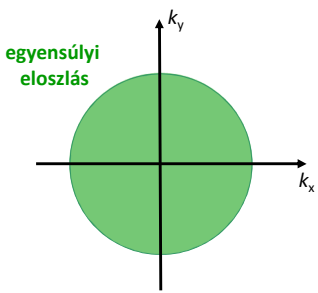


<p><b>Külső hatás nélkül:</b></p> $f^0(\mathbf{k}) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{k_B T}} + 1}$ $N = 2 \sum_{\mathbf{k}} f^0(\mathbf{k}) = V \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{4\pi^3} f^0(\mathbf{k})$ $n = \frac{N}{V} = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{4\pi^3} f^0(\mathbf{k})$ 	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"><b>Nemegyensúlyi eloszlásfüggvény</b></div> <p><b>Külső erők hatására megváltozik az elektronok állapota, egy nemegyensúlyi eloszlásfüggvény alakul ki:</b></p> $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ <p>t időben az <math>\mathbf{r}</math> és <math>\mathbf{k}</math> pontok körüli <math>d^3 \mathbf{r}</math>, <math>d^3 \mathbf{k}</math> tartományban található elektronok száma:</p> $dN(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \frac{d^3 \mathbf{k} d^3 \mathbf{r}}{4\pi^3}$ <p>Ez alapján az elektronsűrűség az <math>\mathbf{r}</math> pontban és t időben:</p> $n(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{4\pi^3} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ <p>Áramsűrűség:</p> $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -e \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ <p>Hőáramsűrűség:</p> $\mathbf{j}_Q(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{4\pi^3} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$
---	--

22

<p>Ha nem következnek be ütközések, akkor a részecskeszám megmaradás miatt:</p> $f(\mathbf{k} + \dot{\mathbf{k}} dt, \mathbf{r} + \dot{\mathbf{r}} dt, t + dt) d^3 \mathbf{k}' d^3 \mathbf{r}' = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{k} d^3 \mathbf{r}$ <p>Azaz a nemegyensúlyi eloszlásfüggvény teljes idő szerinti deriváltja zérus:</p> $\frac{df(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{k}} \dot{\mathbf{k}} + \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0$ <p>Kváziklasszikus dinamika alapján: <math>\hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F} = -e\mathbf{E}</math>      <math>\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}}</math></p> <p>Ha az ütközéseket is figyelembe vesszük, akkor <math>f</math> időderiváltja az ún. ütközési integrállal írható le:</p> $\frac{df(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)}{dt} = I_{\text{coll}} = \left( \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \left( \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}}^{\text{in}} - \left( \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} \right)_{\text{coll}}^{\text{out}}$ <p style="text-align: center;"> <span style="color: red;">↙</span> beszóródás a <math>\mathbf{k}</math> állapotba      <span style="color: red;">↘</span> kiszóródás a <math>\mathbf{k}</math> állapotból </p> $(1 - f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)) \int \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^3} W(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}) f(\mathbf{k}', \mathbf{r}, t) \quad f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \int \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^3} W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') (1 - f(\mathbf{k}', \mathbf{r}, t))$ <p><b>Relaxációs idő közelítés:</b> a szóródások hatására <math>\tau</math> karakterisztikus idővel az egyensúlyi eloszlás felé relaxál a rendszer. (Ehhez energiarelatáció is kell, nem elég a momentumrelaxáció, <math>\rightarrow</math> inkoherens transzport)</p> $\left( \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\tau}$ <p><b>Boltzmann-egyenlet</b> állandósult állapotban, relaxációs idő közelítéssel:</p> <div style="border: 1px solid red; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"> <math display="block">-\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = \frac{f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\tau}</math> </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;"><b>Boltzmann-egyenlet</b></div>
--	---

23

**Boltzmann-egyenlet megoldása E-tér nélkül, hőmérsékletgradiens esetén**

Ha a rendszer mindenhol termodinamikai egyensúlyban van, de térbe változik a hőmérséklet (vagy akár a kémiai potenciál is), akkor az egyensúlyi eloszlásfüggvény:

$$f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu(\mathbf{r})}{kT(\mathbf{r})}\right) + 1} = \alpha(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

A Boltzmann-egyenlet E=0 esetén, de a lokális hőmérséklet változhat, így T(r)-en keresztül bejön a helyfüggés:

$$-\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{v}_k \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = \frac{f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\tau}$$

Állítás: a megoldás a következő alakban írható:

Az ütközés után közvetlenül egyensúlyi eloszlás alakul ki. Az előző ütközés után r-vτ helyen volt az elektron f<sup>0</sup> eloszlással.

Bizonyítás:  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r} - \mathbf{v}_k \tau)$

$$\mathbf{v}_k \frac{\partial f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \approx \mathbf{v}_k \frac{f(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\Delta \mathbf{r}} = \mathbf{v}_k \frac{f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r} - \mathbf{v}_k \tau + \mathbf{v}_k \tau) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\mathbf{v}_k \tau} = \frac{f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\tau}$$

$\Delta \mathbf{r} := \mathbf{v}_k \tau$

Az eloszlásfüggvény sorfejtésével (csak a hőmérséklet helyfüggő):

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r} - \mathbf{v}_k \tau) \approx f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) - \mathbf{v}_k \tau (\varepsilon_k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k} \cdot \frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{r}} = f^0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \mathbf{v}_k \tau (\varepsilon_k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k} \frac{\varepsilon_k - \mu}{T} \nabla T$$

$$kT \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k} - \frac{\varepsilon_k - \mu}{kT^2} \nabla T$$

**Boltzmann-egyenlet homogén E-térben, hőmérsékletgradiens nélkül**

Az eloszlásfüggvény csak k-tól függ:

$$-\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{v}_k \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} = \frac{f^0(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})}{\tau}$$

Az utolsó ütközés óta átlagosan ennyivel változik a hullámszám

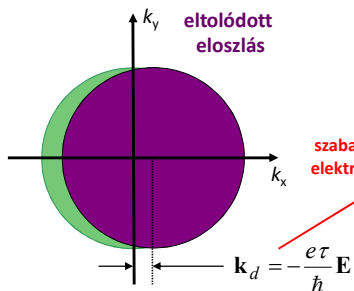
Az előző diához hasonlóan a megoldás:

$$f(\mathbf{k}) = f^0\left(\mathbf{k} + \frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E}\right) \approx f^0(\varepsilon_k) + \tau (\varepsilon_k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k} \mathbf{v}_k e\mathbf{E}$$

Bizonyítás:

$$-\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \approx -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{f(\mathbf{k} + \Delta \mathbf{k}) - f(\mathbf{k})}{\Delta \mathbf{k}} = -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{f^0(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})}{-\frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E}} = \frac{f^0(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k})}{\tau}$$

$\Delta \mathbf{k} := -\frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E}$



$$\frac{\hbar \mathbf{k}_d}{\tau} = m \mathbf{v}_d = e\mathbf{E} \Rightarrow \mathbf{v}_d = \frac{e\tau}{m} \mathbf{E}$$

mobilitás (μ)

$$\mathbf{j} = ne\mathbf{v}_d = ne\mu \mathbf{E} \Rightarrow \sigma = ne\mu = \frac{ne^2 \tau}{m}$$

ütkezési élettartam

Drude-modell eredménye

Üres és teli sáv vezetése

$f^0(\mathbf{k}) + e\tau(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k}$

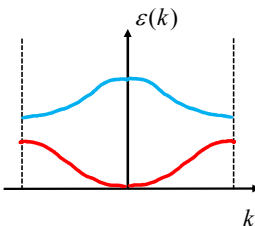
Áramsűrűség:  $\mathbf{j} = -e \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}_k f(\mathbf{k})$

Üres sáv vezetése:  $f(\mathbf{k}) = 0 \rightarrow \mathbf{j} = 0$

Teli sáv vezetése:  $f(\mathbf{k}) = 1 \rightarrow \mathbf{j} = -e \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}_k = 0$

$$\mathbf{v}_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(-\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = -\mathbf{v}_{-\mathbf{k}}$$

$\mathbf{k}, -\mathbf{k}$  párok járuléka  
kijeli egymást



Általános eset

$$\mathbf{j} = -e \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}_k f^0(\mathbf{k}) - e^2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}_k \tau(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k}$$

$$j_n = -e^2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} v_n \tau E_m v_m \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k} \underbrace{\int d\varepsilon \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)}_1 = \int d\varepsilon \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \cdot e^2 \underbrace{\int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \tau(\mathbf{k}) v_n(\mathbf{k}) \cdot v_m(\mathbf{k}) E_m}_{\sigma_{nm}(\varepsilon)}$$

$\approx \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$

$\mathbf{j} \approx \underline{\underline{\sigma(\varepsilon_F) \mathbf{E}}}$

26

Vezetőképesség számolása izotróp rendszerben

$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(|\mathbf{k}|)$

Izotróp rendszerben a vezetőképességtenzor:

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & \sigma \end{pmatrix} \rightarrow \sigma(\varepsilon_F) = \sigma_{xx} = e^2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_k) \tau(\varepsilon_k) v_x^2(\mathbf{k})$$

$$3\sigma = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} = e^2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{4\pi^3} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_k) \tau \underbrace{(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}_{|\mathbf{v}|^2} \rightarrow \sigma(\varepsilon_F) = e^2 \int dk_{\perp} dS \underbrace{\frac{1}{4\pi^3} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon) \tau(\varepsilon_k)}_{\rho(\varepsilon) d\varepsilon} \frac{1}{3} |\mathbf{v}_k|^2$$

$\sigma(\varepsilon_F) = \frac{1}{3} e^2 \rho(\varepsilon_F) \tau(\varepsilon_F) |\mathbf{v}_{\varepsilon_F}^2$

Szabad elektron diszperzióra:  $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

$$n(\varepsilon_F) = \int^{\varepsilon_F} \rho(\varepsilon) d\varepsilon \sim k_F^3 \sim \varepsilon_F^{3/2}$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon}; \quad \frac{\rho(\varepsilon)}{n(\varepsilon)} = \frac{d \ln(n(\varepsilon))}{d\varepsilon} = \frac{3}{2} \frac{1}{\varepsilon}$$

$$\rho(\varepsilon_F) = \frac{3n}{2\varepsilon_F}; \quad |\mathbf{v}_{\varepsilon_F}^2 = \frac{2\varepsilon_F}{m^*} \rightarrow \sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

27

3

**Hővezetés, keresztteffektusok**

Általános megoldás véges elektromos térben, illetve véges hőmérséklet- és kémiai potenciál gradiens esetén, relaxációs idő közelítésben:

$$f(\mathbf{k}) \approx f^0 \left( \mathbf{r} - \mathbf{v}_k \tau, \mathbf{k} + \frac{e\tau}{\hbar} \mathbf{E} \right) \approx f^0(\varepsilon_k) - \tau(\varepsilon_k) \frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k} \mathbf{v}_k \left( \underbrace{\mathbf{E} + \frac{\nabla \mu}{e}}_{\mathbf{E}_{\text{eff}} = -\nabla U_{\text{eff}}} - \frac{\varepsilon_k - \mu}{T} \nabla T \right)$$

Áramsűrűség:  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -e \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{4\pi^3} \mathbf{v}_k f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$     Hőáramsűrűség:  $\mathbf{j}_Q(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{4\pi^3} (\varepsilon_k - \mu) \mathbf{v}_k f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$

Ezek alapján:

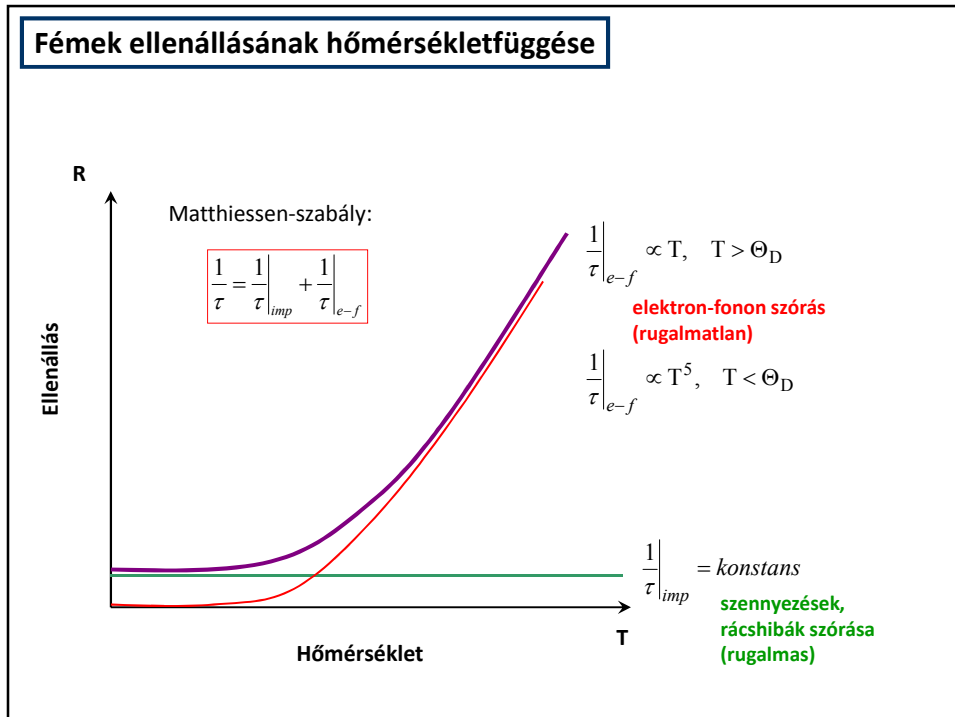
**Fajlagos vezetőképesség:**  $\sigma = \frac{\mathbf{j}}{\mathbf{E}_{\text{eff}}} \Big|_{\nabla T=0} = \sigma(\varepsilon_F); \quad \sigma(\varepsilon) = \frac{1}{3} e^2 \rho(\varepsilon) \tau(\varepsilon) |v|_e^2$

**Hővezetési együttható:**  $\lambda = - \frac{\mathbf{j}_Q}{\nabla T} \Big|_{j=0} = \frac{\pi^2 k^2}{3e^2} \cdot T \cdot \sigma(\varepsilon_F) \leftarrow$  Wiedemann-Franz törvény, Lorenz szám

**Seebeck-együttható:**  $S = - \frac{dU_{\text{eff}}}{dT} \Big|_{j=0} = - \frac{\pi^2 k^2 T}{2e} \frac{1}{\sigma(\varepsilon_F)} \frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon} \Big|_{\varepsilon_F}$

**Peltier-együttható:**  $\Pi = \frac{\mathbf{j}_Q}{\mathbf{j}} \Big|_{\nabla T=0} = - \frac{\pi^2 k^2 T^2}{2e} \frac{1}{\sigma(\varepsilon_F)} \frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon} \Big|_{\varepsilon_F} = S \cdot T \leftarrow$  Kelvin-féle összefüggés

28



29