Abweichungen vom globalen thermodyn. Gleichgewicht

(einheitl. ortsunabhängiges T, E_F, p)

(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" Elektronentemperatur $T_e \neq T_L$ (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_{F_n} oder der Löcher E_{F_p}
$E_{F_n} \neq E_{F_p}$.
Es ex. kein gemeinsames Ferminiveau E_F für alle
Gruppen von Energiezuständen (Leitungsband, Valenzband, Störstellen), wohl aber für das Leitungsband- und das Valenzbandensemble getrennt.

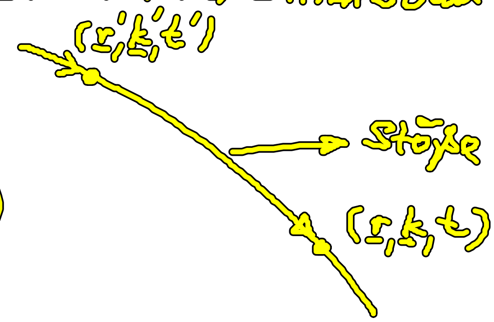
Vor.: Ladungsträger jedes Ensembles sind durch Stöße untereinander im Gleichgewicht, aber es hat sich noch kein chem. Gleichgewicht zwischen den Ensembles durch Teilchenaustausch (Rekombination) eingestellt.

(d) Bei starker Störung des Gleichgewichts kann die Verteilungsfkt. nicht mehr durch eine verallgemeinerte Fermiverteilung parametrisiert werden, sondern muss aus einer dynamischen Transportgleichung bestimmt werden
⟶ Boltzmanngl.

6.2 Boltzmanngleichung

$f(\underline{r}, \underline{k}, t)$ 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) <u>Ortsänderung</u>

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

$t' = t - dt \longrightarrow t$

$\underline{r}' = \underline{r} - \dot{\underline{r}}\,dt \longrightarrow \underline{r}$

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

(ii) <u>Quasiimpulsänderung</u>: Beschleunigung durch el. u. magn. Feld

$t' = t - dt \longrightarrow t$

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

bzw. $\underline{k}' = \underline{k} - \dot{\underline{k}}\,dt \rightarrow \underline{k}$ $\qquad \hbar\dot{\underline{k}} = -e(\underline{\mathcal{E}} + \underline{v}_g \times \underline{B})$

(iii) <u>Stöße</u> (Streuprozesse)

Damit:

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

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

Taylorentw.

$$= f(\underline{r},\underline{k},t) - \left[\dot{\underline{r}}\,\nabla_r f(\underline{r},\underline{k},t) + \dot{\underline{k}}\,\nabla_k f(\underline{r},\underline{k},t) + \frac{\partial f}{\partial t}\right] dt + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} dt$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\partial f(\underline{r},\underline{k},t)}{\partial t} + \dot{\underline{r}}\,\nabla_r f(\underline{r},\underline{k},t) + \dot{\underline{k}}\,\nabla_k f(\underline{r},\underline{k},t)}_{\frac{d}{dt} f(\underline{r},\underline{k},t)} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß}$$

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

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

Boltzmann-Transportgl.

enthält : Bandstruktur, Streumechanismen $\Big\}$ 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 Boltzmanngl.

(i) WW und Korrelationen der Teilchen klein
$\longrightarrow$ Ein-Elektronen-Näherung

(ii) Verteilungsfkt. ändert sich nur auf einer Längenskala $\gg$ Ausdehnung des qm. Wellenpakets (DeBroglie-Wellenlänge der El.) $\longrightarrow$ klass. Verteil.fkt.

(iii) Schwache WW mit Streuzentren u. Phononen
$\longrightarrow$ störungstheoret. Behandlung der Stöße

(iv) Zeit zwischen 2 Stöße ist groß gegen die Dauer eines Stoßes $\longrightarrow$ punktförmige Stöße

(v) Dichte der Ladungsträger niedrig $\longrightarrow$ 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 Wahrscheinl. pro Zeiteinheit, dass ein El. mit Blochvektor $\underline{k}$ in einen Zustand $\underline{k}'$ (im selben Band) gestreut wird.

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

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

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

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

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

$$W(\underline{k},\underline{k}') = \frac{2\pi}{\hbar}\,|M_{\underline{k}'\underline{k}}|^2 \Big[\underbrace{N(\underline{k}'-\underline{k})\,\delta\big(E(\underline{k}')-E(\underline{k})-\hbar\omega(\underline{k}'-\underline{k})\big)}_{\text{Absorpt.}}$$

$$+\underbrace{\big(N(\underline{k}-\underline{k}')+1\big)}_{\text{induz. spont. Emission}}\delta\big(E(\underline{k}')-E(\underline{k})+\hbar\omega(\underline{k}'-\underline{k})\big)\Big]$$

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

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

Gesamter Stoßterm: $\sum_{\underline{k}'} \to \int z\, d^3k' = \frac{V_g}{(2\pi)^3}\int d^3k'$

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

$$\boxed{\frac{\partial f(\underline{r},\underline{k},t)}{\partial t} + \underline{v}_g(\underline{k})\,\underline{\nabla}_r f - \frac{e}{\hbar}\left(\underline{E} + \underline{v}_g \times \underline{B}\right)\underline{\nabla}_k f = -\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k' \left\{ W(\underline{k},\underline{k}')\, f(\underline{r},\underline{k},t)\left[1 - f(\underline{r},\underline{k}',t)\right] - W(\underline{k}',\underline{k})\, f(\underline{r},\underline{k}',t)\left[1 - f(\underline{r},\underline{k},t)\right] \right\}}$$

<u>Boltzmanngl.</u> (nichtlin. Integro-Dgl.)