Semiklasický popis transportu

• **Semiklasická dynamika** (bez dôkazu)

vytvorme vlnový balík z Blochových funkcií pásma n okolo vlnového vektora $\vec{k}$; nech vlnový balík je lokalizovaný v oblasti $\Delta x \gg a$, potom rýchlosť možno merať s presnosťou $\Delta k \sim \frac{1}{\Delta x} \ll \frac{2\pi}{a}$

Pre dostatočne slabé polia E, B:

(1) $\vec{v}_k = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}}$ -- grupová rýchlosť balíka

(2) $\hbar\dot{\vec{k}} = e(\vec{E} + \vec{v}_k \times \vec{B})$ -- "Newtonova" rovnica

Pre silné polia nemožno zanedbať medzipásové prechody!

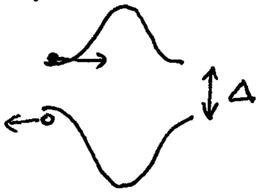
• **Materiál s plne zaplnenými pásmi nevedie prúd:**

$\vec{I} = 2e\sum_k \vec{v}_k = 0$ dôkaz pre 1D: $I = \frac{2e}{\hbar}\sum_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \sim \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi}\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}$

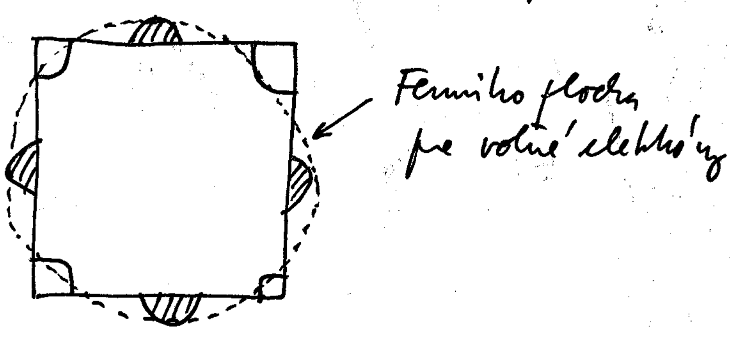
$I \sim \varepsilon(\frac{\pi}{a}) - \varepsilon(-\frac{\pi}{a}) = 0$ (periodicita)

Dôsledok: plne zaplnené pásy $\Leftrightarrow$ izolant

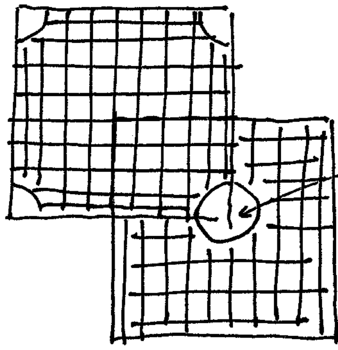
Naopak, na vytvorenie stavu nesúceho prúd treba dodať konečnú energiu:



• **Takmer voľné elektróny - 2D prípad:**

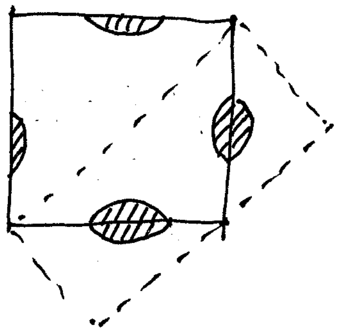


1. Brillouinova zóna:



dierová Fermiho plocha (bublina neobsadených stavov)

2. Brillouinova zóna:

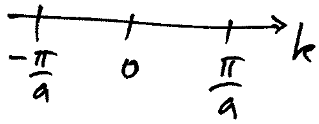


2 elektrónové ostrovy

→ Materiál má 3 Fermiho plochy: 1 dierovú
i 2 elektrónové

• <u>Blochove oscilácie</u> : 1D kryštál

$\hbar \dot{k} = eE$



periodický pohyb v k-priestore s periódou $\boxed{\tau_E = \frac{h}{eEa}}$

periodickému pohybu v k-priestore zodpovedá periodický pohyb v r-priestore:

$$x(\tau_E) = x(0) + \underbrace{\int_0^{\tau_E} dt' v(t')}_{\frac{1}{\hbar}\int dt' \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = \frac{1}{eE}\int_{\varepsilon(0)}^{\varepsilon(\tau_E)} d\varepsilon = 0} \rightarrow \boxed{x(\tau_E) = x(0)}$$

→ ideálny kryštál nevedie prúd?

Nie. 2 dôvody: 1) Blochove oscilácie: iba ak $\tau > \tau_E$ (silné polia!) — doba života

2) medzipásové tunelovanie

Za veľmi špeciálnych podmienok, kedy $\tau < \tau_E$ a zároveň medzipásové tunelovanie je malé, možno pozorovať Blochove osc.!

Boltzmannova rovnica

distribučná funkcia $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ – distribúcia vlnových balíkov

rovnica kontinuity v 6-rozmernom fázovom priestore:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \left(\dot{\vec{r}} f\right) + \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \cdot \left(\dot{\vec{k}} f\right) = 0 \qquad \dot{\vec{r}} = \vec{v}_k \,, \quad \dot{\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \vec{F}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + f \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} + \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \cdot \hbar \dot{\vec{k}} \right]}_{(*)} = 0$$

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \,, \quad \hbar \dot{\vec{k}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} \quad \Rightarrow \quad (*) = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = 0$$

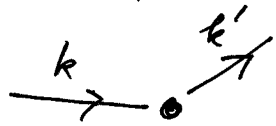
→ Bez zrážok:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = 0}$$ ... Boltzmannova rovnica v bezzrážkovom režime

zrážky: 1) na defektoch mriežky
2) na kmitoch mriežky
3) v dôsledku el.-el. rozptylov

Defekty mriežky:
- bodové (vakancie, intersticiály, prímesi, ...)
- čiarové (dislokácie, ...)
- plošné (povrch kryštálu, hranice zŕn, ...)

1) zrážky na defektoch:

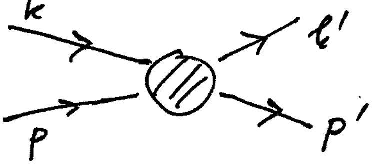


(v bode $\vec{r}$ zanikne elektrón $\vec{k}$, vznikne elektrón s hybnosťou $\vec{k}'$)

2) zrážky na kmitoch mriežky:

(v rozptylovom procese $\vec{k} \to \vec{k}'$ vznikne alebo zanikne kmit mriežky)

3) el.-el. zrážky:



4) Uvažujme iba zrážky typu 1 a 2:

slav k musel byť obsadený

slav k' musel byť prázdny

$$\boxed{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{1}{N}\sum_{k'}\left[W_{k'k}\, f_{k'}(1-f_k) - W_{kk'}\, f_k(1-f_{k'})\right]}$$

pravdepodobnosť rozptylu $k \to k'$

Boltzmannova rovnica:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{v}_k\cdot\frac{\partial f}{\partial \bar{r}} + \frac{1}{\hbar}\bar{F}\cdot\frac{\partial f}{\partial \bar{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}}$$

← zložitá nelineárna integro-diferenciálna rovnica!

Pre elastické rozptyly platí $W_{kk'} = W_{k'k}$

$$\boxed{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{1}{N}\sum_{k'} W_{kk'}\left(f_{k'} - f_k\right)}$$

← nelineárny člen vypadne!

Priblíženie relaxačného času:

$$\boxed{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -\frac{f-f^0}{\tau}}$$

f^0 = rovnovážna distribučná funkcia (= Fermi-Dirac)

Fyzikálny zmysel: uvažujme homogénny prípad bez polí ($\bar{F}=0$)

Potom $\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f-f^0}{\tau}$. označme $f(\bar{r},\bar{k},t) = f^0(\bar{k}) + g(\bar{r},\bar{k},t)$

odchýlka od rovnováhy

$$\rightarrow \frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{g}{\tau} \rightarrow \boxed{g(\bar{r},k,t) = g(\bar{r},\bar{k},0)\, e^{-t/\tau}}$$

odchýlka od rovnováhy vymizne na časovej škále τ

$$\rightarrow \boxed{\tau = \text{relaxačný čas}}$$