

# Abweichungen vom globalen thermodyn. Gleichgewicht

(einheitl. ortsunabhängiges  $T, E_F, \mu$ )

(a) lokales thermodyn. Gleichgewicht :

lokale Fermi-Verteilung  $f(E, \underline{r})$

mit  $T(\underline{r})$  ortsabh.  $\Rightarrow$  Wärmestrom

$E_F(\underline{r})$  ortsabh.  $\Rightarrow$  Teilchenstrom

(b) quasi-thermisches Verteilung mit „effektiver“ Elektronen-  
temperatur  $T_e \neq T_L$  (Gittertemp., = lattice)

Voraussetzung : rascher Energieaustausch der Ladungsträger  
untereinander ( $\Rightarrow$  einheitl. „Temp.“ der Elektronen),  
langsamer Energieaustausch mit dem Gitter (Phononen)

$T_e$  ist definiert durch die „Breite“ der Verteilung

$$f(E, T_e, E_F) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E - E_F}{kT_e}\right]}$$

z.B. bei Aufheizung der Elektronen durch el. Feld  
oder hochenerget. Einstrahlung  
(hohe kinet. Energie  $\rightarrow$  „heiße“ Elektronen)

analog : Lochtemp.  $T_h$

(c) Quasi-Fermi-Verteilung mit

Quasi-Fermi-Niveau der El.  $E_{Fn}$  oder der Löcher  $E_{Fp}$   
 $E_{Fn} \neq E_{Fp}$

Es ex. kein gemeinsames Fermi-Niveau  $E_F$  für alle  
gruppen von Energiezuständen (Leitungsband,  
Valenzband, Störstellen), wohl aber für das  
Leitungsband- und das Valenzbandensemble getrennt.

Vor.: Ladungsträger jeder Ensembles sind durch Stöße  
untereinander im Gleichgewicht, aber es hat  
sich noch kein chem. Gleichgewicht zwischen  
den Ensembles durch Teilchenaustausch  
(Rekombination) eingestellt.

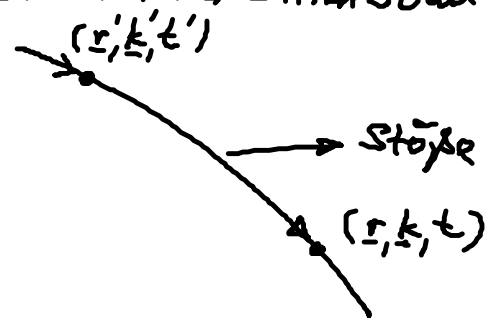
(d) Bei starker Störung des Gleichgewichts kann  
die Verteilungsfkt. nicht mehr durch eine  
verallgemeinerte Fermi-Verteilung parametrisiert  
werden, sondern muss aus einer dynamischen  
Transportgleichung bestimmt werden  
→ Boltzmann-Gl.

## 6.2 Boltzmann-Gleichung

$f(r, k, t)$  durch dyn. Transportgl. im Nichtgleichgewicht  
festgelegt:

- äußere Felder
- Stöße der Elektronen untereinander,  
mit Phononen u. Störstellen

Zahl der El.  $f(\underline{r}, \underline{k}, t) d^3r d^3k$  ändert sich im Zeitintervall  $dt$  durch.



(i) Ortsänderung

(Bewegung  $\underline{r}' = \underline{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\underline{k}} E(\underline{k})$ )

$t' = t - dt \rightarrow t$

$\underline{r}' = \underline{r} - \underline{v}_g dt \rightarrow \underline{r}$

El. am Ort  $\underline{r}'$  erreichen  $\underline{r}$  innerhalb  $dt$  u. ersetzen die ursprüngl. Elektronen, die dann  $\underline{r}$  verlassen haben.

(ii) Quasimpulsänderung: Beschleunigung durch el. u. magn. Feld

$t' = t - dt \rightarrow t$

$\underline{v}'_g = \underline{v}_g - \dot{\underline{v}}_g dt \rightarrow \underline{v}_g$

bzw.  $\underline{k}' = \underline{k} - \dot{\underline{k}} dt \rightarrow \underline{k}$

$\hbar \dot{\underline{k}} = -e(\underline{E} + \underline{v}_g \times \underline{B})$

(iii) Stöße (Streuprozesse)

Damit:

$f(\underline{r}, \underline{k}, t) = f(\underline{r}', \underline{k}', t') + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} dt$

$= f(\underline{r} - \underline{v}_g dt, \underline{k} - \dot{\underline{k}} dt, t - dt) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} dt$

Taylorentw.

$= f(\underline{r}, \underline{k}, t) - [\underline{v}_g \nabla_{\underline{r}} f(\underline{r}, \underline{k}, t) + \dot{\underline{k}} \nabla_{\underline{k}} f(\underline{r}, \underline{k}, t) + \frac{\partial f}{\partial t}] dt$

$+ \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} dt$

$\Rightarrow \underbrace{\frac{\partial f(\underline{r}, \underline{k}, t)}{\partial t} + \underline{v}_g \nabla_{\underline{r}} f(\underline{r}, \underline{k}, t) + \dot{\underline{k}} \nabla_{\underline{k}} f(\underline{r}, \underline{k}, t)}_{\text{substanzielle Ableitung}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}}$

$\frac{d}{dt} f(\underline{r}, \underline{k}, t)$       substanzielle Ableitung

$$\frac{\partial f(r, k, t)}{\partial t} + \underbrace{\left( \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) \right)}_{v_g} \nabla_r f - \frac{e}{\hbar} (\underline{E} + \underline{v}_g \times \underline{B}) \nabla_k f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stoß}}$$

Boltzmann-Transportgl.

enthält: Bandstruktur  
Streuemechanismen } 1-El.-Näherung

„Semiklass.“ Transportgleichung (kinetisch)

El. werden als klass. individuelle Teilchen behandelt, aber die Übergangswahrsch. für Streuprozesse und die Bandstruktur werden quantenmech. berechnet.

Näherungsannahmen der Boltzmann gl.

- (i) WW und Korrelationen der Teilchen klein  
→ Ein-Elektronen-Näherung
- (ii) Verteilungsfkt. ändert sich nur auf einer Längenskala  $\gg$  Ausdehnung des qu. Wellenpakets (DeBroglie-Wellenlänge der El.) → klass. Verteil.fkt.
- (iii) Schwache WW mit Störzentren u. Phononen  
→ störungstheoret. Behandlung der Stöße
- (iv) Zeit zwischen 2 Stöße ist groß gegen die Dauer eines Stoßes → punktförmige Stöße
- (v) Dichte der Ladungsträger niedrig → nur Zweierstöße (binäre)
- (vi) Räumliche u. zeitl. Änderung der angelegten Felder klein auf der Skala der mittleren freien Weglänge und der mittleren Stoßzeit.

# Stoßterm der Boltzmanngl.

## (1) Elektron-Phonon-Stöße

sei  $W(\underline{k}, \underline{k}')$  die Wahrsch. pro Zeiteinheit, dass ein El. mit Blochvektor  $\underline{k}$  in einen Zustand  $\underline{k}'$  (im selben Band) gestreut wird.

=> Änderung der Besetzungswahrsch. pro Zeiteinheit durch Elektronen, die  $\underline{k}$  verlassen (out-scattering);

$$\left( \frac{\partial f(\underline{r}, \underline{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{out}} = - \sum_{\underline{k}'} W(\underline{k}, \underline{k}') f(\underline{r}, \underline{k}, t) [1 - f(\underline{r}, \underline{k}', t)]$$

und durch El., die aus allen anderen Zuständen in  $\underline{k}$  ankommen (in-scattering):

$$\left( \frac{\partial f(\underline{r}, \underline{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{in}} = \sum_{\underline{k}'} W(\underline{k}', \underline{k}) f(\underline{r}, \underline{k}', t) [1 - f(\underline{r}, \underline{k}, t)]$$

Hierbei ist die Übergangswahrsch. pro Zeit  $\underline{k} \rightarrow \underline{k}'$

$$W(\underline{k}, \underline{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\underline{k}'\underline{k}}|^2 \left[ N(\underline{k}' - \underline{k}) \delta(E(\underline{k}') - E(\underline{k}) - \hbar\omega(\underline{k}' - \underline{k})) \right]$$

Absorpt.  $\nearrow$

$$+ (N(\underline{k} - \underline{k}') + 1) \delta(E(\underline{k}') - E(\underline{k}) + \hbar\omega(\underline{k}' - \underline{k}))$$

induz. spont. Emission  $\downarrow \nearrow$

durch die goldene Regel der zeitabh. qu. Störungstheorie mit dem Matrixel.  $M_{\underline{k}'\underline{k}}$  gegeben.

$N(\underline{q})$  ist die Verteilungsfkt. der Phononen mit Wellenvektor  $\underline{q}$  und Energie  $\hbar\omega(\underline{q})$ .  
(mittlere Besetzungszahl)

$$\text{Gesamter Stoßterm: } \sum_{\underline{k}'} \rightarrow \int z d^3k' = \frac{V_{\underline{q}}}{(2\pi)^3} \int d^3k'$$

(ohne Spin-flip bei Streuung)  
- daher kein Faktor 2!

$$\frac{\partial f(r, k, t)}{\partial t} + \underline{v}_g(k) \nabla_r f - \frac{e}{\hbar} (\underline{E} + \underline{v}_g \times \underline{B}) \nabla_k f$$

$$= - \frac{V_g}{(2\pi)^3} \int d^3 k' \left\{ W(k, k') f(r, k, t) [1 - f(r, k', t)] - W(k', k) f(r, k', t) [1 - f(r, k, t)] \right\}$$

Boltzmann gl. (nichtlin. Integro-Dgl.)