

Квазиклассическая теория
динамики электрона.
Кинетическая теория
Больцмана

Огибающая слабо меняется на характерных макроскопических размерах и длина волны деБройля меньше характерного размера. Тогда из функций Блоха можно сформировать волновой пакет с хорошо определенным квазиимпульсом, локализованный на длинах, существенно меньших характерных размеров, и который не успевает размываться на характерных длинах. Тогда динамику электронов можно рассматривать как динамику центров этих волновых пакетов. Центры волновых пакетов движутся также как и классические частицы с функцией Гамильтона, которая получается заменой оператора импульса на импульс.

Таким образом, мы можем рассматривать электроны как классические частицы с функцией Гамильтона

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = E(\mathbf{p}) + V_{ext}(\mathbf{r}) \xleftarrow{\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \mathbf{p}} \hat{H} = E(\hat{\mathbf{p}}) + V_{ext}(\mathbf{r})$$

Уравнения Гамильтона

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\nabla V_{ext}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_{ext}$$

Электрон в постоянном однородном электрическом поле. Осцилляции Блоха.

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e\mathbf{F} \Rightarrow \mathbf{p} = \mathbf{p}_0 - e\mathbf{F}t$$

$$E(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p} + \mathbf{G}) \Rightarrow \text{энергия осциллирует}$$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = v(-e\mathbf{F}) \Rightarrow v = -\frac{1}{eF} \frac{dE}{dt}$$

$$v = \frac{dx}{dt} \Rightarrow \frac{dx}{dt} = -\frac{1}{eF} \frac{dE}{dt}$$

$$x(t) = x_0 - \frac{E(\mathbf{p}_0 - e\mathbf{F}t)}{eF} \quad \begin{array}{l} \text{-Электрон осциллирует в реальном пространстве} \\ \Rightarrow \text{в идеальном кристалле нет тока} \end{array}$$

Амплитуда осцилляций

$$x_{\max} = \frac{\Delta}{eF} \Rightarrow \frac{x_{\max}}{a} = \frac{\Delta}{eFa} \gg 1$$

Период осцилляций

$$\left. \begin{array}{l} eF\tau = L_{\text{з.Б.}} \\ L_{\text{з.Б.}} \propto \pi \hbar / a \end{array} \right| \Rightarrow \tau \propto \frac{\hbar}{eFa} \ll \tau_{\text{рел}} \quad \begin{array}{l} \text{- В реальных кристаллах осцилляции не} \\ \text{наблюдаются} \end{array}$$

$$F_{mp} = -\eta \mathbf{v}, \quad \eta > 0$$

$$m \dot{\mathbf{v}} = -e\mathbf{F} - \eta \mathbf{v}$$

$$\dot{v} + \frac{1}{\tau} v = -\frac{eF}{m}; \quad \frac{1}{\tau} = \frac{\eta}{m}$$

$$v_{0,0} = C \exp(-t/\tau)$$

$$v_{u,H} = \gamma = \text{const} \rightarrow \dot{v} + \frac{1}{\tau} v = -\frac{eF}{m} \rightarrow \gamma = -\frac{eF\tau}{m}$$

$$v(t) = C \exp(-t/\tau) - \frac{eF\tau}{m}$$

$$v(0) = 0 \Rightarrow \mathbf{v}(t) = -\frac{e\mathbf{F}\tau}{m} [1 - \exp(-t/\tau)]$$

$$\mathbf{v}(t \gg \tau) = -\frac{e\tau}{m} \mathbf{F} \quad \text{- Сопротивление (рассеяние) приводит к установлению направленного движения}$$

$$\mathbf{j} = -e\mathbf{v}n = \frac{e^2 n \tau}{m} \mathbf{F} \quad \text{- Формула Друде}$$

Огибающая медленно изменяется на характерных размерах => можно перейти к квазиклассическому описанию => электроны рассматриваем как классические частицы с функцией Гамильтона

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = E(\mathbf{p}) + V_{ext}(\mathbf{r})$$

$E(\mathbf{p})$ - блоховский закон дисперсии

$V_{ext}(\mathbf{r})$ - потенциальная энергия во внешнем поле

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad - \text{Скорость движения в реальном пространстве}$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\nabla V_{ext}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_{ext} \quad - \text{уравнение движения (определяет закон изменения квазиимпульса)}$$

Соотношение неопределенности Гейзенберга => механическое состояние определено с точностью до ячейки фазового пространства $(2\pi\hbar)^3$

Принцип Паули => в ячейке может находиться только один электрон с данной проекцией спина

$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)$ - Одноэлектронная функция распределения – вероятность нахождения электрона с проекцией спина s_z в ячейке $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ фазового пространства (среднее число электронов с данной проекцией спина в данной ячейке фазового пространства)

Концентрация электронов

Разбиваем фазовое пространство на физически бесконечно малые объемы $d\mathbf{r}d\mathbf{p}$ (с одной стороны попадает много ячеек и можно пользоваться статистическими методами, с другой стороны – все характеристики внутри объема можно считать постоянными)

$\frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$ - Число ячеек в объеме $d\mathbf{r}d\mathbf{p}$

$dN(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_{s_z=\pm 1/2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z) \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$ - число частиц в элементарном объеме $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$

$N = \int_V dN(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int_V d\mathbf{r} \int_{\text{зона Б.}} \sum_{s_z=\pm 1/2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$ - Число частиц в объеме V реального пространства

$n(\mathbf{r}) = \int_{\text{зона Б.}} \sum_{s_z=\pm 1/2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$ - концентрация

Плотность электрического тока

$$d\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = -e\mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{dN(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{dV} =$$

$$= -e\mathbf{v}(\mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

- Вклад в плотность тока электронов из элементарного объема $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ фазового пространства

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \int_{\text{зоне } B.} d\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = -e \int_{\text{зоне } B.} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad \text{- Плотность электрического тока}$$

Плотность потока энергии

$$-e \rightarrow H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$$

$$\mathbf{I}(\mathbf{r}) = \int_{\text{зоне } B.} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \mathbf{v}(\mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

Кинетическое уравнение Больцмана

Определяет одночастичную функцию распределения

По сути – уравнение непрерывности в одночастичном фазовом пространстве.

Каждый электрон в каждый момент времени изображается точкой фазового пространства. Движение электронов в реальном пространстве описывается уравнениями Гамильтона

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}; \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \quad - \text{Также описывают движение изображающих точек в фазовом пространстве}$$

Вместо реальных электронов в реальном пространстве можно рассмотреть движение изображающих точек в фазовом пространстве – эффективных 6D электронов

(x, y, z, p_x, p_y, p_z) - координаты 6D электронов

$(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}, \dot{p}_x, \dot{p}_y, \dot{p}_z)$ - Скорости 6D электронов

$f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ - плотность 6D электронов в фазовом пространстве

Число электронов сохраняется => можно написать уравнение непрерывности
(математическая запись закона сохранения числа электронов)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(f \dot{x}_i \right) + \frac{\partial}{\partial p_i} \left(f \dot{p}_i \right) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial x_i} \dot{x}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i + f \left[\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial x_i} \right] = 0$$

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \Rightarrow \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial H}{\partial x_i \partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} \Rightarrow \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} = -\frac{\partial H}{\partial p_i \partial x_i} \end{aligned} \right| \Rightarrow \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial x_i} \dot{x}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i = 0 \Rightarrow \frac{df}{dt} = 0$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \dot{\mathbf{p}} &= 0 \\ \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{p}) &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} &= \mathbf{F}_{ext} \end{aligned} \right| \Rightarrow \boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}_{ext} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}_{ext} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0 \propto \frac{df}{dt} = 0$$

$\frac{\partial f}{\partial t}$ - Обусловлен временной неоднородностью в системе (изменением внешних условий, перераспределением зарядов и энергии и т.п.)

$\mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}$ - Дрейфовый член (отвечает за дрейф, вызванный пространственной неоднородностью в системе – градиентом концентрации, температуры и т.п.)

$\mathbf{F}_{ext} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}$ - полевой член (отвечает за ускорение электронов во внешних полях)

Учет рассеяния

$$\frac{df}{dt} = J_{cm}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$$

$$J_{cm}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{d\bar{N}_{\text{прих}}}{dt} - \frac{d\bar{N}_{\text{уход}}}{dt} \quad \text{- Интеграл столкновений – обусловленное рассеянием изменение среднего числа частиц в ячейке } (\mathbf{r}, \mathbf{p})$$

Нужно ли учитывать изменение координаты при рассеянии?

Квант. мех-ка. – Не имеет смысла. Рассеяние – скачкообразный переход из одного состояния в другое

Класс.мех-ка.- Нет смысла. Силы быстро убывают при удалении от рассеивателя
=> Рассеяние происходит в столь малом объеме, что нет смысла говорить об изменении координат.

При рассеянии изменяется квазиимпульс, но не изменяется координата.
Рассеяние – скачок между ячейками $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ и $(\mathbf{r}, \mathbf{p}')$ с одним и тем же $\mathbf{r}$

$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ - Вероятность в единицу времени рассеяния $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'$

$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')] -$ Среднее число в единицу времени актов рассеяния $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'$

Среднее число электр., рассеивающихся в ед. времени из ячейки $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$

$$\frac{d\bar{N}_{\text{уход}}}{dt} = \int_{\text{зоне } B.} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')]]$$

Среднее число электр., рассеивающихся в ед. времени в ячейку $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$

$$\frac{d\bar{N}_{\text{приход}}}{dt} = \int_{\text{зоне } B.} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})]$$

$$J_{ct} = \int_{\text{зоне } B.} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \{ W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})] - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')] \}$$

Принцип детального равновесия

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}_{ext} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = J_{cm}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$$

$$\text{В равновесии} \quad f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - \mu}{T}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right) + 1}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right) + 1\right]^2} \left(-\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}\right) = \frac{\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right) + 1\right]^2} \mathbf{F}_{ext}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right) + 1\right]^2} \left(\frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}\right) = -\frac{\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right) + 1\right]^2} \mathbf{v}(\mathbf{p})$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}_{ext} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cong 0 \Rightarrow J_{cm}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv 0$$

$$\int_{\text{зоне Б.}} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')] \equiv \int_{\text{зоне Б.}} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})]$$

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')] = W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})]$$

Поток из ячейки $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ в ячейку $(\mathbf{r}, \mathbf{p}')$ уравнивается обратным потоком

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}) - \mu}{T}\right) + 1} \rightarrow W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')] = W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})]$$

$$\frac{W(\mathbf{p}', \mathbf{p})}{W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')} = \exp\left(\frac{E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p})}{T}\right)$$

1) упругое рассеяние $E(\mathbf{p}') = E(\mathbf{p}) \Rightarrow W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$

2) неупругое рассеяние $E(\mathbf{p}') > E(\mathbf{p}) \Rightarrow W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) > W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$

Более вероятен процесс с уменьшением энергии $\Rightarrow$ релаксация

Двухчастичное рассеяние

$$J_{ст} = \int_{\text{зоне } B.} \frac{d\mathbf{p}'_1 d\mathbf{p}'_2 d\mathbf{p}_1}{(2\pi\hbar)^9} W(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}) f(\mathbf{p}'_1) f(\mathbf{p}'_2) [1 - f(\mathbf{p}_1)] [1 - f(\mathbf{p})] -$$
$$- \int_{\text{зоне } B.} \frac{d\mathbf{p}'_1 d\mathbf{p}'_2 d\mathbf{p}_1}{(2\pi\hbar)^9} W(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}; \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2) f(\mathbf{p}_1) f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}_1) f(\mathbf{p}'_1)] [1 - f(\mathbf{p}'_2)]$$

Условия применимости уравнения Больцмана

- 1) Используется концепция ферми-газа: пренебрегается корреляциями между электронами и вводится одноэлектронная функция распределения. Электрон-электронное взаимодействие трактуется как рассеяние.
- 2) Уравнение Больцмана – продукт квазиклассической теории.

Малые отклонения от равновесия

Приложив внешний потенциал, создав градиент температуры или концентрации мы выводим систему из равновесия. При этом уровень Ферми (химический потенциал) и температура становятся зависящими от координаты. Запишем функцию распределения в виде

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})$$

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi(\mathbf{r}) - F(\mathbf{r})}{T(\mathbf{r})}\right) + 1} \quad \text{- Функция Ферми с зависящими от координат хим. потенциалом } F(\mathbf{r}) \text{ и температурой } T(\mathbf{r})$$

f_1 - Новая функция, которую нужно определять из кинетического уравнения

$$\mathbf{j} = -2e \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}) = -2e \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f_0(\mathbf{p}) - 2e \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p})$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \left. \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \right| \Rightarrow \mathbf{v}(-\mathbf{p}) = -\mathbf{v}(\mathbf{p})$$

$$\varepsilon(-\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p})$$

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{v}(-\mathbf{p}) = -\mathbf{v}(\mathbf{p}) \\ f_0(-\mathbf{p}) = f_0(\mathbf{p}) \end{array} \right| \Rightarrow \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f_0(\mathbf{p}) = 0$$

$$\mathbf{j} = -2e \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p})$$

$$\mathbf{I} = 2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) H(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}) = 2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) H(\mathbf{p}) f_0(\mathbf{p}) + 2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) H(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p})$$

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \\ E(-\mathbf{p}) = E(\mathbf{p}) \end{array} \right| \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \mathbf{v}(-\mathbf{p}) = -\mathbf{v}(\mathbf{p}) \\ H(-\mathbf{p}, \mathbf{r}) = H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \end{array} \right| \Rightarrow \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) H(\mathbf{p}) f_0(\mathbf{p}) = 0$$

$$\mathbf{I} = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) H(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p})$$

Кинетические характеристики определяются поправкой f_1

$$\mathbf{j} = -2e \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p}); \quad \mathbf{I} = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) H(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p})$$

Во многих важных для практики случаях кинетические характеристики $\mathbf{j}, \mathbf{I}$ имеют локальный пространственно-временной характер – их значения в данный момент времени и в данной точке пространства определяются значениями внешних полей, ∇T и ∇n в данный момент времени в данной точке пространства. Кроме того, характер зависимости $\mathbf{j}, \mathbf{I}$ от внешних полей, ∇T и ∇n оказывается линейным. В этом случае можно считать, что добавка $f_1(\mathbf{r}, t)$ линейно зависит от внешних полей, ∇T и ∇n в момент времени t в точке $\mathbf{r}$ – **локально-линейное приближение**.

Для того, чтобы локально-линейное приближение было справедливо нужно:

- 1) На длине свободного пробега и за время свободного пробега внешних полей, ∇T и ∇n менялись слабо (изменение было существенно меньше самих значений)
- 2) Длина и время, на котором электрон приобретает существенную энергию (порядка T) $\gg$ длины и времени свободного пробега

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \left(-e\mathbf{E} - \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = J[f];$$

$$f = f_0 + f_1; \quad f_0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi(\mathbf{r}) - F(\mathbf{r})}{T(\mathbf{r})}\right) + 1}$$

$$\mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} + \left(-e\mathbf{E} - \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} + \left(-e\mathbf{E} - \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = J[f]$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} T \nabla \left[\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi(\mathbf{r}) - F(\mathbf{r})}{T(\mathbf{r})} \right] = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left[-e\nabla\varphi - \nabla F - \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi - F}{T} \nabla T \right]$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nabla \varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} &= \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left[-e\nabla\varphi \mathbf{v} - \nabla F \mathbf{v} - \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi - F}{T} \nabla T \mathbf{v} - e\mathbf{E} \mathbf{v} \right] = \\ &= \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left[-\mathbf{v} \nabla F - \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi - F}{T} \mathbf{v} \nabla T \right] \quad - \text{линеен по градиентам} \end{aligned}$$

Отбрасываем $\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} + \left(-e\mathbf{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}}$ - более высокий порядок малости

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Rightarrow \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}] \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \frac{e}{c} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \mathbf{v} [\mathbf{v}, \mathbf{H}] = 0$$

Магнитное поле само по себе не нарушает равновесие. Чтобы сохранить информацию о магнитном поле нужно в магнитном члене оставлять поправку f_1

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left[-\mathbf{v} \nabla F - \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi - F}{T} \mathbf{v} \nabla T \right] + \mathbf{v} \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}] \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = J[f]$$

$\mathbf{E}' = \frac{1}{e} \nabla F$ - играет роль электрического поля (учитывает как внешнее электрическое поле, так и электрическое поле, обусловленное перераспределением носителей заряда)

$$\nabla T = 0 \rightarrow \mathbf{j} \propto \nabla F$$

$$\left. \begin{array}{l} \nabla F = 0 \\ \nabla T = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \mathbf{j} = 0 \quad - \text{равновесие}$$

Условие равновесия



Интеграл столкновений для упругого рассеяния. Время релаксации импульса (транспортное время релаксации)

Кин. ур. Больцмана остается интегро-дифференциальное уравнением даже в локально-линейном приближении. «Точное» решение сопряжено с математическими трудностями. => Нужно искать приближения

- 1) Часто можно пренебречь вероятностью изменения спина при рассеянии, а также различием в вероятностях рассеяния электронов с разными значениями проекции спина. В такой ситуации можно рассматривать только частицы с одной проекцией спина. Учет двух возможных направлений спина сводится к умножению соответствующих величин на 2.
- 2) Часто рассеяние носит практически упругий характер. Масса структурных дефектов (примесей, дислокаций и т.п.) >> массы электронов => при рассеянии на структурных дефектах может сильно измениться импульс, а изменение энергии – мало (для большинства электронов существенно меньше самой энергии). При рассеянии на LA-фононах изменение энергии электрона порядка $(m/M)^{1/2}$. Поэтому при вычислении вероятности рассеяния на длиноволновых акустических фононах можно рассматривать как упругое.

Часто при вычислении вероятностей все процессы рассеяния можно считать упругими. Это приближение – изменение энергии при рассеянии должно происходить существенно медленнее изменения импульса. В этом случае при вычислении интеграла столкновений можно рассматривать только упругие процессы рассеяния. Релаксация энергии будет проявляться в том, что f_1 – малая поправка к f_0

$$\text{Принцип детального равновесия} \Rightarrow \frac{W(\mathbf{p}', \mathbf{p})}{W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')} = \exp\left(\frac{E(\mathbf{p}') - E(\mathbf{p})}{T}\right)$$

$$\text{упругое рассеяние } E(\mathbf{p}') = E(\mathbf{p}) \Rightarrow W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$$

$$\begin{aligned} J &= \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})] - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')] = \\ &= \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p}') f(\mathbf{p}) - f(\mathbf{p}) + f(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}')] \end{aligned}$$

$$\text{Упругость рассеяния} \Rightarrow J = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) [f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})]$$

Линеен по функции распределения (как если бы не было принципа Паули)

1) Носители заряда в постоянном и однородном электрическом поле

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{p}, \mathbf{E} - \text{векторы} \\ f_1 - \text{скаляр} \end{array} \right| \Rightarrow f_1 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \chi(\varepsilon(\mathbf{p}))$$

$\chi(\varepsilon(\mathbf{p}))$ - неизвестная функция, подлежащая определению

2) Носители заряда в постоянном и однородном температурном поле

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{p}, \nabla T, \mathbf{E}' - \text{векторы} \\ f_1 - \text{скаляр} \end{array} \right| \Rightarrow f_1 = \mathbf{p} \cdot \nabla T \chi_1(\varepsilon(\mathbf{p})) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}' \chi_2(\varepsilon(\mathbf{p}))$$

$\chi_1(\varepsilon(\mathbf{p})), \chi_2(\varepsilon(\mathbf{p}))$ - неизвестные функции, подлежащие определению

3) Носители заряда в постоянных и однородных электрическом и магнитном полях

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{p}, \mathbf{E}, [\mathbf{E}, \mathbf{H}], (\mathbf{E}\mathbf{H})\mathbf{H} - \text{векторы} \\ f_1 - \text{скаляр} \end{array} \right| \Rightarrow f_1 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \chi_2(\varepsilon(\mathbf{p})) + \mathbf{p} \cdot [\mathbf{E}, \mathbf{H}] \chi_2(\varepsilon(\mathbf{p})) + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{H})(\mathbf{E}\mathbf{H}) \chi_3(\varepsilon(\mathbf{p}))$$

$\chi_1(\varepsilon(\mathbf{p})), \chi_2(\varepsilon(\mathbf{p})), \chi_3(\varepsilon(\mathbf{p}))$ - неизвестные функции, подлежащие определению

В общем случае (когда есть и электрическое, и магнитное поле и градиент температуры)

$$f_1 = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\xi}(\varepsilon(\mathbf{p}))$$

$\boldsymbol{\xi}(\varepsilon(\mathbf{p}))$ - Линейная комбинация векторов, характеризующих внешнее воздействие

$$J = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) [f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})]$$

$$f = f_0(\varepsilon(\mathbf{p})) + f_1; \quad f_0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi - F}{T}\right) + 1}; \quad f_1 = \mathbf{p}\boldsymbol{\xi}(\varepsilon(\mathbf{p}))$$

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}') \Rightarrow [f_0(\mathbf{p}') - f_0(\mathbf{p})] = 0$$

$$[f_0(\mathbf{p}') - f_0(\mathbf{p})] = [\mathbf{p}'\boldsymbol{\xi}(\varepsilon(\mathbf{p})) - \mathbf{p}\boldsymbol{\xi}(\varepsilon(\mathbf{p}))] = \boldsymbol{\xi}(\varepsilon(\mathbf{p})) [p'_\xi - p_\xi] =$$

$$= -\boldsymbol{\xi}(\varepsilon(\mathbf{p})) p_\xi \left[1 - \frac{p'_\xi}{p_\xi} \right] = -f_1(\mathbf{p}) \left[1 - \frac{p'_\xi}{p_\xi} \right]; \quad p_\xi - \text{проекция } \mathbf{p} \text{ на } \xi$$

$$J = - \left\{ \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \left[1 - \frac{p'_\xi}{p_\xi} \right] \right\} \cdot f_1(\mathbf{p})$$

$$J = -\frac{f_1(\mathbf{p})}{\tau(\mathbf{p})}; \quad \frac{1}{\tau(\mathbf{p})} = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \left[1 - \frac{p'_\xi}{p_\xi} \right] \quad \begin{array}{l} \text{- время релаксации импульса} \\ \text{(транспортное время} \\ \text{релаксации)} \end{array}$$

Пример. Электропроводность в однородном образце при наличии только постоянного и однородного электрического поля

$$\left. \begin{array}{l} \text{поле} - \text{стационарное} \\ \text{образец} - \text{однородный} \end{array} \right| \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \text{ и } \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = 0$$

$$-e\mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f_1(\mathbf{p})}{\tau(\mathbf{p})} \Rightarrow f_1(\mathbf{p}) = e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Rightarrow f_1(\mathbf{p}) = e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E}\mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

$$\mathbf{j} = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f_1(\mathbf{p}) = -\frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \tau(\mathbf{p}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \mathbf{v} \cdot (\mathbf{E}\mathbf{v})$$

$$j_\alpha = -\frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \tau(\mathbf{p}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_\alpha \cdot (\mathbf{E}\mathbf{v}) = \sum_\beta \left[-\frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \tau(\mathbf{p}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_\alpha v_\beta \right] E_\beta$$

$$j_\alpha = \sum_\beta \sigma_{\alpha,\beta} E_\beta; \quad \sigma_{\alpha,\beta} = -\frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \tau(\mathbf{p}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_\alpha v_\beta \quad - \text{тензор электропроводности}$$

$$\text{Нет рассеяния} \Rightarrow \tau = \infty \Rightarrow \mathbf{j} = 0$$

τ определяет направленный перенос электронов $\Rightarrow$ транспортное время

Почему время релаксации?

Однородный образец вывели из равновесия электрическим полем, и в момент $t=0$ поле выключили. За какое время установится равновесие?

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -\frac{f_1}{\tau} \Rightarrow f_1(t) = f_1(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \Rightarrow \tau \quad - \text{ время релаксации}$$

$$\bar{p}(t) = \int \frac{V d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} f_1 \propto \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \Rightarrow \tau \quad - \text{ время релаксации импульса}$$

Изотропные невырожденные изоэнергетические поверхности (полезно для качественных оценок и оценок по порядку величины)

$$\varepsilon = \varepsilon(p) \Rightarrow p = p(\varepsilon)$$

$$\text{Рассеяние упругое} \Rightarrow W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta(\varepsilon(p') - \varepsilon(p))$$

$$\left. \begin{array}{l} S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') - \text{скаляр} \\ \mathbf{p}, \mathbf{p}' - \text{векторы} \end{array} \right| \Rightarrow S \text{ может зависеть только от скалярных комбинаций } \mathbf{p} \text{ и } \mathbf{p}'$$

$$p, p', \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = pp' \cos \theta, \varepsilon(p), \varepsilon(p') - \text{независимые скалярные комбинации } \mathbf{p} \text{ и } \mathbf{p}'$$

Рассеяние происходит в пределах одной изоэнергетической поверхности $\Rightarrow p=p' \Rightarrow$ остается только две независимые скалярные комбинации.

$$S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = S(\varepsilon(p), \cos \theta)$$

$$\frac{1}{\tau} = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} S(\varepsilon(p), \cos \theta) \delta(\varepsilon(p') - \varepsilon(p)) \left[1 - \frac{p'_\xi}{p_\xi} \right]$$

Будем сначала интегрировать по изоэнергетическим поверхностям, а потом по E

$$d\mathbf{p}' = dS d\eta, \quad \eta$$

$$d\varepsilon = (\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})) d\eta, \quad \mathbf{n}$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) = |\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})| \Rightarrow d\eta = \frac{d\varepsilon}{|\nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p})|} = \frac{d\varepsilon}{|\mathbf{v}|}$$

$$\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(p) = \sum_{\alpha} \frac{\partial \varepsilon(p)}{\partial p_{\alpha}} \mathbf{e}_{\alpha} = \sum_{\alpha} \frac{d\varepsilon(p)}{dp} \frac{\partial p}{\partial p_{\alpha}} \mathbf{e}_{\alpha} = \frac{d\varepsilon(p)}{dp} \sum_{\alpha} \frac{p_{\alpha}}{p} \mathbf{e}_{\alpha} =$$

$$= \frac{d\varepsilon(p)}{dp} \frac{\mathbf{p}}{p} \Rightarrow |\mathbf{v}| = v(\varepsilon(p)) = \left| \frac{d\varepsilon(p)}{dp} \right|$$

$$dS = p'^2(\varepsilon') \sin \theta d\theta d\varphi \Rightarrow d\mathbf{p}' = dS d\eta = \frac{p'^2(\varepsilon') \sin \theta d\theta d\varphi d\varepsilon'}{v(\varepsilon')}$$

$$\frac{1}{\tau} = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \left[1 - \frac{p'_{\xi}}{p_{\xi}} \right] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \sin \theta d\theta d\varphi \int d\varepsilon' \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{p'^2(\varepsilon')}{v(\varepsilon')} S(\varepsilon', \cos \theta) \left[1 - \frac{p'(\varepsilon') \cos(\mathbf{p}', \boldsymbol{\xi})}{p(\varepsilon) \cos(\mathbf{p}, \boldsymbol{\xi})} \right] =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \sin \theta d\theta d\varphi \frac{p'^2(\varepsilon)}{v(\varepsilon)} S(\varepsilon, \cos \theta) \left[1 - \frac{p'(\varepsilon) \cos(\mathbf{p}', \boldsymbol{\xi})}{p(\varepsilon) \cos(\mathbf{p}, \boldsymbol{\xi})} \right]$$

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{p^2(\varepsilon)}{v(\varepsilon)} S(\varepsilon, \cos \theta) \int \sin \theta d\theta d\varphi \left[1 - \frac{\cos(\mathbf{p}', \xi)}{\cos(\mathbf{p}, \xi)} \right]$$

образующая ось ССК – по $\mathbf{p}$

(θ, φ) – угловые координаты $\mathbf{p}'$

(α, β) – угловые координаты $\mathbf{p}$

$$\cos(\mathbf{p}, \xi) = \cos \alpha; \quad \cos(\mathbf{p}', \xi) = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta)$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi = 0 \Rightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi \left[1 - \frac{\cos(\mathbf{p}', \xi)}{\cos(\mathbf{p}, \xi)} \right] = 2\pi [1 - \cos \theta]$$

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{p^2(\varepsilon)}{v(\varepsilon)} S(\varepsilon, \cos \theta) \int d\theta \sin \theta [1 - \cos \theta]$$

Потоки, создаваемые электронами вблизи потолка валентной зоны. Концепция дырок.

$$\begin{aligned}\mathbf{j}(\mathbf{r}) &= -e \int_{\text{зона Б.}} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = -e \int_{\text{зона Б.}} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} [1 - 1 + f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= -2e \int_{\text{зона Б.}} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} + e \int_{\text{зона Б.}} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}\end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned}\mathbf{v}(\mathbf{p}) &= \frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \\ E(-\mathbf{p}) &= E(\mathbf{p})\end{aligned} \right| \Rightarrow \mathbf{v}(-\mathbf{p}) = -\mathbf{v}(\mathbf{p}) \Rightarrow e \int_{\text{зона Б.}} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = 0$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = e \int_{\text{зона Б.}} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{I}(\mathbf{r}) &= \int_{\text{зона Б.}} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \int_{\text{зона Б.}} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \sum_{s_z=\pm 1/2} [1 - 1 + f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= 2e \int_{\text{зона Б.}} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} + \int_{\text{зона Б.}} [-H(\mathbf{r}, \mathbf{p})] \sum_{s_z=\pm 1/2} [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}\end{aligned}$$

$$H(\mathbf{r}, -\mathbf{p}) = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \Rightarrow 2e \int_{\text{зона Б.}} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = 0$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = e \int_{\text{зоне } B.} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \sum_{s_z = \pm 1/2} [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\mathbf{I}(\mathbf{r}) = \int_{\text{зоне } B.} [-H(\mathbf{r}, \mathbf{p})] \sum_{s_z = \pm 1/2} [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

$[1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, s_z)]$ - вероятность того, что в ячейке $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ нет электрона с проекцией спина s_z

Поток заряда и энергии такой, как если бы он создавался положительными частицами с зарядом e и энергией $-H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, которые движутся в реальном пространстве со скоростью $\mathbf{v}(\mathbf{p})$, и которые распределены в пространстве также как и пустые места, незанятые электронами. Эти квазичастицы – дырки.

Вместо газа электронов можно рассматривать газ дырок. С точки зрения явлений переноса электронный и дырочный языки полностью эквивалентны – приводят к одним и тем же значениям потоков

Диффузионный и дрейфовый токи. Соотношения Эйнштейна

На однородный образец наложим электрическое поле – возник направленный поток электронов – дрейфовый ток

$$\mathbf{j}_{n, \text{др}} = -en\mathbf{v}_{\text{др}}$$

В локально – линейном приближении и $v_{\text{др}, \alpha} = \sum_{\beta} \mu_{\alpha, \beta} E_{\beta}$, где $\mu_{\alpha, \beta}$ – тензор подвижности

$$(\mathbf{j}_{n, \text{др}})_{\alpha} = -en \sum_{\beta} \mu_{\alpha, \beta} E_{\beta}$$

Если распределение электронов неоднородно, то возникает дрейфовый ток

$$\mathbf{j}_{n, \text{диф}} = -en\mathbf{v}_{\text{диф}}$$

В локально – линейном приближении и $v_{\text{диф}, \alpha} = -\sum_{\beta} \frac{1}{n} D_{\alpha, \beta} \frac{\partial n}{\partial x_{\beta}}$, где $D_{\alpha, \beta}$

$$(\mathbf{j}_{n, \text{дрейф}})_{\alpha} = e \sum_{\beta} D_{\alpha, \beta} \frac{\partial n}{\partial x_{\beta}}$$

Частицы диффундируют туда, где их меньше $\Rightarrow \mathbf{v}_{\text{диф}} \uparrow \downarrow \nabla n$

Полный ток в неоднородном образце

а) электронов

$$j_{n,\alpha} = (\mathbf{j}_{n,\partial p})_{\alpha} + (\mathbf{j}_{n,\text{диф}})_{\alpha} = -en \sum_{\beta} (\mu_n)_{\alpha,\beta} E_{\beta} + e \sum_{\beta} (D_n)_{\alpha,\beta} \frac{\partial n}{\partial x_{\beta}}$$

б) дырок

$$j_{p,\alpha} = (\mathbf{j}_{p,\partial p})_{\alpha} + (\mathbf{j}_{p,\text{диф}})_{\alpha} = ep \sum_{\beta} (\mu_p)_{\alpha,\beta} E_{\beta} + e \sum_{\beta} (D_p)_{\alpha,\beta} \frac{\partial p}{\partial x_{\beta}}$$

Тензор диффузии и дрейфа – оба определяются рассеянием => между ними существует связь. Надо ее найти.

В равновесии

$$\mathbf{j}_n = 0$$

$$en\mu_n \mathbf{E} + eD_n \nabla n = 0 \leftarrow \text{Для простоты рассматриваем изотропную среду с кубической симметрией. } \mu - \text{ абсолютная величина подвижности}$$

$$n(\mathbf{r}) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi(\mathbf{r}) - F}{T}\right) + 1} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - F}{T} - \xi\right) + 1};$$

$$\xi \equiv \frac{e\varphi(\mathbf{r})}{T}$$

$$\nabla n = \frac{dn}{d\xi} \nabla \xi = \frac{dn}{d\xi} \frac{e}{T} \nabla \varphi(\mathbf{r}) = -\frac{e}{T} \frac{dn}{d\xi} \mathbf{E}$$

$$\left(n\mu_n - D_n \frac{e}{T} \frac{dn}{d\xi} \right) \mathbf{E} = 0 \Rightarrow n\mu_n - D_n \frac{e}{T} \frac{dn}{d\xi} = 0 \Rightarrow \frac{\mu_n}{D_n} = \frac{e}{T} \frac{d \ln n}{d\xi}$$

$$\mathbf{j}_p = 0$$

$$en\mu_p\mathbf{E} - eD_p\nabla p = 0$$

$$p(\mathbf{r}) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \left[1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi(\mathbf{r}) - F}{T}\right)} \right] =$$

$$= \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \frac{1}{\exp\left(\frac{-\varepsilon(\mathbf{p}) + F}{T} + \xi\right)}; \quad \xi \equiv \frac{e\varphi(\mathbf{r})}{T}$$

$$\nabla p = \frac{dp}{d\xi} \nabla \xi = \frac{dp}{d\xi} \frac{e}{T} \nabla \varphi(\mathbf{r}) = -\frac{e}{T} \frac{dp}{d\xi} \mathbf{E}$$

$$\left(n\mu_p + D_p \frac{e}{T} \frac{dn}{d\xi} \right) \mathbf{E} = 0 \Rightarrow n\mu_p - D_p \frac{e}{T} \frac{dn}{d\xi} = 0 \Rightarrow \frac{\mu_p}{D_p} = -\frac{e}{T} \frac{d \ln p}{dp}$$

В произвольном случае

$$\frac{(\mu_n)_{\alpha,\beta}}{(D_n)_{\alpha,\beta}} = \frac{e}{T} \frac{d \ln n}{d\xi}, \quad \frac{(\mu_p)_{\alpha,\beta}}{(D_p)_{\alpha,\beta}} = -\frac{e}{T} \frac{d \ln n}{d\xi}$$

Нет равновесия, и по системе течет ток. Пренебрегаем f_1 , и в качестве функции распределения берем функцию Ферми с химическим потенциалом зависящим от координат

$$n(\mathbf{r}) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - e\varphi(\mathbf{r}) - F(\mathbf{r})}{T}\right) + 1} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{T} - \xi\right) + 1};$$

$$\xi \equiv \frac{e\varphi(\mathbf{r}) + F(\mathbf{r})}{T}$$

Зависимость концентрации от ξ такая же как и в равновесии

$$\frac{d \ln n(\xi)}{d\xi} = \frac{T}{e} \frac{\mu_n}{D_n}$$

$$\nabla n = \frac{dn}{d\xi} \nabla \xi = n \frac{d \ln n(\xi)}{d\xi} \frac{[-e\mathbf{E} + \nabla F]}{T} = \frac{1}{eD_n} n \mu_n [-e\mathbf{E} + \nabla F]$$

$$\mathbf{j}_n = en\mu_n \mathbf{E} + eD_n \nabla n = n\mu_n [e\mathbf{E} - e\mathbf{E} + \nabla F] = \mu_n n \nabla F$$

$$\mathbf{j}_p = \mu_p p \nabla F$$