Freie Elektronen: zeitliche Änderung des Impulses durch alle Kräfte auf Elektron

Bloch Elektronen: zeitl. Änderung von $\hbar\vec k$ durch Kräfte durch äußere Felder. Kräfte durch period. Potential stecken bereits in $E_n(\vec k)$ und damit in $\vec v(\vec k)$, also $\hbar\vec k \neq m\vec v$.

- Für elektrische Leitung kommen nur teilweise gefüllte Bänder in Betracht

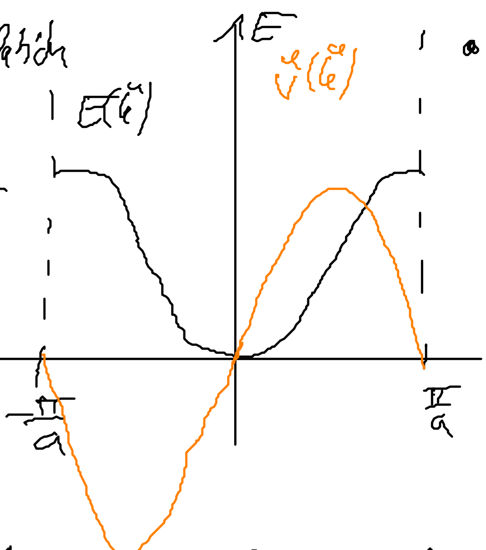
Elektrisches Feld

räuml. und zeitl. konstant; Lösung der halbklass. Bew.gl.

$$\boxed{\vec k(t) = \vec k(0) - \frac{e\vec E t}{\hbar}}$$

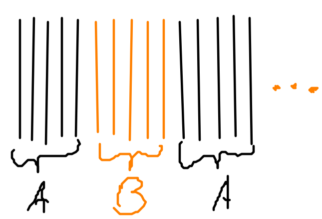
- Nach t hat jedes Elektron $\vec k$ um gleichen Betrag geändert.
- Warum trotzdem kein Strom im vollen Band?

  $\vec j \sim \vec v$ aber $\vec v \not\sim \vec k$
- $\vec v(\vec k)$ ist periodisch im $\vec k$-Raum $\Rightarrow \vec v(\vec k(t))$ oszilliert zeitlich!
- Bloch Oszillation i. Allg. nicht beobachtbar wegen Streuung



- Bei Annäherung von $\vec k$ an Bragg-Ebene $\vec v$ entgegen $\vec k$ gerichtet (Bloch-Welle wird an Bragg-Ebene reflektiert)

  $\Rightarrow$ „Bloch Oszillation"
- „Übergitter" zeigen Bloch Oszill.



Magnetisches Feld

räumlich und zeitl. konstant

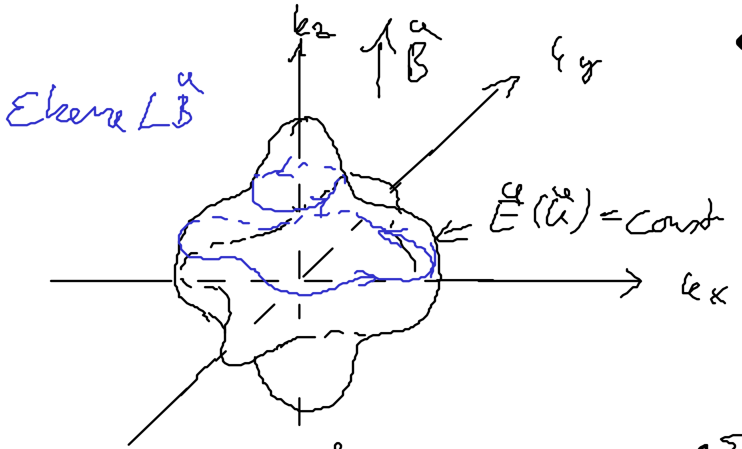
$$\boxed{\dot{\vec r} = \vec v(\vec k) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\vec k)}{\partial \vec k} \qquad \hbar\dot{\vec k} = -e\vec v(\vec k)\times\vec B}$$

- Bewegung im $\vec k$-Raum: $\dot{\vec k} \perp \vec B \Rightarrow$ Komponente von $\vec k \parallel \vec B$ ist konst.

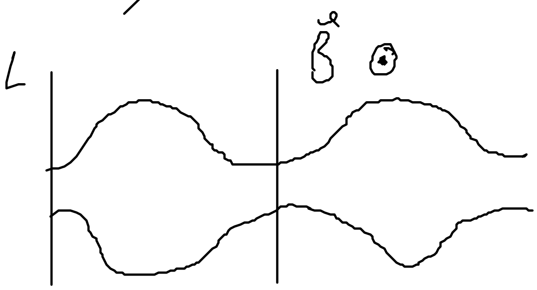
  $\dot{\vec k} \perp \vec v \Rightarrow$ Bewegung auf Fläche mit $E(\vec k) = \text{const.}$

$\Rightarrow$ Elektronen bewegen sich auf Kurven, die gegeben sind durch

Schnitte von Flächen konstanter Energie mit Ebene $\perp \vec B$



Bem: Bahnen im $\vec k$-Raum (hier geschlossen)



- Es existieren offene Bahnen z.B. Ag ⇒ wichtig zur Erklärung des Magnetwiderstandes $\rho(\vec B)$

9.2 Effektive Masse und Löcher

Halbklassische Bewegungsgl.: i-te Komponente von $\vec v$

$$\boxed{\dot v_i = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\nabla_{\vec k} E\right)_i = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}\dot k_j \quad \text{also} \quad \dot{\vec v} = \left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij}\hbar\dot{\vec k}}$$

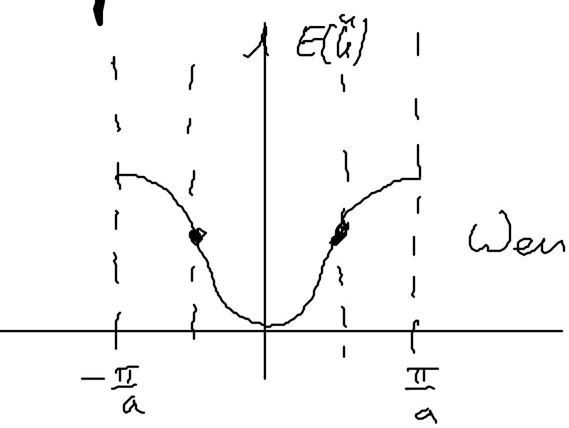
- mit $\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial E}{\partial k_i \partial k_j}$ symmetrischer Tensor 2. Stufe: „Effektive Masse"-Tensor

$\boxed{\hbar\dot{\vec k} = \vec F}$ Kraft durch äußere Felder

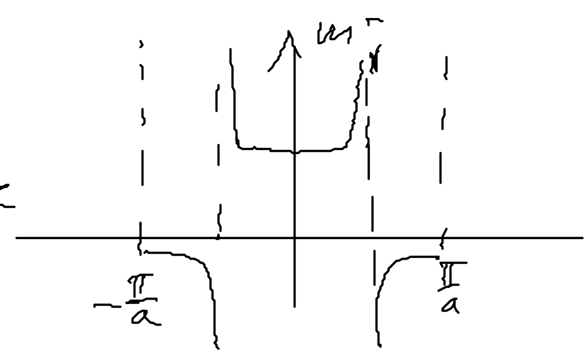
$$\boxed{\left(\frac{1}{m^*}\right)^{-1}_{ij}\dot{\vec v}(\vec k) = F}$$

- Das Bloch Elektron verhält sich in äußeren Feldern so, als hätte es „effektive Masse", die durch $\left(\frac{1}{m^*}\right)^{-1}_{ij}$ gegeben ist.
Das heißt „effekt. Masse" durch Krümmung des $E(\vec k)$ Verlaufs gegeben.

Beispiel: 1dim



Wendepunkte



- Nahe Bragg-Ebene (obere Bandkante) Krümmung $\Rightarrow m^* < 0$
- |Effektive Masse| ist besonders groß, wenn Elektronen stark gebunden: Flache Bänder $\Rightarrow$ Elektronen „stark" lokalisiert

Stromdichte eines teilweise gefüllten Bandes

$$\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3}\int_{\vec{k}\text{-besetzt}} \vec{v}(\vec{k})\,d\vec{k} = \underbrace{-\frac{e}{4\pi^3}\int_{1.\,BZ} \vec{v}(\vec{k})\,d\vec{k}}_{=0} - \frac{-e}{4\pi^3}\int_{\vec{k}\text{-unbesetzt}} \vec{v}(\vec{k})\,d\vec{k}$$

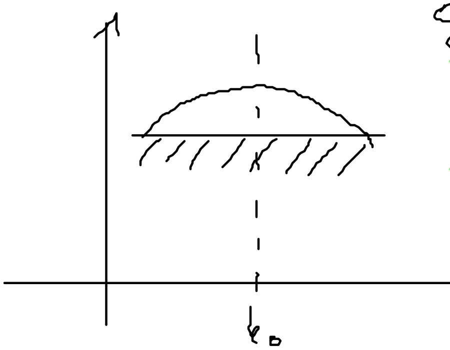
$$\boxed{\vec{j} = \frac{+e}{4\pi^3}\int_{\vec{k}\text{-unbesetzt}} \vec{v}(\vec{k})\,d\vec{k}}$$

- unbesetzte Zustände können formal positive Ladungsträger zugeordnet werden: „Defektelektronen" oder „Löcher". häufig zweckmäßig, im eigentlichen Sinn ist Strom von Elektronen getragen.

Strom durch Löcher: Elektron ≙ fehlendem Loch, trägt nicht zum Strom bei

Innerhalb eines Bandes: Strom entweder durch Elektronen <u>oder</u> durch Löcher zu beschreiben.

- Löcherbeschreibung sinnvoll wenn Band fast vollst. gefüllt



- parabolische Näherung

$$\boxed{E(\vec{k}) \approx E(\vec{k}_0) - \frac{1}{2}\underbrace{\left|\frac{d^2E}{dk^2}\right|_{k_0}}_{=\frac{\hbar^2}{2m^*}}(\vec{k}-\vec{k}_0)^2}$$

- nahe $\vec{k}_0$:

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\vec{k}} E \approx -\frac{\hbar(\vec{k}-\vec{k}_0)}{m^*}$$

$$\dot{\vec{v}}(\vec{k}) = -\frac{\hbar}{|m^*|}\dot{\vec{k}}$$

- in Bgl einsetzen:

$$\boxed{-|m^*|\,\dot{\vec{v}} = -e(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})} \quad \text{oder} \quad \boxed{+|m^*|\,\dot{\vec{v}} = +e(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})}$$

- An oberer Bandkante:
  - Elektronen mit negativer effektiver Masse $-|m^*|$ oder
  - Loch mit positiver effektiver Masse $|m^*|$

	Elektron	Loch
Ladung	$-e$	$+e$
Wellenvektor	$\vec{k}$	$-\vec{k}$
Energie (ohne Spin-Bahn-Koppl.)	$E(\vec{k})$	$-E(-\vec{k})$
Geschwindigkeit	$\vec{v}(\vec{k})$	$\vec{v}(-\vec{k})$
effektive Masse	$\left(\frac{1}{m^*}\right)^{-1}_{ij}$	$-\left(\frac{1}{m^*}\right)^{-1}_{ij}$

9.3 Boltzmann-Gleichung

Bisher: Bewegung von Ladungsträgern zwischen Stößen

Transporteigenschaften:

- treibender Einfluss äußerer Felder
- hemmende Wirkung von Stößen

$\Rightarrow$ Zusammenspiel dieser Mechanismen: Boltzmann-Gl.

- Änderung der Verteilung der Ladungsträger im Nichtgleichgewicht
- im therm. Gleichgewicht $\boxed{f_0(E(\vec{k}))=\frac{1}{e^{\frac{(E-\mu)}{kT}}+1}}$ unabh. von $\vec{r}$

$\Rightarrow$ Nichtgleichgewichts-Verteilung annehmen

$f(\vec{r},\vec{k},t)$?

Äußere Kraft $\vec{F}$: Halbklass. Bew.-gl.

- zur Zeit t erscheint jedes Elektron am Ort $\vec{r},\vec{k}$, dessen Koordinaten zur Zeit

  $t-dt$ $\quad\quad$ $\vec{r}-\vec{v}\,dt$ $\quad\quad$ $\vec{k}-\vec{F}\frac{dt}{\hbar}$ $\quad\quad$ waren

$$\Rightarrow \boxed{f(\vec{r},\vec{k},t)=f\left(\vec{r}-\vec{v}\,dt,\ \vec{k}-\vec{F}\frac{dt}{\hbar},\ t-dt\right)}$$

- zusätzlich können Elektronen im Zeitintervall dt nach $\vec{r},\vec{k}$ gelangen oder wegkommen durch Stöße:

  entsprechende Änderung von f: $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}} dt$

$$\Rightarrow \boxed{f(\vec{r},\vec{k},t)=f\left(\vec{r}-\vec{v}\,dt,\ \vec{k}-\vec{F}\frac{dt}{\hbar},\ t-dt\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}} dt}$$

Entwickle bis lineare Terme in dt:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{v}\,\nabla_{\vec{r}} f+\vec{F}\frac{1}{\hbar}\nabla_{\vec{k}} f=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}}}$$ Boltzmann-Gl.

- linke Seite: Driftterme durch äußere Felder
- rechte Seite: Stoßterme, enthält atomistik der Streuprozesse

⇒ integro Differentialgleichung