.

$$dU = TdS - pdV + \mu_0 dN \Rightarrow U = TS - pV + \mu_0 N$$

Legendre-Transf. von $U(S, V, N)$ bzgl. S und V liefert die Gibbs'sche freie Energie

$$G(T, p, N) = U - TS + pV = \mu_0 N$$

Vergleich mit der statistischen Entropie

$$S = -kI = -k\sum_n p_n \ln p_n$$

$$= k\ln\Xi + \frac{1}{T}U - \frac{\mu_0}{T}N$$

ergibt

$$\boxed{pV = kT\ln\Xi}$$

Zus.hang zwischen phänomenolog. Thermodyn. u. Statistik

Für ein Ensemble geladener Teilchen muss die Gibbs'sche Fundamentalgl. erweitert werden durch Addition der el. stat. Energie $-e\phi\, dN$, wo $\phi(\underline{r})$ el. stat. Pot.:

$$\boxed{dU = TdS - pdV + \mu dN}$$

mit dem el. chem. Pot. (Fermi-Niveau) $\mu := \mu_0 - e\phi \equiv E_F$

großkanon. Verteil. $p_n = \Xi^{-1} \exp\left(\frac{-E_n^{ges} + \mu N_n}{kT}\right)$

WW-freie El.: $E_n^{ges} = \sum_{j=1}^{\ell} \epsilon_j n_j$

ϵ_j = Einteilchenenergie
n_j = Besetzungszahl
j = {Satz der Quantenzahlen des 1-Teilchen-Zust.}

$\Longrightarrow$ mittlere Besetzungszahl im 1-Teilchenzust. E_k eines Bandes

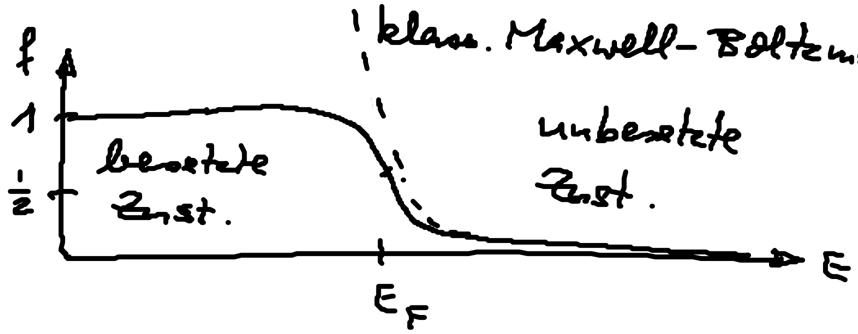
$f(\underline{k}) =$ mit $E(\underline{k})$ Bandstruktur

$$\boxed{f(E; T, E_F) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(E - E_F)}{kT}\right]}}$$

Fermi-Dirac-Verteilung

klass. Maxwell-Boltzmann-Verteil. $(E - E_F \gg kT)$

$f \approx \exp\left[-\frac{(E - E_F)}{kT}\right]$



Im globalen thermodyn. Gleichgewicht: T, p, E_F ortsunabh.