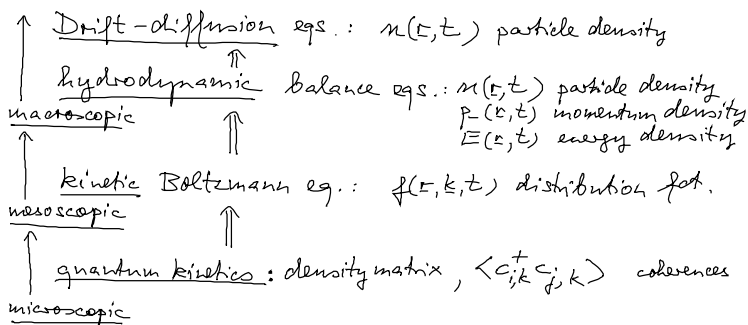


English Summary:

Hierarchy of transport equations



5.2 Boltzmann-gl. mit Ortsabhängigkeit (kinet. gl.)

- Semiklass. Transportgl.
- klass. Verteilungsfkt. $f(r, k, t)$
 - qu. Streuprozesse
 - qu. Energiebandstruktur

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

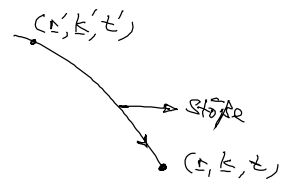
(i) Ortsänderung

Bewegung $\dot{r} = v_g$ Gruppengeschw.

$$t' = t - dt$$

$$r' = r - \dot{r} dt$$

Elektronen am Ort r' erreichen r nach dt und ersetzen die ursprünglichen Elektronen dort.



(ii) Quasiimpulsänderung (Beschleunigung durch el. Feld)

$$k' = k - \dot{k} dt$$

$$\hbar \dot{k} = -e \underline{E}$$

(iii) Stöße (Streuprozesse)

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

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

Taylorentwicklung bis $O(dt)$

$$= f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \left[\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \dot{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\mathbf{r}, \mathbf{k}, t} \right] dt + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Sto\ss}} dt$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \dot{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f \equiv \frac{d}{dt} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

Ableitung in mitbewegtem Koord. System
(„substantielle Ableitung“)

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} + \frac{v}{g} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{-e\mathbf{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Sto\ss}}$$

Boltzmann-Gleichung

- enthält Bandstruktur
- Streumechanismen

„semiklass.“ Transportgleichung

$$v_g(\mathbf{k}) := \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

Bandstruktur

Sto\ssterm: Sei $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ die Wahrscheinlichkeit pro Zeit, dass Elektron von $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ gestreut wird

z.B. Elektron-Phonon-Sto\ss (Goldene Regel, qu. Störungstheorie 1. Ordnung)

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}|^2 \left[\bar{n}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}) - \hbar\omega(\mathbf{k}' - \mathbf{k})) \right. \\ \left. + (\bar{n}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 1) \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}) + \hbar\omega(\mathbf{k}' - \mathbf{k})) \right]$$

Abs. \nearrow therm. Phononenverteil. $\bar{n}(q)$
induz. + spont. Em. $\downarrow \nearrow$

out-scattering (Ausstreuen):

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

Besetzungsfaktor

in-scattering (Einströmen):

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

Besetzungsfaktor

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

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Sto\ss}} = - \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}) (1 - f(\mathbf{k}')) + \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}') (1 - f(\mathbf{k}))$$

Ersetzen der Summe $\sum_{\mathbf{k}'}$ durch $\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k'$
Zustandsdichte
(V Grundvolumen)

Nichtlineare Integral-Differentialgl. für Elektronenverteilung:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} + v_g(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{-e\mathbf{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \\ = - \frac{V}{(2\pi)^3} \int \{ W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) (1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t)) - W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) (1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)) \} d^3k'$$

Näherungsannahmen in Boltzmann-Gl.:

- (i) Wechselwirkung und Korrelation der Teilchen sind klein \rightarrow Ein-Elektronen-Näherung
- (ii) Verteilungsfkt. ändert sich nur auf Längenskalen \gg Ausdehnung der qu. Wellenpakete (de Broglie-Wellenlänge der E), \rightarrow klass. Verteilungsfkt.
- (iii) Die Zeit zwischen 2 Stößen ist groß gegen die Dauer eines Stoßes \rightarrow punktförmige Stöße
- (iv) Dichte der Ladungsträger niedrig \rightarrow nur Zweierstöße (binär)
- (v) Räumliche und zeitliche Änderungen der angelegten Felder E klein bezogen auf Stoßlänge (mittlere freie Weglänge) und Stoßzeit

5.3 Momentenentwicklung der Boltzmann-Gl.

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

Startpunkt: kinet. Boltzmann-Gl.

- beschreibt detailliert k -abhängige Stoßprozesse

Momente der Verteilungsfkt.

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

Physikal. Bedeutung:

Teilchendichte	$n(\underline{r}, t) = \int f(\underline{r}, \underline{k}, t) d^3k$
Impulsdichte	$\underline{g}(\underline{r}, t) = \int \hbar \underline{k} f(\underline{r}, \underline{k}, t) d^3k$
Energiedichte	$u(\underline{r}, t) = \int \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m^*} f(\underline{r}, \underline{k}, t) d^3k$
Energierostdichte	$\underline{w}(\underline{r}, t) = \int \epsilon(\underline{k}) \underline{v}_g(\underline{k}) f(\underline{r}, \underline{k}, t) d^3k$ $= \frac{\hbar^3}{2(m^*)^2} \int \underline{k}^3 f(\underline{r}, \underline{k}, t) d^3k$

- ohne el. Feld ohne Streuprozesse \rightarrow Teilchenzahl, Energie u. Impuls sind Erhaltungsgrößen
- \rightarrow die entsprechenden Dichten $g(\underline{r}, t)$ und die zugehörigen Stromdichten $\underline{j}_g(\underline{r}, t)$ gehorchen makroskop. Kontinuitätsgln.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_r \cdot \underline{j}_g = 0$$

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

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

Rechttrafo: $\hat{f}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ikx} f(k) dk \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \langle e^{ikx} \rangle$
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 Bilanzgl. für die Momente lassen sich aus der Boltzmann-Gl.

$$\frac{\partial f(x, k, t)}{\partial t} + v_g(k) \cdot \nabla_x f(x, k, t) - \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \nabla_k f(x, k, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stoß}}$$

gewinnen durch Multiplikation mit $\phi(k) := k^m$ und Integration über zd^3k

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi \rangle_n + \nabla_x \langle \phi v_g \rangle_n + \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \underbrace{\langle \nabla_k \phi(k) \rangle_n}_{\text{①}} = \underbrace{\int \phi(k) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stoß}} zd^3k}_{\mathcal{F}(\phi)}$$

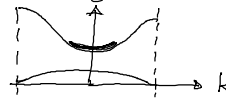
mit $\langle \phi \rangle_n := \int \phi(k) f(x, k, t) zd^3k = g(x, t)$

Mittlung mit auf n normierter Verteilungsfkt.
↑ Teilchen-, Impuls-, Energieabichte

$$(\langle 1 \rangle_n = \int f zd^3k = n(x, t))$$

$$\text{① } \int \phi(\nabla_k f) zd^3k = - \int (\nabla_k \phi) f zd^3k + \underbrace{\int \nabla_k (\phi f) zd^3k}_0$$

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



Die Momentenql. für das m -te Moment $\langle k_i^m \rangle_n$ koppelt wegen

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

und

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial k_i} \phi \right\rangle_n = m \langle k_i^{m-1} \rangle_n$$

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

\Rightarrow unendliche gekoppelte Hierarchie von Gls.