Relaxationszeitansatz: $\boxed{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stöße} = -\frac{f(\vec k)-f_0(\vec k)}{\tau(\vec k)}}$ $(*)_1$

Bedeutung von τ

- stationärer Nicht-Gg-Zustand $f_{stat}(\vec k)$ in äußeren Feldern
- Abschalten bei $t=0$, mit $f(t=0,\vec k)=f_{stat}$ $\Rightarrow$ aus $(*)$ $f-f_0=(f_{stat}-f_0)e^{-\frac{t}{\tau}}$

Statisches elektrisches Feld, stationärer Zustand

$\frac{\partial f}{\partial t}=0$; $\nabla_r f=0$ (homogenes Feld)

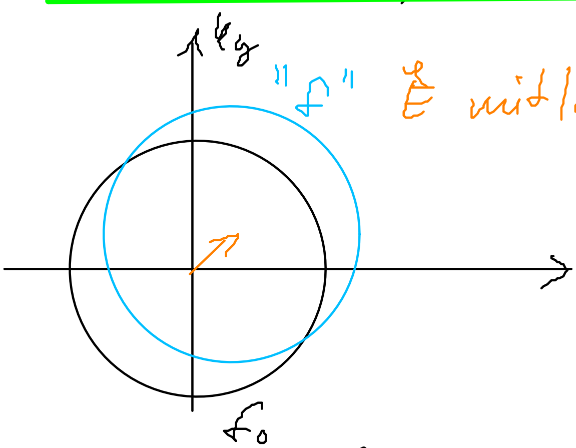
$$-\frac{e}{\hbar}\vec E\,\nabla_{\vec k} f = -\frac{f(\vec k)-f_0(\vec k)}{\tau(\vec k)}$$

- **Lineare Näherung:** $\vec E$ und damit $f-f_0$ klein $\Rightarrow$ $\nabla_{\vec k} f \approx \nabla_{\vec k} f_0$

$f(\vec k)\approx f_0(\vec k)+\frac{e}{\hbar}\tau(\vec k)\vec E\,\nabla_{\vec k} f_0(\vec k)$ linearisierte Boltzmanngleichung

$f(\vec k)$ als Entwicklung von f_0 um einen Punkt $\vec k+\frac{e}{\hbar}\tau(\vec k)\vec E$ auffassen:

$$\boxed{f(\vec k)\approx f_0\left(\vec k+\frac{e}{\hbar}\tau(\vec k)\vec E\right)}$$



- Im Richtung $\vec E$ verschobene Gg-Dirac-Verteilung
- Umbesetzung von Blochzuständen im Bereich k_F

- **auch bei elastischer Streuung:** inelastische Streuprozesse notwendig, damit $f\to f_0$ nach abschalten des Feldes

Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit σ

$\vec E=(E_x,0,0)$ $\Rightarrow$ $j_x=-e\int_{BZ}\frac{d\vec k}{4\pi^3}f(\vec k)\,v_x(\vec k)$

$f_0(\vec k)=f_0(-\vec k)$

$v_x(\vec k)=-v_x(-\vec k)$

$$=-\frac{e}{4\pi^3}\int_{BZ}d\vec k\,v_x(\vec k)\left(f_0(\vec k)+\frac{e\tau(\vec k)}{\hbar}\vec E\frac{\partial f_0(\vec k)}{\partial k_x}\right)$$

$\Rightarrow$ Integrale mit $v_x f_0$ fallen weg,

$\frac{\partial f_0}{\partial k_x}=\frac{\partial f_0}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial k_x}=\frac{\partial f_0}{\partial E}\hbar v_x$

$$\boxed{\sigma=\frac{j_x}{E_x}=-\frac{e^2}{4\pi^3}\int_{BZ}d\vec k\;v_x^2(\vec k)\,\tau(\vec k)\frac{\partial f_0}{\partial E}}$$

Näherung: $\frac{\partial f_0}{\partial E}=-\delta(E-E_F)$

d.h. $kT\ll E_F$

(thermische Aufweitung um E_F zu vernachlässigen)

$$d\vec{k} = ds\, dk_\perp = ds\,\frac{1}{|\nabla_{\vec k} E|}\,dE = ds\,\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{v_x(\vec k)}$$

$$\boxed{\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar}\int_{E(\vec k)=E_F}\frac{v_x^2(\vec k)}{v(\vec k)}\,\tau(\vec k)\,ds} \qquad (*)_2$$

σ gegeben durch Oberfl.-Integral über Energiefläche $E=E_F$

Einfacher Fall parabol. Band mit eff. Masse $m^* = \text{const.}$ $kT \ll E_F$

$\boxed{v(E_F) = \frac{\hbar k_F}{m^*}}$ $\quad \int_{E_F} ds = 4\pi k_F^2$ mit $n = \frac{1}{3\pi^2}k_F^3$

$\Rightarrow \sigma = \frac{ne^2\tau(E_F)}{m^*}$ (isotrope Streuung vorausgesetzt)

- Formal also wie Drude-Leitfähigkeit mit $\tau = \tau(E_F)$, $m = m^*$ aber nur Elektronen bei $E \approx E_F$ tragen zum Transport bei $(*)_2$

Mehrere Bänder $\sigma_{\text{gesamt}} = \sum_n \sigma_n$

Anisotropie statt v_x^2: $\vec v(\vec k)\,\vec v(\vec k)$ (dyadisches Produkt $(\vec a\vec b)_{\mu\nu} = a_\mu b_\nu$)

Thermische Eigenschaften

- lokalen Bereich mit $T=\text{const}$ betrachten; Wärmeenergie dQ wird durch Elektronen hereingebracht oder entfernt

$$\boxed{dQ = T\,dS = dU - \mu\,dN} \quad (V=\text{const})$$

- Stromdichte $\boxed{j_Q = j_E - \mu j_N}$ mit

$$\begin{Bmatrix} \vec j_E \\ \vec j_N \\ \vec j \end{Bmatrix} = \int_{BZ}\frac{d\vec k}{4\pi^3}\begin{Bmatrix} E(\vec k) \\ 1 \\ -e \end{Bmatrix}\vec v(\vec k)\,f(\vec k)$$

- Für f linear. Boltzmanngleichung (stat. Zustand)

$B=0$, Ortsabhängigkeit von $f(\vec r, \vec k, t)$

$$f = f_0 + \frac{e}{\hbar}\tau\vec E\,\underbrace{\nabla_{\vec k} f_0}_{\frac{\partial f_0}{\partial E}\hbar\vec v} - \tau\vec v\,\underbrace{\nabla_{\vec r} f_0}_{\underbrace{\frac{\partial f_0}{\partial T}}_{-\frac{(E-\mu)}{T}\cdot\frac{\partial f_0}{\partial E}}\nabla_{\vec r}T + \underbrace{\frac{\partial f_0}{\partial \mu}}_{-\frac{\partial f_0}{\partial E}}\nabla_{\vec r}\mu}$$

μ: chem. Potential

$$\Rightarrow \boxed{f = f_0 + \tau\frac{\partial f_0}{\partial E}\vec v\Big(\underbrace{e\Big(\vec E + \frac{\nabla_{\vec r}\mu}{e}\Big)}_{\vec{\mathcal E}} + \frac{E-\mu}{T}\nabla_{\vec r}T\Big)}$$

$\vec{\mathcal E}$: verallgemeinerte Feldstärke

• für Ausdruck für $\vec{j}$ und $\vec{j}_Q$ einsetzen: $\mathcal{L}^{ij}$ Tensoren $\hat{=}$ „Transportkoeff." ergeben sich durch Vergleich mit ausgeschr. Formeln

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{j} &= \mathcal{L}^{11}\vec{\mathcal{E}} + \mathcal{L}^{12}(-\nabla_{\vec r} T)\\ \vec{j}_Q &= \mathcal{L}^{21}\vec{\mathcal{E}} + \mathcal{L}^{22}(-\nabla_{\vec r} T)\end{aligned}}$$

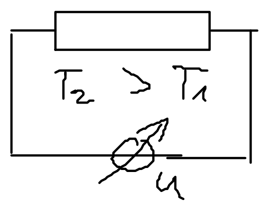
$$\mathcal{L}^{21} = \mathcal{L}^{12}\cdot T = e\int_{BZ}\frac{d^3k}{4\pi^3}\frac{\partial f_0}{\partial E}\tau\vec{v}\vec{v}(E-\mu)$$

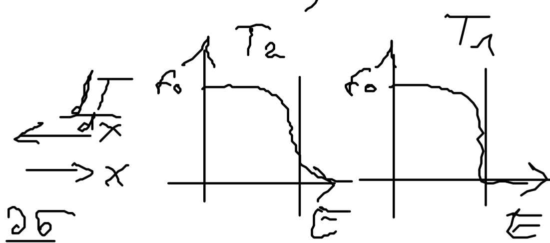
Diskussion

① Elektr. Leitfähigkeit σ, $\nabla T = 0$, $j_Q = 0$ $\Rightarrow \vec{j} = \mathcal{L}^{11}\vec{\mathcal{E}} = \sigma\vec{\mathcal{E}}$

im Allg. $\vec{j} \nparallel \vec{\mathcal{E}}$ $\Rightarrow$ Leitfähigkeitstensor, wegen $\frac{\partial f_0}{\partial E} \neq 0$ nur $E \approx E_F$: $\sigma(E_F)$

② Thermokraft S: $\vec{\mathcal{E}} = S\nabla_{\vec r} T$, $\vec{j} = 0$





Integrand enthält Faktor $(E-\mu)$

$\Rightarrow$ Sommerfeldentwicklung um $\mu \approx E_F$

$\Rightarrow S = \mathcal{L}^{12}\cdot(\mathcal{L}^{11})^{-1} = -\frac{\pi^2}{3e}k^2 T\frac{\partial\sigma(E)}{\partial E}\Big|_{E=E_F}$ $\quad S \sim \frac{\frac{\partial\sigma}{\partial E}}{\sigma}$

auch $\sigma(E)$ wichtig

• WW-Elektron $\leftrightarrow$ Gitterwellen (Phononen)

„phonon drag"-Effekt: $\Rightarrow$ Thermokraft?

③ Wärmeleitfähigkeit κ, gemessen bei $\vec{j} = 0$ und $\vec{\mathcal{E}} = 0$

$\vec{\mathcal{E}} = (\mathcal{L}^{11})^{-1}\mathcal{L}^{12}\nabla_{\vec r} T$ $\qquad \vec{j}_Q = \kappa(-\nabla_{\vec r} T) \approx \mathcal{L}^{22}(-\nabla_{\vec r} T)$

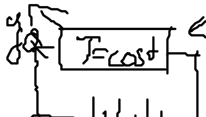
Term mit $\vec{\mathcal{E}}$, d.h. thermoel. Eff. vernachl.

$$\boxed{\kappa = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k}{e}\right)^2 T\sigma}$$

W-F Gesetz

• Angenommen: dass relevante τ für el. und therm. Transport identisch!

④ Peltier-Effekt



isothermer, elektr. Strom ist mit Wärmestrom verknüpft: $\nabla_{\vec r} T$

$\vec{j}_Q = \Pi\vec{j}$

$\Pi = \mathcal{L}^{21}(\mathcal{L}^{11})^{-1} = T\cdot S$ (Peltier-Koeffizient)

9.4 Elektronische Streuprozesse in Metallen

parabol. Band mit $m^* = \text{const}$, $\sigma = \frac{ne^2\tau(E_F)}{m^*}$

T-Abhängigkeit des elektr. Widerstandes $\rho = \frac{1}{\sigma}$

von Metallen durch $\tau(E_F)$, da n unabh. von T (bei $V \approx$ const)

hier: qualitative Diskussion, Streumechanismen

- Abweichung von Gitterperiodizität

  statisch : Fremdatome, Versetzungen, Gitterfehler

  dynamisch : Phononen