Fortsetzung: 5.2 Boltzmann Stoßgleichung

$$\dot{S}_q^{k+q\,k} = -i\,\Delta\omega\, S_q^{k+q\,k} + Q(t)$$

Markov Approximation :

$$S_q^{k+q\,k} \approx Q(t)\,\pi\,\delta(\Delta\omega)$$
$$= -\frac{i}{\hbar} D_q \left[(n_q+1) f_{k+q}(1-f_k) - n_q f_k (1-f_{k+q})\right] \times$$
$$\times \pi\,\delta\left(\omega_k - \omega_{k+q} + \omega_q^{ph}\right)$$

Einsetzen in $\dot{f}_k$

$$i\hbar\,\dot{f}_k(t) = -\Gamma_{aus}\, f_k(t) + \Gamma_{in}\,(1-f_{k+q})$$

$\Rightarrow$ Boltzmann Stoßgleichung ("Ratengleichung")

beinhaltet die Energieerhaltung ($\to$ δ-Fkt.)

(man schaut nicht genau nach $\to$ coarse graining)

Δt groß , ΔE fest

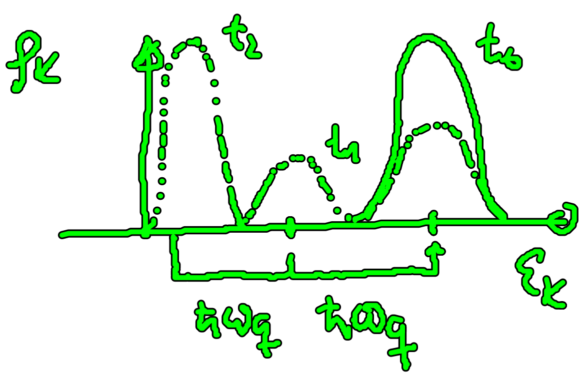
$$\Gamma_{aus} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_q |D_q|^2 \Big\{ \delta\left[(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \hbar\omega_q)\frac{1}{\hbar}\right] n_q$$
$$+ \delta\left[(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k + \hbar\omega_q)\frac{1}{\hbar}\right] (n_q+1) \Big\} (1-f_{k+q})$$

$$\Gamma_{ein} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |D_q|^2 \int \Big\{ \delta\Big[(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \hbar\omega_q)\frac{1}{\hbar}\Big](n_q + 1) + \delta\Big[(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k + \hbar\omega_q)\frac{1}{\hbar}\Big] n_q \Big\} \rho_{k+q}(t)$$

$$\rho_k \underset{\text{Einstreuung}}{\overset{\text{Ausstreuung}}{\rightleftarrows}} \rho_{k+q}$$ Pauli-Blocking

Interpretation der Ergebnisse

a) Kinetik (Boltzmann)



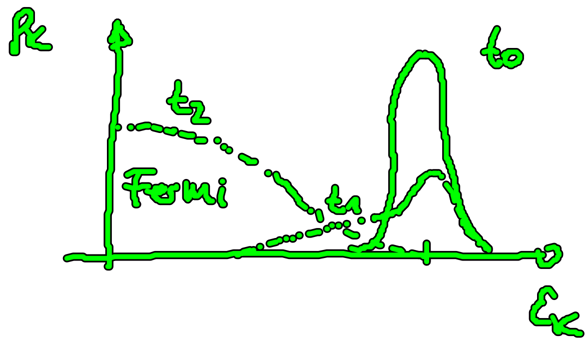
$t_0 < t_1 < t_2$

$t_2 \sim ps$

Energieerhaltung

Nicht-GG-Verteilung relaxiert in Richtung der Fermi-Verteilung in festen Energieschritten

b) Quantenkinetik



t_2 : Fermiverteilung

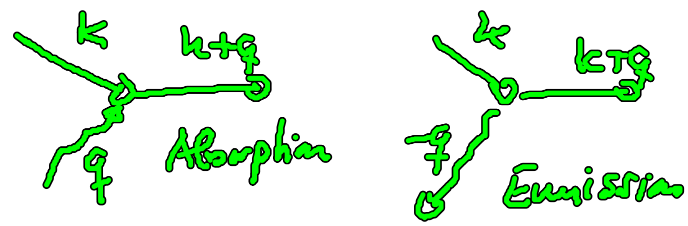
Durch das "Aufweichen der Energieerhaltung" findet Verbreiterung der Verteilung statt.

Zusammenfassung zu Kapitel IV

- $H_{e-p} = \sum_{jq} \sum_{k\lambda} D_{qj} \left(b^+_{-qj} + b_{qj}\right) a^+_{\lambda k+q} a_{\lambda k}$

- Deformationspotential $\sim |q|$
  Piezoelektrische Kopplungen $\sim \vec{e}_q$
  Fröhlich-Kopplung $\sim \frac{1}{|q|}$

- Endliche Lebensdauer der Elektronen im Blochzustand k durch El-Ph-Streuung



- Blochgleichungen für die mikroskopische Polarisation $p_k = \langle a^+_{vk} a_{ck} \rangle$ und die Besetzungswahrscheinlichkeit $f^i_k = \langle a^+_{ik} a_{ik} \rangle$

Zeitliche Dynamik im Rahmen der Heisenberg-Gl.
$\rightarrow$ Phononassistierte Größen $S^{\lambda k \lambda' k'}_{jq} = \langle b_{qj} a^+_{\lambda k} a_{\lambda' k'} \rangle$

- Dynamik von S $\rightarrow$ Quantenkinetik (keine Energieerhaltung)

  $\rightarrow$ Boltzmann-Gl. (Markov-Approx.: Vernachlässigung von Gedächtniseffekten)

V Elektrischer Transport und Widerstand

Ladungstransport unter dem Einfluß eines elektrischen Feldes und der schwachen El-Ph-WW

Annahme des Wärmebads, d.h. keine eigene Phononendynamik → Boseverteilung

1. Drude-Modell

Leitfähigkeit in Metallen. Quasifreie Elektronen entscheidend.

Elektronen als klassische Teilchen, die durch ein äußeres Feld beschleunigt werden

$$m\ddot{\vec{r}} = m\dot{\vec{v}} = \vec{F} \underbrace{- \frac{m}{\tau}\vec{v}}_{\text{Reibungskraft}} = q\vec{E} - \frac{m}{\tau}\vec{v}$$

$$\vec{v}_{hom} = \vec{v}_0 e^{-t/\tau}$$ homogene Lösung

Ohne treibende äußere Kraft klingt die Bewegung in einer charakteristischen Zeit τ ab. Für $t \gg \tau$ ist die homogene Lösung 0.

$$\vec{v} = \vec{v}_{inh} = \frac{q\tau}{m}\vec{E}$$

Der Strom $\vec{j} = nq\,\vec{v} = \frac{nq^2}{m}\tau\vec{E}$ $\quad n \hat{=}$ Teilchendichte

$\sim \vec{E}$

Stromdichte ~ elektrisches Feld

$\Rightarrow$ Ohmsches Gesetz $\vec{j} = \sigma\vec{E}$

mit der Leitfähigkeit $\sigma = \frac{nq^2\tau}{m}$

σ unabhängig vom Vorzeichen der Ladungsträger.

$\sigma \sim n$

$\sim \tau$ (je stärker die Reibung, desto kleiner τ und damit auch σ)

$\sim \frac{1}{m}$ (je kleiner die Masse, desto größer die Leitfähigkeit)

2. Strom als quantenmechanische Observable

Def. des Stromoperators in 2. Quantisierung

$$\vec{j} = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{n_1 n_2} \varphi^*_{n_1}(r)\left[\vec{p} - q\vec{A}\right]\varphi_{n_2}(r)\, a^+_{n_1} a_{n_2} + \text{h.a.}$$

Das em Feld ist durch das statische Potential Φ und das Vektorpotential $\vec{A}$ beschrieben.

Annahme eines stationären Feldes, d.h. $\vec{A} = 0$.

$$\phi = \phi_{ext} + \phi_{int}$$

Coulomb-WW wird später behandelt

$$\vec{E}_{ext} = -\vec{\nabla}\phi_{ext}$$

$$\phi_{ext} = -\vec{r}\cdot\vec{E}_{ext}$$

$$\vec{j}(r,t) = \frac{1}{2}\frac{q}{m}\sum_{k_1 k_2}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{-i\vec{k}_1\vec{r}}u^*_{k_1}(r)\,\vec{p}\,\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}}u_{k_2}(r)\,a^+_{k_1}a_{k_2} + h.c.$$

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

$$= \frac{1}{2}\frac{q}{mV}\sum_{k_1k_2}e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{r}}a^+_{k_1}a_{k_2}\left[\hbar k_2\, u^*_{k_1}(r)u_{k_2}(r) + \frac{\hbar}{i}u^*_{k_1}(r)\vec{\nabla}u_{k_2}(r)\right] + h.a.$$

Ortsabhängigkeit $u_k(r)$ reflektiert Fluktuationen auf Elementarzellen-Ebene (da $u_k(r)$ gitterperiodisch). Bei einer Messung wird darüber gemittelt

$$\langle A\rangle = \frac{1}{\Omega_0}\int_{\Omega_0}A(r-r')\,d^3r\,\Big|_{\vec{r}=\vec{R}_n}$$

Mittelung vom 1. Term

$$\langle u^*_{k_1}(\vec{r})\,u_{k_2}(\vec{r})\rangle = \frac{1}{\Omega_0}\int d^3r\,u^*_{k_1}(r-r')\,u_{k_2}(r-r')\,\Big|_{\vec{r}=\vec{R}_n}$$

$$= \frac{1}{\Omega_0} \int d^3r \; u_{k_1}^*(r)\, u_{k_2}(r)$$

u_s gitterperiodisch

$$= 1 \quad \leftarrow k_1, k_2 \approx 0$$

- k-Abhängigkeit der u_s gering gegenüber der von $e^{ik\cdot r}$
- entscheidend um Bandminimum herum $k_0 = 0$

Mittelung von 2. Term

$$\langle u_{k_1}^*(r)\, \vec{\nabla}\, u_{k_2}(r) \rangle = -i\vec{k}_2 + \frac{im}{\hbar^2} \vec{\nabla}_{k_2} \varepsilon_{k_2} \quad \Longrightarrow \text{Übungsaufgabe}$$

$$\langle a_{k_1}^+ a_{k_2} \rangle$$

$$\langle \vec{j} \rangle = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \frac{1}{V} \sum_{k_1 k_2}{}' e^{-i(k_1 - k_2)\vec{R}_n} \left[\cancel{\hbar \vec{k}_2 \cdot 1} \; \cancel{- \frac{\hbar}{i} i\vec{k}_2} + \frac{\hbar}{i} \frac{im}{\hbar^2} \frac{\hbar^2 k_2}{m^*} \right]$$

$$= \frac{1}{2} \frac{q}{m^* V} \sum_{k_1 k_2} e^{-i(k_1 - k_2) R_n} \langle a_{k_1}^+(t)\, a_{k_2}(t) \rangle\, \hbar\vec{k}_2 + \text{h.c.}$$

Annahme: räumlich homogenes System, d.h. $\vec{j}$ soll unabhängig vom Ort sein. Das ist der Fall, falls $k_1 = k_2$

$$\langle \vec{j} \rangle = \frac{q}{V} \sum_k f_k \underbrace{\frac{\hbar k}{m^*}}_{\text{Geschwindigkeit } v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}}$$

Ziel: Bestimmung der Dynamik von f_k

3. Elektronen im elektrischen Feldes

$$H_{el\text{-}Feld} = q\,\Phi \quad \xrightarrow{\text{2. Quantisierung}} \quad q \sum_{k_1 k_2} \frac{1}{V} \int d^3r\, e^{-i\vec{k}_1\vec{r}}\, u_0^*(r) \underbrace{[-\vec{r}\,\vec{E}_{ext}]\, e^{i\vec{k}_2\vec{r}}}_{i\vec{E}_{ext}\vec{\nabla}_{k_2} e^{i\vec{k}_2\vec{r}}}\, u_0(r)\, a_{k_1}^+ a_{k_2}$$

$$H_{el\text{-}Feld} = \frac{q}{V} \sum_{k_1 k_2} \underbrace{\sum_n e^{-i(k_1-k_2)R_n}}_{N\,\delta_{k_1 k_2}} \underbrace{\int d^3r_n\, u_0^*(\vec{r}_n+\vec{R}_n)\, u_0(\vec{r}_n+\vec{R}_n)}_{\Omega_0} \times \left[-i\,E_{ext}\,\vec{\nabla}_{k_2}\, a_{k_1}^+ a_{k_2}\right]$$

partielle Integration

Zerlegung in EZ

$\vec{r} = \vec{r}_n + \vec{R}_n$

$$H_{el\text{-}Feld} = -iq \sum_k \vec{E}_{ext} \cdot \vec{\nabla}_k\, a_k^+ a_k$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_k^+ a_k = [a_k^+ a_k, H_{el\text{-}Feld}]$$

$$= -iq\,\vec{E}_{ext}\Big[a_k^+ a_k \sum_{k'} \nabla_{k'} a_{k'}^+ a_{k'} - \underbrace{\sum_{k'} \nabla_{k'} a_{k'}^+ a_{k'}\, a_k^+ a_k}_{\#}\Big]$$

$$\#\ \lim_{\delta k' \to 0} a_{k'}^+ \frac{a_{k'+\delta k'} - a_{k'}}{\delta k'}\, a_k^+ a_k$$

$$\lim_{\delta k' \to 0} a_{k'}^+ \frac{\delta_{k'+\delta k', k} - a_k^+ a_{k'+\delta k'} - \delta_{k'k} + a_k^+ a_{k'}}{\delta k'}\, a_k$$

$$\lim_{\delta k' \to 0} \frac{1}{\delta k'} \Big[\underbrace{a_{k'-\delta k'} a_k - a_k^+ a_k}_{\to\ -\nabla_k a_k^+ a_k} - a_{k'}^+ a_k^+ a_{k'+\delta k'} a_k^+ a_{k'}^+ a_k^+ a_{k'} a_k \Big]$$

$$a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'+\delta k'} + a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'}$$

$$\delta_{kk'} - a_k a_{k'}^+ \qquad \delta_{kk'} - a_k a_{k'}^+$$

$$-a_k^+ a_{k+\delta k} + a_k^+ a_k a_{k'}^+ a_{k'+\delta k'}$$

$$-\nabla_k a_k^+ a_k \qquad + a_k^+ a_k - a_k^+ a_k a_{k'}^+ a_{k'}$$

$$a_k^+ a_k \nabla_{k'} a_{k'}^+ a_{k'}$$

kürzt sich weg mit dem 1. Term

$$\longrightarrow\ -\nabla_k (\underbrace{a_k^+ a_k}_{\rho_k})$$

Insgesamt

$$i\hbar \dot{\rho}_k = i q \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k \rho_k(t)$$

$$-i\hbar \Big[\frac{\partial}{\partial t} + \underbrace{\frac{q}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k}_{\text{Beschleunigung der Ladungsträger im elektrischen Feld}} \Big] \rho_k(t) = 0$$

$$\rho_k(t) = f\Big(k - \frac{q}{\hbar} \vec{E}\, t\Big)$$

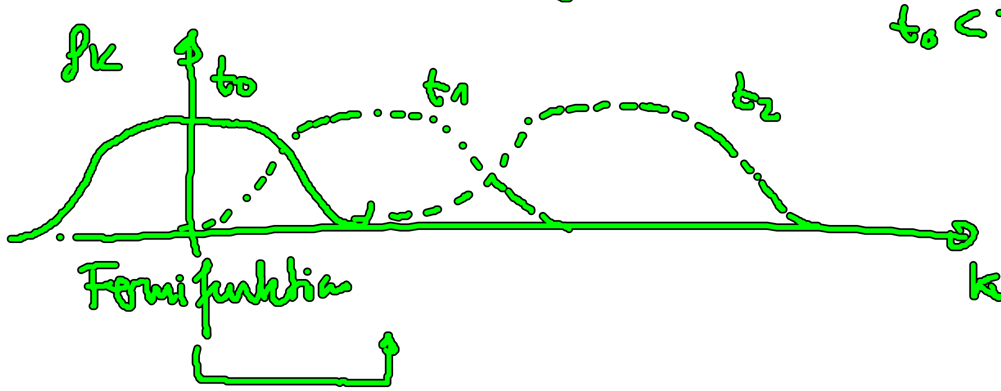
Verschiebung der Verteilung mit der Zeit

Beweis durch Einsetzen

Funktion f ist beliebig. Sie ist bestimmt durch die Anfangsbedingung, daß die Verteilung zum Zeitpkt.

$t_0 = 0$ der Fermiverteilung entspricht

$t_0 < t_1 < t_2$



$$\Delta k = \frac{q}{\hbar} E \Delta t$$

Verschiebungstheorem: Stromfluß im Ortsraum
$\hat{=}$ Anwachsen des Impulses mit der Zeit
($\hat{=}$ Beschleunigung durch das Feld)

Annahme freier Elektronen im Feld ist nicht sinnvoll, da die Elektronen so unendlich beschleunigt werden

$$\vec{j} = \frac{q}{Vm^*} \sum_k \hbar \vec{k}\, g_k = \frac{q}{Vm^*} \sum_k \hbar k\, f\left(\vec{k} - \frac{qE}{\hbar} t\right)$$

$$= \frac{q}{Vm^*} \sum_k \underset{\substack{\uparrow \\ \text{symmetrisch}}}{f(k)} \left[\underset{\substack{\uparrow \\ \text{antisymmetrisch}}}{\hbar \vec{k}} + q \vec{E} t \right]$$

$\vec{k} \to \vec{k} + \frac{qE}{\hbar} t$

$\Downarrow$
0 unter dem Integral

$$\sim \sum_k f(k)\, q \vec{E} t \longrightarrow \infty$$
für $t \to \infty$

d.h. Strom divergiert, da die Beschleunigung nicht gebremst wird. Lösung: Einführung der El-Ph. bzw. El-El-WW entscheidend.

4. Elektrischer Widerstand durch El-Ph-Streuung

Boltzmann-Gl. ist numerisch zu anspruchsvoll (mehrdim. Integrale)

Ansatz: Linearisierung $\quad \underbrace{\rho_k(t) = \rho_k^0}_{} + \rho_k^1(t)$ ← Störung

ρ_k^0: Gleichgewichtsverteilung (Fermi-Fkt.)

$$\dot{\rho}_k\Big|_{el-ph} = -\sum_q W_{k\to k+q}(1-\rho_{k+q})\rho_k + \sum_q W_{k+q\to k}\,\rho_{k+q}(1-\rho_k)$$

$(1-\rho_{k+q})$: zusätzlicher Beitrag zur Dynamik von ρ_k

Weitere Annahmen:

Schwache Besetzung mit Elektronen, d.h. $\rho_k, \rho_{k+q} \ll 1$

$$\dot{\rho}_k\Big|_{el-ph} = -\sum_q W_{k\to k+q}\,\rho_k + \sum_k W_{k+q\to k}\,\rho_{k+q}$$

$$\dot{\rho}_k\Big|_{el-ph} = \dot{\rho}_k^0 + \dot{\rho}_k^1 = \overbrace{-\sum_q W_{k\to k+q}\,\rho_k^0 + \sum_q W_{k+q\to k}\,\rho_{k+q}^0}^{=0 \text{ da stationäre Lösung}}$$

$$- \sum_q W_{k\to k+q}\,\rho_k^1 + \sum_q W_{k+q\to k}\,\rho_{k+q}^1$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\rho}_k^1 \Big|_{el-ph} = - \sum_q w_{k\to k+q} \, (\rho_k^1 - \underbrace{\rho_{k+q}^1}_{\text{vernachlässigbar}})$$

Annahme

$W_{k\to k+q} = W_{k+q \to k}$
gilt, wenn Vernachlässigung
der spontanen Phononemission
$n_q + 1 \approx n_q$

Relaxationszeitnäherung

$$\boxed{\dot{\rho}_k^1 \Big|_{el-ph} (t) = - \frac{1}{\tau} \rho_k^1(t)}$$

mit der Relaxationszeit $\frac{1}{\tau} = \sum_q w_{k\to k+q}$

$\tau \Rightarrow$ Zeit, mit der die Störung abklingt bzw. Zeit, mit der die Nicht-GG-Verteilung in Fermi-Verteilung übergeht