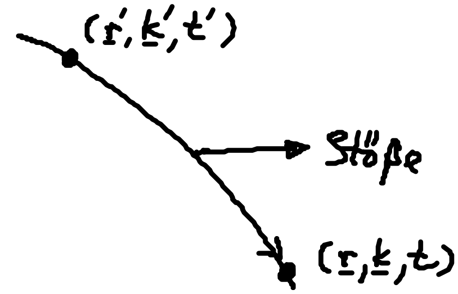
5.2 Boltzmann-Gleichung mit Ortsabhängigkeit (kinet. Gl.)

Semiklass. Transportgl.

- klass. Verteilungsfkt. $f(\underline{x}, \underline{k}, t)$
- qm. Streuprozesse
- qm. Energiebandstruktur

- Die Zahl der Elektronen $f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, d^3r\, d^3k$ im Phasenraumvolumen $d^3r\, d^3k$ ändert sich im Zeitintervall dt durch



(i) Ortsänderung

Bewegung $\dot{\underline{r}} = \underline{v}_g$ Gruppengeschw.

$$t' = t - dt$$
$$\underline{r}' = \underline{r} - \dot{\underline{r}}\, dt$$

Elektronen am Ort $\underline{r}'$ erreichen $\underline{r}$ nach dt und ersetzen die ursprünglichen Elektronen dort

(ii) Quasiimpulsänderung (Beschleunigung durch el. Feld)

$$\underline{k}' = \underline{k} - \dot{\underline{k}}\, dt \qquad \hbar \dot{\underline{k}} = -e\underline{E}$$

(iii) Stöße (Streuprozesse)

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

Taylorentwickl. bis $O(dt)$

$$= f(\underline{r}, \underline{k}, t) - \left[\dot{\underline{r}} \cdot \underline{\nabla}_r f(\underline{r}, \underline{k}, t) + \dot{\underline{k}} \cdot \underline{\nabla}_k f(\underline{r}, \underline{k}, t) + \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{\underline{r}, \underline{k}, t}\right] dt + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} dt$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\underline{r}} \cdot \underline{\nabla}_r f + \dot{\underline{k}} \cdot \underline{\nabla}_k f \equiv \frac{d}{dt} f(\underline{r}, \underline{k}, t)$$

Ableitung im mitbewegten Koord.system
(„substanzielle Ableitung")

$$\boxed{\frac{\partial f(\underline{r},\underline{k},t)}{\partial t} + \underline{v}_g \cdot \underline{\nabla}_r f + \frac{-e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar} \underline{\nabla}_k f(\underline{r},\underline{k},t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß}}$$

$$\underline{v}_g(\underline{k}) := \frac{1}{\hbar} \underline{\nabla}_k E(\underline{k})$$

Bandstruktur

<u>Boltzmann-Gleichung</u> – enthält Bandstruktur
– Streumechanismen

"semiklass." Transportgleichung

<u>Stoßterm</u> : Sei $W(\underline{k},\underline{k}')$ die Wahrscheinlichkeit pro Zeit, dass Elektron von $\underline{k} \to \underline{k}'$ gestreut wird

z.B. Elektron-Phonon-Stöße (goldene Regel, qm. Störungstheorie 1. Ordnung)

$$W(\underline{k},\underline{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\underline{k}'\underline{k}}|^2 \Big[\bar{n}(\underline{k}'-\underline{k})\, \delta(E(\underline{k}') - E(\underline{k}) - \hbar\omega(\underline{k}'-\underline{k}))$$

Abs. therm. Phononenvert. $\bar{n}(q)$

$$+ (\bar{n}(\underline{k}-\underline{k}') + 1)\, \delta(E(\underline{k}') - E(\underline{k}) + \hbar\omega(\underline{k}'-\underline{k})) \Big]$$

induz. + spont. Em.

out-scattering:

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

in-scattering:

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

occupation factor

Quantenmechanisch ist W für beide Richtungen gleich (mikroskop. Reversibilität)

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} = -\sum_{\underline{k}'} W(\underline{k},\underline{k}')\, f(\underline{k})(1 - f(\underline{k}')) + \sum_{\underline{k}'} W(\underline{k},\underline{k}')\, f(\underline{k}')(1 - f(\underline{k}))$$

Ersetzen der Summe $\sum_{\underline{k}'}$ durch Integration $\underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3}}_{\substack{\text{Zustandsdichte} \\ \text{(V Grundvolumen)}}}\int d^3k'$

Nichtlineare Integro-Differentialgl. für Elektronenverteilung:

$$\boxed{\begin{aligned}&\frac{\partial f(\underline{r},\underline{k},t)}{\partial t} + \underline{v}_g(\underline{k})\cdot\underline{\nabla}_r f(\underline{r},\underline{k},t) + \frac{-e\underline{E}}{\hbar}\cdot\underline{\nabla}_k f(\underline{r},\underline{k},t) \\ &= -\frac{V}{(2\pi)^3}\int\Big\{W(\underline{k},\underline{k}')f(\underline{r},\underline{k},t)\big(1-f(\underline{r},\underline{k}',t)\big) - W(\underline{k}',\underline{k})f(\underline{r},\underline{k}',t)\big(1-f(\underline{r},\underline{k},t)\big)\Big\}d^3k'\end{aligned}}$$

Näherungsannahmen in Boltzmanngl.:

(i) Wechselwirkung und Korrelationen der Teilchen sind klein

→ Ein-Elektronen-Näherung

(ii) Verteilungsfkt. ändert sich nur auf Längenskalen ≫ Ausdehnung der qm. Wellenpakete (DeBroglie-Wellenlänge der El.)

→ klass. Verteilungsfkt.

(iii) Die Zeit zwischen 2 Stößen ist groß gegen die Dauer eines Stoßes

→ punktförmige Stöße

(iv) Dichte der Ladungsträger niedrig

→ nur Zweierstöße (Binary)

(v) Räumliche und zeitliche Änderung der angelegten Felder $\underline{E}$ klein bezogen auf Stoßlänge (mittlere freie Weglänge) und Stoßzeit

5.3 Momentenentwicklung der Boltzmanngl.

Ziel:
- Hydrodynamische Bilanzgln. (Dichte)
- Beschreibung der Elektronen im Festkörper durch kleine Zahl langsam variierender Größen

Startpunkt: kinet. Boltzmanngl.
- beschreibt detailliert k-abhängige Stoßprozesse

Momente der Verteilungsfkt.

$$\langle \underline{k}^m \rangle := \int \prod_{i=1}^{3} k_i^{m_i} \, \frac{f(\underline{r},\underline{k},t)}{n} \, \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3}}_{z} d^3k \qquad n \equiv \frac{N}{V}$$

Physikal. Bedeutung:

Teilchendichte $\quad n(\underline{r},t) = \int f(\underline{r},\underline{k},t)\, z\, d^3k$

Impulsdichte $\quad \underline{g}(\underline{r},t) = \int \hbar \underline{k}\, f(\underline{r},\underline{k},t)\, z\, d^3k$

Energiedichte $\quad u(\underline{r},t) = \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} f(\underline{r},\underline{k},t)\, z\, d^3k$

Energiestromdichte $\quad \underline{w}(\underline{r},t) = \int E(\underline{k})\, \underline{v}_g(\underline{k})\, f(\underline{r},\underline{k},t)\, z\, d^3k$

$$= \frac{\hbar^3}{2(m^*)^2} \int \underline{k}^3 f(\underline{r},\underline{k},t)\, z\, d^3k$$

- ohne el. Feld
  ohne Streuprozesse $\longrightarrow$ Teilchenzahl, Energie u. Impuls sind Erhaltungsgrößen

  $\longrightarrow$ die entsprechenden Dichten $\varrho(\underline{r},t)$ und die zugehörigen Stromdichten $j_\varrho(\underline{r},t)$ gehorchen makr. Kontinuitätsglg.

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho + \nabla_r j_\varrho = 0$$

- Formal enthält die Menge aller Momente dieselbe Information wie Verteilungsfkt. selbst:

Fouriertrafo: $\quad f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ikx} \hat{f}(x)\, dx$

(für 1D)

Rücktrafo:

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ikx} f(k)\, dk \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \langle e^{ikx} \rangle$$

Momentenerzeugende

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} x^m \langle k^m \rangle$$

$$\Rightarrow f(k) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \langle k^m \rangle \int e^{-ikx} x^m\, dx$$

Die Bilanzgln. für die Momente lassen sich aus der Boltzmanngl.

$$\frac{\partial f(\underline{r},\underline{k},t)}{\partial t} + \underline{v}_g(\underline{k}) \cdot \underline{\nabla}_r f(\underline{r},\underline{k},t) - \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \underline{\nabla}_k f(\underline{r},\underline{k},t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß}$$

gewinnen durch Multiplikation mit $\phi(\underline{k}) := \underline{k}^m$ und Integration über $z\,d^3k$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi \rangle_n + \underline{\nabla}_r \langle \phi\, \underline{v}_g \rangle_n + \underbrace{\frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \langle \underline{\nabla}_k \phi(\underline{k}) \rangle_n}_{1} = \underbrace{\int \phi(\underline{k}) \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k}_{J(\phi)}$$

mit $\langle \phi \rangle_n := \int \phi(\underline{k}) f(\underline{r},\underline{k},t)\, z\, d^3k = \rho(\underline{r},t)$

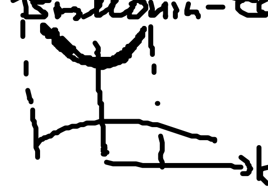
Teilchen-, Impuls-, Energiedichte

Mittelung mit auf n normierter Verteilungsfkt.

$(\langle 1 \rangle_n = \int f\, z\, d^3k = n(\underline{r},t))$

1 $\quad \int \phi (\underline{\nabla}_k f)\, z\, d^3k \underset{\text{part. Int.}}{=} - \int (\underline{\nabla}_k \phi) f\, z\, d^3k + \underbrace{\int \underline{\nabla}_k (\phi f)\, z\, d^3k}_{0}$

(Annahme: f verschwindet auf der Oberfläche der 1. Brillouin-Zone)



Die Momentengl. für das m-te Moment $\langle k_i^m \rangle_h$ koppelt wegen

$$\langle \underbrace{\phi}_{k^m} \underbrace{v_{g,i}}_{\frac{\hbar k_i}{m^*}} \rangle_h = \frac{\hbar}{m^*} \langle \phi(k) k_i \rangle_h = \frac{\hbar}{m^*} \langle k_i^{m+1} \rangle$$

und $\langle \frac{\partial}{\partial k_i} \phi \rangle_h = m \langle k_i^{m-1} \rangle_h$

an die Gleichungen für $\langle k_i^{m+1} \rangle_h$ und $\langle k_i^{m-1} \rangle_h$

$\Rightarrow$ unendliche gekoppelte <u>Hierarchie</u> von Gln.