5.3. Momentenentwicklung der Boltzmanngleichung

Ziel: • Hydrodynamische Bilanzgleichungen

• Beschreibung der Elektronen im Festkörper durch kleine Zahl langsam variierender Größen

Startpunkt: kinetische Boltzmanngleichung

• beschreibt detailliert k-abhängige Stoßprozesse

<u>Momente</u> der Verteilungsfunktion:

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

Physikalische Bedeutung:

$z = \frac{1}{(2\pi)^3}$

Teilchendichte $\quad n(\underline{r},t) = \int f(r,k,t)\, z\, d^3k$

Impulsdichte $\quad \underline{g}(\underline{r},t) = \int \hbar \underline{k}\, f(\underline{r},k,t)\, z\, d^3k$

Energiedichte $\quad u(\underline{r},t) = \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} f(\underline{r},\underline{k},t)\, z\, d^3k$

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

$$= \frac{\hbar^3}{2(m^*)^2} \int \underline{k}^3 f(\underline{r},k,t)\, z\, d^3k$$

- ohne elektrisches Feld
  Streuprozesse → Teilchenzahl, Energie & Impuls sind Erhaltungsgrößen

  → die entsprechenden Dichte $\varphi(\underline{r},t)$ und die zugehörigen Stromdichten $\underline{j}_\varphi(\underline{r},t)$ gehorchen makr. Kontinuitätsgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi + \nabla_r \underline{j}_\varphi = 0$$

- Formel enthält die Menge aller Momente dieselbe Information wie Verteilungsfunktion selbst:

Fouriertransformation: $f(\underline{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx}\hat{f}(x)\,dx$

(für eine Dimension)

Rücktransformation:

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{ikx} f(k)\,dk \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\langle e^{ikx}\rangle$$

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 Bilanzgleichungen für die Momente lassen sich aus der Boltzmanngleichung

$$\frac{\partial f(\underline{r},k,t)}{\partial t} + \underline{v}_g(k) \underline{\nabla}_r f(\underline{r},k,t) - \frac{e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar} \underline{\nabla}_k f(\underline{r},\underline{k},t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{stoß}$$

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

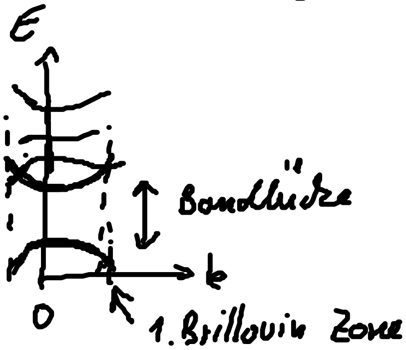
(*)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi \rangle_n + \underline{\nabla}_r \langle \phi \underline{v}_g \rangle_n + \underbrace{\frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \langle \underline{\nabla}_k \phi(k) \rangle_n}_{1} = \underbrace{\int \phi(k) \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{stoß} zd^3k}_{J(\phi)}$$

mit $\langle \phi \rangle_n = \int \phi(k) f(r,k,t)\, zd^3k = \varphi(\underline{r},t)$

Energie, Teilchen, Impulsdichte

$$① \int \phi (\nabla_k f)\, z\, d^3k = -\int (\nabla_k \phi)\, f\, z\, d^3k + \underbrace{\int \nabla_k (\phi f)\, z\, d^3k}_{0}$$



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

Die Momentengleichung 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 <u>Hierarchie</u> von DGLs

<u>Abbruch durch Näherungsannahmen</u>

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

oder

(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

(Nachteil: höhere zentrale Momente $(k - \langle k \rangle)^m$ $m > 2$ verschwinden
→ keine Bilanzgleichung für Wärmestromdichte

<u>oder</u> $f(\underline{k}) = f_0(\underline{k}) + f_1(k)\, k_z$ entspricht den ersten 2 Termen einer Legendre Entwicklung

Speziell wählen wir:

<u>$m=0$</u> $\phi(k) = 1$, $\langle \phi \rangle_n = n(r,t)$

Impulsdichte

<u>$m=1$</u> $\phi_i(k) = \hbar k_i$, $\hbar \langle k \rangle_n = \underline{g}(r,t) = n(r,t)\, \underline{p}(\underline{r},t)$

mittl. Impuls pro Teilchen

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

mittlere Geschwindigkeit $\underline{v} = \langle \underline{v}_g \rangle$

Energiedichte

<u>$m=2$</u> $\phi(\underline{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ $u(\underline{r},t) = n(\underline{r},t)\, \bar{E}(r,t)$

mittlere Energie pro Teilchen

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

Dabei wurde die Elektronentemperatur T_e definiert durch

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

$$= \frac{m^*}{2}\langle(v_g - \langle \underline{v}_g\rangle)^2\rangle$$ Varianz der mikrosk. Geschw.

weitere Terme in Bilanzgleichungen (*)

(i) Impulsstromdichte

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

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

Mittelwert

Varianz

$$= \underbrace{\nabla_r(n\underline{v})p_i + (n\underline{v}\nabla_r)p_i} + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j}(nkT_{ij})$$

Divergenz des Temperaturtensors

konvektive Terme

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

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

(ii) Energiestromdichte ϑ

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

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

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

$$- 2 \langle (v_g \langle v_g \rangle)(v_i - \langle v_i \rangle) \rangle$$

$$+ 2 \langle v_g \langle v_g \rangle)(v_i - \langle v_i \rangle)) \rangle$$

$$+ \langle \langle v_g \rangle^2 (v_i - \langle v_i \rangle) \rangle \Big\}$$

$$= \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Konvektion}}}{n \bar{E} v_i} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Wärmestromdichte}}}{j_{Q,i}} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Elektronendruck - Fluss}}}{\sum_{j=1}^{3} n k T_{ij} v_j}$$

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

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

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

Damit folgt aus (*')

$$\boxed{\begin{aligned}
&① \frac{\partial}{\partial t} n + \underline{\nabla}_r (n\underline{v}) = \int \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{Stoß} 2d^3k \\
&② \frac{\partial}{\partial t}(n\underline{p}) + \left[\underline{\nabla}_r (n\underline{v})\right]\underline{p} + (n\underline{v}\,\nabla_r)p = -\mathrm{Div}(nk\underline{\underline{T}}) - en\underline{\mathcal{E}} + \int \hbar\underline{k}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} 2d^3k \\
&③ \frac{\partial}{\partial t}(n\bar{E}) + \nabla_r(n\underline{v}\bar{E}) = -\underline{\nabla}_r(nk\underline{\underline{T}}\,\underline{v}) - \nabla_r j_Q - en\underline{v}\,\underline{\mathcal{E}} + \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_S 2d^3k
\end{aligned}}$$

- Gln. ① – ③ haben die Form von Kontinuitätsgleichungen wobei die rechte Seite die Quellterme darstellen:

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

Energiegewinn " $(-e)n\underline{v}\,\underline{E} = \underline{j}\,\underline{E}$ (Joulsche Wärme)

- Teilchenzahländerung durch Generation u. Rekombination (insbes. Stoßionisation) : $J_0 := \int \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} 2\,d^3k$ (g-r Rate)

- Impulsrelaxation durch Streuung $J_1 := \int \hbar\underline{k} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} 2\,d^3k$

  (Impulsrelax. rate)

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

Wegen der Stoßterme J_0, J_1, J_2 und weil ein drittes Moment (j_Q) und nichtdiagonale 2. Momente (T_{ij}) angekoppelt sind

$\longrightarrow$ kein geschlossenes Gleichungssystem