6.3. Elektrische Leitfähigkeit

Berechne $f(\underline{r}, \underline{k}, t)$ aus Boltzmanngl.

$$\Rightarrow \quad n(\underline{r}, t) = \int f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, z\, d^3k \qquad \text{Elektronendichte} \quad z = \frac{2}{(2\pi)^3}$$

$$\underline{j}(\underline{r}, t) = \int (-e\underline{v}_g)\; f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, z\, d^3k \qquad \text{elektr. Stromdichte (Ladungstransport)}$$

$$= -\frac{e}{\hbar} \int \left(\underline{\nabla}_k E(k)\right) f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, z\, d^3k$$

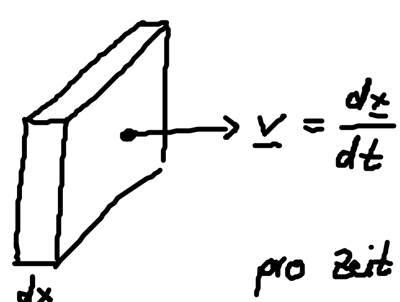
$$\underline{w}(\underline{r}, t) = \int E(k)\, \underline{v}_g\; f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, z\, d^3k \qquad \text{Energiestromdichte (Energietransport)}$$

Mit der Definition des Ensemble-Mittelwertes

$$\underline{v}(\underline{r}, t) = \langle \underline{v}_g \rangle := \frac{1}{n} \int v_g\, f(\underline{r}, \underline{k}, t)\, z\, d^3k$$

läßt sich schreiben

$$\underline{j}(\underline{r}, t) = -en \langle v_g \rangle$$



pro Zeit dt treten
$n dx$ Elektronen mit

Ladung e durch Fläche

$$j = \frac{\text{Ladung}}{\text{Zeit} \cdot \text{Fläche}} = e\, n \frac{dx}{dt}$$

Ziel:

Zusammenhang zwischen j und el. Feld $\underline{E}$?

Im Folgenden:

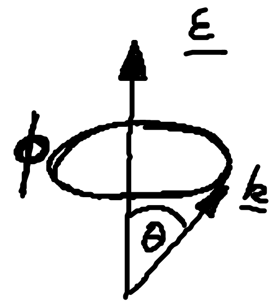
(i) $\underline{B} = 0$; $E \neq 0$

(ii) Isotropes Leitungsband : $E(|k|)$

$\Rightarrow$ Gleichgewichtsverteilung ($E = 0$)

isotrop : $f_0(|k|)$

$\underline{E}$ führt zur Störung der isotropen Verteilung



Entwicklung des richtungsabhängigen Anteils von $f(\underline{k})$ nach Legendre-Polynomen

$$f(\underline{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} \tilde{f}_l(E)\, P_l(\cos\theta)$$

$E = E(|k|)$

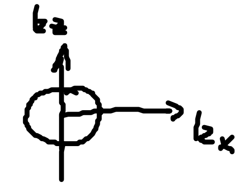
(Annahme: keine Abhängigkeit vom Azimuth Winkel ϕ)

Legendre-Polynome (vollst. ONS)

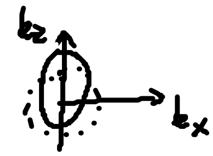
$$P_0(\cos\Theta) = 1$$

$$P_1(\cos\Theta) = \cos\Theta$$

$$P_2(\cos\Theta) = \frac{1}{2}\left(3\cos^2\Theta - 1\right) = \frac{1}{4}\left(3\cos 2\Theta + 1\right)$$



Monopol



Dipol

Bei nicht zu hohen Feldern:

$$\boxed{f(\underline{k}) = f_0(E) + f_1(E)\underbrace{k\cos\Theta}_{k_z}}$$

$f_0 = \tilde{f}_0 \;;\; f_1 k = \tilde{f}_1$

stationäre, <u>ortsunabhängige</u> Lösung der Boltzmanngl. für linearisierte Stoßterme (elast. Streuung oder Nichtentartung)

Legendre Entwicklung ergibt:

$$-\frac{e\mathcal{E}}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k_z}\left(\sum_l \tilde{f}_l(E)\,P_l(\cos\Theta)\right) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{stoß}}$$

$\longrightarrow$ unendliche Hierarchie für $\tilde{f}_l(E)$

$\longrightarrow$ Koeff. vergleich

• Abbruch der Legendre Entwicklung

$$-\frac{e\mathcal{E}}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k_z}\left(f_0(E) + f_1(E)k_z\right) = -\frac{e\mathcal{E}}{\hbar}\left\{\frac{df_0}{dE}\underbrace{\frac{\partial E}{\partial k_z}}_{\frac{\hbar^2 k_z}{m^*}} + \left[f_1 + \frac{df_1}{dE}\underbrace{\frac{\partial E}{\partial k_z}}_{\frac{\hbar^2 k_z}{m^*}}k_z\right]\right\}$$

$$= -\frac{\hbar e \mathcal{E}}{m^*}\frac{df_0}{dE}\underbrace{k\cos\theta}_{P_1} - \frac{e\mathcal{E}}{\hbar}\left[f_1 + \frac{df_1}{dE}\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\overbrace{\left(\frac{1}{3}+\frac{1}{3}\underbrace{(3\cos^2\theta-1)}_{2P_2(\cos\theta)}\right)}^{\cos^2\theta}\right]$$

verschwindet bei Integration über Raumwinkel

$$\overline{\cos^2\theta} = \frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}\cos^2\theta\, d(\cos\theta)\int_0^{2\pi}d\phi = \frac{1}{3}$$

$$\approx -e\mathcal{E}\frac{\hbar k}{m^*}\frac{df_0}{dE}P_1(\cos\theta) - \frac{e\mathcal{E}}{\hbar}\frac{2}{3}E^{-1/2}\frac{d}{dE}\left(E^{3/2}f_1\right)P_0(\cos\theta)$$

Stoßterm für Elektron-Phonon-Streuung:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} = \underbrace{-\frac{V_g}{(2\pi)^3}\int\left\{W(\underline{k},\underline{k}')f_0(E_k) - W(\underline{k}',\underline{k})f_0(E_{k'})\right\}d^3k'}_{\left(\frac{\partial f_0}{\partial t}\right)_{Stoß}\cdot P_0(\cos\theta)}$$

$$\underbrace{-\frac{V_g}{(2\pi)^3}\int\left\{W(\underline{k},\underline{k}')f_1(E_k)\,k\cos\theta - W(\underline{k}',\underline{k})f_1(E_{k'})\,k'\cos\theta'\right\}d^3k'}_{k\cos\theta\,\mathcal{L}f_1}$$

(für nichtentartete HL (wenig Ladungsträger))

$\uparrow$

linearer Integralop.

Koeffizientenvergleich der Legendre-Polynome in der Boltzmanngl.:

$$P_0: \quad -\frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \frac{2}{3} E^{-1/2} \frac{d}{dE} \left(E^{3/2} f_1\right) = \left(\frac{\partial f_0}{\partial t}\right)_{stoß} \qquad (1)$$

$$P_1: \quad -e\mathcal{E} \frac{\hbar k}{m^*} \frac{df_0}{dE} = k \mathcal{L} f_1 \qquad (2)$$

- Für <u>kleine Felder $\mathcal{E}$</u> ist die linke Seite von (1) $O(\mathcal{E}^2)$ und kann vernachlässigt werden.
  Die therm. Gleichgewichtsverteilung (Fermi-Verteilung) erfüllt
  $\left(\frac{\partial f_0}{\partial t}\right)_{stoß} = 0$. (nicht eindeutig)

- Für <u>höhere Felder</u> ist L.S. von (1) nicht vernachlässigbar
  f_0 ist keine Fermi-Verteilung
  sondern nur der kugelsymm. Anteil der Nichtgleichgewichtsverteil, abhängig von $\mathcal{E}$.
  z.B. quasitherm. Verteilung mit Elektronentemp. $T_e > T_L$:
  „heiße Elektronen"

<u>Relaxationszeitnäherung der Boltzmanngl.:</u>

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

τ : Relaxationszeit

f_0 : geeignete (gleichgewichts) Verteilung (kugelsymm)

Ohne elektr. oder magn. Felder und bei räumlicher Homogenität

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau} \longrightarrow f(t) = f_0 + (f(t=0) - f_0)\, e^{-t/\tau}$$

<u>Frage</u>:

Wann hat der Stoßterm die Form $-\frac{f - f_0}{\tau} = \frac{f_1 k \cos\Theta}{\tau}$?

<u>Näherungsannahmen</u>:

(a) Isotropes, nichtentart., parab. Band, isotrope Streuung

(b1) elast. Streuung : $W(\underline{k}', \underline{k}) = W(\underline{k}, \underline{k}')$

$$f_1(E_k) = f_1(E_{k'}) \;,\; k = k'$$

$$\mathcal{L} f_1 = \frac{1}{k\cos\Theta}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} = -f_1(E_k)\,\underbrace{\frac{V_g}{(2\pi)^3}\int d^3k'\, W(k,k')\left(1 - \frac{\cos\Theta'}{\cos\Theta}\right)}_{1/\tau}$$

akust. Phononen und Störstellenstreuung

(b_2) erinnerungslöschende Stöße ($W(\underline{k}',\underline{k})$ hängt nicht von der Richtung von k' ab)

$$\Rightarrow \int W(\underline{k}',\underline{k})\, f_1(E_{k'})\, k' \cos\theta\, d^3k' = 0$$

$$\Rightarrow \mathcal{L} f_1 = - f_1(E_k) \underbrace{\frac{V_g}{(2\pi)^3} \int W(\underline{k},\underline{k}')\, d^3k'}_{1/\tau}$$

(nichtpolare opt. Phononen)

NB: Eine Relaxationszeit existiert i.a. nicht für polare opt. Phononen Streuung (außer für $E_k \gg \hbar\omega$) und e-e Streuung

Energieabhängigkeit der Relaxationszeit τ:

Bei gegebenen Matrixelementen können Stoßintegrale ausgewertet werden:

Akust. Phononen: $\frac{1}{\tau} \sim E^{1/2}$

geladene Störstellen: $\frac{1}{\tau} \sim E^{-3/2}$

nichtpolar. opt. Phononen : $\frac{1}{\tau} \sim (N_0 + 1)\sqrt{E - \hbar\omega} + N_0 \sqrt{E + \hbar\omega}$

polare opt. Phononen für $E_k \gg \hbar\omega$: $\frac{1}{\tau} \sim E^{-1/2}$

In Relaxationszeitnäherung erhält man $f_1(E)$ aus (2)

$$-e\mathcal{E}\frac{\hbar}{m^*}\frac{df_0}{dE} = -\frac{f_1(E)}{\tau(E)}$$

$$\Rightarrow \boxed{f_1(E) = \frac{e\hbar}{m^*}\tau(E)\frac{df_0}{dE}\mathcal{E}}$$

Einsetzen in (1) liefert Dgl. für $f_0(E)$

$$\underbrace{-\frac{e^2\mathcal{E}^2}{m^*}\frac{2}{3}E^{-1/2}\frac{d}{dE}\left(E^{3/2}\tau(E)\frac{df_0}{dE}\right)}_{\mathcal{O}(\mathcal{E}^2)} = \left(\frac{\partial f_0}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}}$$

Lösung für kleine $\mathcal{E}$:
(l.S. vernachlässigt)

$$f_0(E) = \frac{1}{1+e^{\frac{E-E_F}{kT}}} \overset{\text{für Nichtentart.}}{\approx} e^{-\frac{(E-E_F)}{kT}}$$

(unabhängig von $\mathcal{E}$)

Bestimmung des Fermi Niveaus E_F aus Normierung:

$$n = \int f_0 \, 2\, d^3k = \int_0^\infty f_0(E)D(E)\,dE = e^{\frac{E_F}{kT}}\underbrace{\int_0^\infty e^{-E/kT}D(E)\,dE}_{N_c}$$

„eff. Zustandsdichte"

$$f_0(E) = \frac{n}{N_c(T)}e^{-E/kT}$$

Elektrische Stromdichte (isotrop. parab. Band)

$$\underline{j} = -e \int \underline{v}_g(k)\, f(k)\, 2\, d^3k$$

$$= \underbrace{-\frac{e}{m^*} \int \hbar \underline{k}\, f_0(k)\, 2\, d^3k}_{0} - \underbrace{\frac{e}{m^*} \int \hbar \underline{k}\, k \cos\Theta\, f_1(E)\, 2\, d^3k}_{x,y\text{-Komp. verschwindet}}$$

wegen Kugelsymm
von $f_0(k) = f_0(-k)$

$$j_z = -\frac{e}{m^*} \int_0^\infty \hbar k^2 f_1(E)\, 2\, k^2 dk \int_{-1}^{1} \cos^2\Theta\, d(\cos\Theta) \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= -\frac{e(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^4} \int E^{3/2} f_1(E)\, dE$$

Relaxationszeitnäherung für f_1

$$= \underbrace{+\frac{e^2}{m^*} \frac{(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^4} \int E^{3/2} \tau \frac{df_0}{dE}\, dE}_{\sigma \text{ Leitfähigkeit}} \cdot \mathcal{E}$$