English Summary:

Boltzmann equation:

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

kinetic eq.
$f(\underline{r},\underline{k},t)$
probability distribution fct. (electrons)

semiclassical transport eq. $\quad \underline{v}_g := \frac{1}{\hbar}\nabla_k E(\underline{k})$, $\underline{\mathcal{E}}$ el. field

Moment expansion of Boltzmann eq. $\quad \phi(k) := k^m$, $m \in \mathbb{N}_0$

$\Rightarrow$ hydrodynamic balance eqs.

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\langle\phi\rangle_n + \frac{\hbar}{m^*}\nabla_r \langle \underline{k}\phi\rangle_n + \frac{e\mathcal{E}}{\hbar}\langle \nabla_k \phi\rangle = \int \phi(\underline{k})\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{collision} 2 d^3k} \qquad (*)$$

Abbruch der Momentengl.hierarchie durch Näherungsannahmen:

(i) Störungstheoret. Entwicklung von $f(\underline{r},\underline{k},t)$

(ii) Annahme einer speziellen Form für $f$, z.B.

$$f(\underline{k}) = \frac{n}{N_c(T_e)}\, e^{-\frac{\hbar^2(\underline{k}-\underline{k}_0)^2}{2m^* kT_e}}$$

verschobene Maxwell-Boltzmann-Verteilung (heated displaced Maxwellian)

$\underline{k}_0$ Verschiebung durch $\mathcal{E}$

$T_e$ Elektronentemp.

$N_c$ eff. Zustandsdichte im Leit.band (Entartungskonz.) $\gg n$

Nachteil: höhere zentrale Momente $(k - \langle k\rangle)^m$ $\quad m>2$ verschwinden

$\Rightarrow$ keine Bilanzgl. für Wärmestromdichte

oder $\quad f(\underline{k}) = f_0(|\underline{k}|) + f_1(|\underline{k}|)\, k_z \qquad z \parallel \mathcal{E}$

entspricht den ersten 2 Termen einer Legendre-Entwicklung

Speziell wählen wir in der Momentenentwicklung:

$m=0$: $\quad \phi(k) = 1$, $\quad \langle\phi\rangle_n = n(\underline{r},t)$

$m=1$: $\quad \phi_i(\underline{k}) = \hbar k_i$; $\quad \hbar\langle\underline{k}\rangle_n = \underline{g}(\underline{r},t) = n(\underline{r},t)\,\underline{p}(\underline{r},t)$

$\underline{p}$: mittl. Impuls der Teilchen

$$\hbar\langle\underline{k}\rangle = \underline{p}(\underline{r},t) = m^*\underline{v}$$

$\underline{v}$: mittlere Teilchengeschw. $\underline{v} = \langle \underline{v}_g\rangle$

$m=2$: $\quad \phi(\underline{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$; $\quad u(\underline{r},t) = n(\underline{r},t)\,\overline{E}(\underline{r},t)$

$\overline{E}$: mittlere Energie pro Teilchen

$$\overline{E} = \frac{\hbar^2\langle k^2\rangle}{2m^*} = \underbrace{\frac{m^*}{2}v^2}_{\text{konvektive Energie}} + \underbrace{\frac{3}{2}kT_e}_{\text{thermische Energie}}$$

Dabei wurde die Elektronentemp. $T_e$ definiert durch

$$\frac{3}{2}kT_e := \frac{m^*}{2}\left[\langle \underline{v}_g^2\rangle - \langle\underline{v}_g\rangle^2\right] = \frac{m^*}{2}\langle(\underline{v}_g - \langle\underline{v}_g\rangle)^2\rangle$$

Varianz der mittleren Geschwindigkeit

Weitere Terme in Bilanzgln. (*)

(i) Impulsstromdichte

$$\underline{\nabla}_r \langle \hbar k_i \underline{v}_g \rangle_n = m^* \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ n \langle v_i v_j \rangle \right]$$

$$= m^* \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ n \langle v_i \rangle \langle v_j \rangle \right] + m^* \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ n \langle (v_i - \langle v_i \rangle)(v_j - \langle v_j \rangle) \rangle \right]$$

Mittelwert Varianz

$$= \underbrace{\left(\underline{\nabla}_r (n v)\right) p_i + \left(n \underline{v} \cdot \underline{\nabla}_r\right) p_i}_{\text{konvektive Terme}} + \underbrace{\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left( n k T_{ij} \right)}_{\text{Divergenz des Temp.tensors}}$$

$$k T_{ij} = m^* \langle (v_i - \langle v_i \rangle)(v_j - \langle v_j \rangle) \rangle$$

$$T_e = \frac{1}{3} \operatorname{tr} \underline{\underline{T}}$$

(ii) Energiestromdichte $\underline{w}$

$$\underline{\nabla}_r \left\langle \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} \underline{v}_g \right\rangle_n = \underline{\nabla}_r \int E(\underline{k}) \underline{v}_g(\underline{k}) f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, z\, d^3k = \underline{\nabla}_r \cdot \underline{w}(\underline{r}, t)$$

$$w_i(\underline{r}, t) = \frac{m^*}{2} n \langle v_g^2 v_i \rangle$$

$$= \frac{m^*}{2} n \Big\{ \langle v_g^2 \rangle \langle v_i \rangle + \langle v_g^2 (v_i - \langle v_i \rangle) \rangle \underbrace{- 2 \langle (\underline{v}_g \langle \underline{v}_g \rangle)(v_i - \langle v_i \rangle) \rangle + 2 \langle \underline{v}_g \langle \underline{v}_g \rangle)(v_i - \langle v_i \rangle) \rangle + \langle \langle v_g \rangle^2 (v_i - \langle v_i \rangle) \rangle}_{0} \Big\}$$

$$= \underbrace{n E v_i}_{\text{Konvektion}} + \underbrace{j_{Q,i}}_{\text{Wärmestromdichte}} + \underbrace{\sum_{j=1}^{3} n k T_{ij} v_j}_{\text{Elektronendruck-induz. Fluss}}$$

$$j_Q(\underline{r}, t) = \frac{m^*}{2} \int (\underline{v}_g - \langle \underline{v}_g \rangle)^2 (\underline{v}_g - \langle \underline{v}_g \rangle) f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, z\, d^3k$$

(iii) Feldterm: $\left\langle \frac{\partial}{\partial k_j} k_i \right\rangle_n = n \delta_{ij}$

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

Damit folgt aus der Momentenentwickl. (*):

(1) $\frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_r (n \underline{v}) = \int \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{Stoß} z\, d^3k$

$$\boxed{\begin{aligned}
&(2)\quad \frac{\partial}{\partial t}(n\underline{p}) + [\underline{\nabla}_r\cdot(n\underline{v})]\underline{p} + (n\underline{v}\cdot\underline{\nabla}_r)\underline{p} = -\mathrm{Div}(nk\underline{\underline{T}}) - en\underline{\mathcal{E}} + \int \hbar\underline{k}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k \\
&(3)\quad \frac{\partial}{\partial t}(n\overline{E}) + \underline{\nabla}_r(n\underline{v}\overline{E}) = -\underline{\nabla}_r(nk\underline{\underline{T}}\,\underline{v}) - \underline{\nabla}_r\underline{j}_Q - en\underline{v}\cdot\underline{\mathcal{E}} + \int \frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k
\end{aligned}}$$

Gln. (1) – (3) haben die Form von Kontinuitätsgln. für

- Teilchendichte
- Impulsdichte
- Energiedichte

wobei die rechten Seiten Quellterme darstellen:

Impulsgewinn im el. Feld $\quad (-e)n\underline{\mathcal{E}} \quad$ (Kraftdichte)

Energiegewinn $\quad$ " $\quad (-e)n\underline{v}\cdot\underline{\mathcal{E}} = \underline{j}\cdot\underline{\mathcal{E}}$ (Joule'sche Wärme)

- Teilchenzahländerung durch Generation u. Rekomb.
  (auch Augerrekomb. u. Stoßionisation)

  $$J_0 := \int \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k = \varphi(n, \overline{E})$$ Generations-Rekombinationsrate (g-r-Rate)

- Impulsrelaxation durch Streuung

  $$\underline{J}_1 := \int \hbar\underline{k}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k$$ Impulsrelax.rate

- Energierelaxation durch Streuung

  $$J_2 := \int \frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k$$ Energierelax.rate

Wegen der Stoßterme $J_0, \underline{J}_1, J_2$ und weil ein drittes Moment ($\underline{j}_Q$) und nichtdiagonale 2. Momente ($T_{ij}$) angekoppelt sind

$\longrightarrow$ <u>kein geschlossenes</u> Gl.system

Annahme: $J_0 = \varphi(n, \overline{E})$ $\quad$ g-r-Rate (nichtlin.!)

$\underline{J}_1 = -n\dfrac{\underline{p}}{\tau_m}$ $\quad$ Impulsrelax.zeit $\tau_m(\overline{E})$ (nichtlin.!)

$J_2 = -n\dfrac{\overline{E}-\overline{E}_0}{\tau_e}$ $\quad$ Energierelax.zeit $\tau_e(\overline{E})$ (nichtlin.!)

$E_0 = \frac{3}{2}kT$ (Gittertemp. $T$)

$T_{ij} = T_e\,\delta_{ij}$ $\quad$ skalare El.temp. $T_e$

$\underline{j}_Q = -\kappa \underline{\nabla} T_e$ Fourier-Gesetz (phänomenolog. Ansatz mit Wärmeleitfähigkeit $\kappa$)

NB: Wärmestromdichte ist für die num. Stab. der Lösungen der Bilanzgl. wichtig

A. Eikmeier, E. Emmrich, E. Schöll: Why more physics can help achieving better mathematics, Int. J. Dynamics Control 6, 973 (2018).

$$\boxed{\begin{aligned}
&(1') \quad \dot{n} + \underline{\nabla}(n\underline{v}) = \varphi(n, \bar{E}) \\
&(2') \quad \dot{\underline{p}} + (\underline{v}\cdot\underline{\nabla})\underline{p} + \frac{1}{n}\underline{\nabla}(nkT_e) + e\underline{\mathcal{E}} = -\frac{\underline{p}}{\tau_m'} \\
&(3') \quad \dot{\bar{E}} + (\underline{v}\cdot\underline{\nabla})\bar{E} + \frac{1}{n}\underline{\nabla}(nkT_e\underline{v}) - \frac{\kappa}{n}\Delta T_e + e\,\underline{v}\cdot\underline{\mathcal{E}} = -\frac{\bar{E}-\bar{E}_0}{\tau_e'}
\end{aligned}}$$

$$\frac{1}{\tau_m'} = \frac{1}{\tau_m} + \varphi \qquad \frac{1}{\tau_e'} = \frac{1}{\tau_e} + \varphi$$

Nebenrechn.: Benutze in (2'), (3'): $\dot{n} + \underline{\nabla}(n\underline{v}) = \varphi$

Quade, Rudan, Schöll: Hydrodyn. simul. of impact ionization in p-n jct., Trans. CAD IEEE 10, 1287 (91)

Quade, Schöll, Rudan: Hydrodyn. approach to semic. transport, Sol. State El. 36, 1493 (1993)