

Elektronien sironta

Semiklassinen johtavuusmalli käsitteli elektronien törmäyksiä satunnaisina korreloimattomina tapahtumina, joiden karakterisointiin relaksaatioaika-aproksimaatio on sopiva. Tällöin oletimme, että epätasapainossa olevan elektronisen systeemin jakaumafunttiolla ei ole mitään vaikutusta

- törmäyksien taajuuteen,
- törmäyksestä poistuvien elektronien jakaumaan.

Kuitenkin

- törmäyksien taajuus riippuu elektronien jakaumasta, sillä Paulin kieltoääntö sallii elektronien siroamisen vain ennestään miehittämättömiin tiloihin,
- törmäyksistä poistuvien elektronien jakaumaan vaikuttaa Paulin kieltoääntö lisäksi toki myös se, mitkä elektronit voivat osallistua sirontaprosesseihin, ts. elektronien jakaumafunktio.

Relaksaatioaika-aproksimaatio toimii silloin, kun törmäysprosessien yksityiskohdilla ei ole merkitystä. Esimerkiksi suurtaajuiseen ($\omega\tau \gg 1$) johtavuuteen tai Hallin kertoimeen voimakkaassa ($\omega_c\tau \gg 1$) magneettikentässä ei törmäysten luonteella ole vaikutusta. **Sironnan lähteet**

Toisin kuin Druden malli oletti elektronit eivät siroa lainkaan kiteen ioneista. Riippumattomien elektronien mallissa sironnan lähteet voidaan jakaa kahteen ryhmään:

1. Epäpuhtaudet ja hilavirheet

Kiteen epäpuhtaudet ovat lokalisoituneita sirontakeskuksia. Pistevirheet, kuten puuttuva ioni tai satunnainen väärään paikkaan sijoittunut ioni, käyttäytyvät myös kuten epäpuhtaudet.

2. Ionien termisistä värähtelistä aiheutuvat

poikkeamat täydellisen kiteen periodisuudesta
Täysin puhtaassakaan kiteessä ionit eivät muodosta täydellistä kidettä, sillä (absoluuttista nollalämpötilaa lukuunottamatta) ionit oskilloivat aina keskimääräisen tasapainoasemansa suhteen, sitä voimakkaammin mitä korkeampi on lämpötila. Tämä poikkeama täydellisestä periodisesta rakenteesta on huomattavin DC vastukseen vaikuttava tekijä ja merkittävin sirontamekanismi huoneenlämpötilassa.

Sirontatodennäköisyys ja relaksaatioaika

Realistinen törmäysten kuvaus olettaa, että on olemassa todennäköisyys (laskettavissa mikroskooppisista lähtökohdista), jolla vyöllä n oleva aaltovektorin $\mathbf{k}$ omaava elektroni siroaa aikayksikössä vyölle n' tilaan $\mathbf{k}'$. Yksinkertaisuuden vuoksi oletamme, että

- törmäykset ovat vyön sisäisiä, ts. $n' = n$. Tämän rajoituksen poisto on suoraviivaista.
- elektronien spin säilyy. Tämä oletus ei pidä paikkaansa magneettisten epäpuhtauksien tapauksessa, sillä elektronin siroessa näistä sen spin voi kääntyä.

- törmäykset ovat lokalisoituneita ajassa ja paikassa, ts. paikassa $\mathbf{r}$ hetkellä t tapahtuva törmäys riippuu vain kiteen ominaisuuksista pisteen $(\mathbf{r}, t)$ läheisyydessä.

Määrittelemme suureen $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ siten, että

todennäköisyys sille, että infinitesimaalisena aikavälinä dt $\mathbf{k}$ -aaltovektorinen elektroni siroaa (spinin säilyttäen) $\mathbf{k}$ -avaruudessa pisteen $\mathbf{k}'$ infinitesimaaliseen ympäristöön $d\mathbf{k}'$ tässä olevien tilojen ollessa ennestään miehittämättömiä, on

$$\frac{W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} dt d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}.$$

Huom. Suure $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ ilmoittaa siis aikayksikköä kohti lasketun todennäköisyyden sille, että elektroni siroaa tilasta $\mathbf{k}$ tilaan $\mathbf{k}'$.

Kun $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ ja elektronien jakaumafunktio g tunnetaan, suure $1/\tau(\mathbf{k})$, ts. todennäköisyys sille, että $\mathbf{k}$ -aaltovektorinen elektroni kokee aikayksikössä törmäyksen, voidaan laskea. Määritelmän mukaan $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} d\mathbf{k}' / (2\pi)^3$ on todennäköisyys sille, että $\mathbf{k}$ -aaltovektorinen elektroni siroaa aikayksikössä tilan $\mathbf{k}'$ ympäristöön $d\mathbf{k}'$ edellyttäen, että ko. tilat ovat miehittämättömiä. Koska miehittämättömien tilojen osuus pisteen $\mathbf{k}'$ ympäristön tiloista on $1 - g(\mathbf{k}')$, saadaan kokonaistodennäköisyydeksi

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} [1 - g(\mathbf{k}')].$$

Nähdään siis, että vastoin Druden mallin oletuksia relaksaatioaika riippuu jakaumafunktioista g .

Törmäyksistä aiheutuva jakaumafunktion muutosnopeus

Määritellään suure $(dg(\mathbf{k})/dt)_{\text{out}}$ siten, että

$$- \left(\frac{dg(\mathbf{k})}{dt} \right)_{\text{out}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} dt$$

on niiden elektronien lukumäärä yksikkötilavuudessa, joiden aaltovektori on pisteen $\mathbf{k}$ infinitesimaalisessa ympäristössä $d\mathbf{k}$ ja jotka kokevat törmäyksen infinitesimaalisena aikavälinä dt .

Koska $d\mathbf{k}$ on infinitesimaalinen, jokainen sironta tässä ympäristössä poistaa elektronin siitä.

Nyt

- $dt/\tau(\mathbf{k})$ on todennäköisyys sille, että pisteen $\mathbf{k}$ ympäristössä oleva elektroni siroaa aikavälinä dt ,
- pisteen $\mathbf{k}$ ympäristössä $d\mathbf{k}$ olevien elektronien lukumäärä on $g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} / (2\pi)^3$.

Saadaan siis

$$\begin{aligned} \left(\frac{dg(\mathbf{k})}{dt} \right)_{\text{out}} &= - \frac{g(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} \\ &= -g(\mathbf{k}) \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} [1 - g(\mathbf{k}')]. \end{aligned}$$

Elektronit voivat myös sirotta aaltovektorin $\mathbf{k}$ ympäristöön. Määritellään vastaavasti suure $(dg(\mathbf{k})/dt)_{\text{in}}$ siten, että

$$\left(\frac{dg(\mathbf{k})}{dt}\right)_{\text{in}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} dt$$

on tilavuusyksikköä kohti niiden elektronien lukumäärä, jotka aikavälinä dt törmäysten seurauksena päätyvät aaltovektorin $\mathbf{k}$ infinitesimaaliseen ympäristöön $d\mathbf{k}$.

Tarkastellaan aaltovektorin $\mathbf{k}'$ ympäristöä $d\mathbf{k}'$. Nyt

- tässä olevien elektronien lukumäärä on $g(\mathbf{k}')d\mathbf{k}'/(2\pi)^3$,
- joista aaltovektorin $\mathbf{k}$ ympäristöön $d\mathbf{k}$ siroavien elektronien osuus on $W_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}d\mathbf{k}/(2\pi)^3$,
- aaltovektorin $\mathbf{k}$ ympäristön $d\mathbf{k}$ tiloista vapaiden tilojen osuus on vain $1 - g(\mathbf{k})$.

Aaltovektorin $\mathbf{k}'$ ympäristöstä $d\mathbf{k}'$ aaltovektorin $\mathbf{k}$ ympäristöön $d\mathbf{k}$ aikavälillä dt törmäysten seurauksena saapuvien elektronien kokonaislukumäärä on siten

$$\left[g(\mathbf{k}')\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}\right] \left[W_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} dt\right] [1 - g(\mathbf{k})].$$

Summaamalla yli kaikkien aaltovektoreiden $\mathbf{k}'$ ja vertaamalla suureen $(dg(\mathbf{k})/dt)_{\text{in}}$ määritelmään saamme

$$\left(\frac{dg(\mathbf{k})}{dt}\right)_{\text{in}} = [1 - g(\mathbf{k})] \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} W_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} g(\mathbf{k}').$$

Määritellään suure $(dg(\mathbf{k})/dt)_{\text{coll}}$ siten, että se on törmäysten aikaansaama jakaumafunktion kokonaismuutoksen nopeus, ts.

$$\left(\frac{dg(\mathbf{k})}{dt}\right)_{\text{coll}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} dt$$

on tilavuusyksikköä kohti laskettu törmäyksistä aiheutuva elektronien lukumäärän muutos aaltovektorin $\mathbf{k}$ infinitesimaalisessa ympäristössä $d\mathbf{k}$ aikavälinä dt . Saamme

$$\left(\frac{dg(\mathbf{k})}{dt}\right)_{\text{coll}} = - \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left\{ W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}) [1 - g(\mathbf{k}')] - W_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} g(\mathbf{k}') [1 - g(\mathbf{k})] \right\}.$$

Huom. Relaksaatioaika-aprosimaatiossa törmäystermin yksinkertaistuu muotoon

$$\left(\frac{dg(\mathbf{k})}{dt}\right)_{\text{coll}} = - \frac{g(\mathbf{k}) - g^0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})}.$$

Osoittajan jälkimmäinen termi $g^0(\mathbf{k})$ aiheutuu siitä, että tässä aproksimaatiossa oletetaan elektronien törmäysten jälkeisen jakauman olevan riippumaton törmäyksiä edeltävästä jakautumasta.

Boltzmannin yhtälö

Jollei elektroni osallistu törmäykseen, sen koordinaatit $\mathbf{r}$ ja $\mathbf{k}$ kehittyvät ajan myötä semiklassisten liikeyhtälöiden

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v}(\mathbf{k}) \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \end{aligned}$$

mukaisesti. Jos elektroni hetkellä t oli pisteessä $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$, niin se infinitesimaalista hetkeä dt aikaisemmin oli pisteessä $(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) dt/\hbar)$. Tämä on ainoa piste, josta törmäyksettömässä tilanteessa pisteen $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ elektronit voivat olla peräisin. Samoin jokainen pisteessä $(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) dt/\hbar)$ oleva elektroni saapuu hetkeä dt myöhemmin pisteeseen $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$. Täytyy siis olla

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = g(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) dt/\hbar, t - dt).$$

Törmäyksien huomioimiseksi on yo. yhtälössä

- vähennettävä oikealta puolelta aaltovektorin $\mathbf{k}$ ympäristöstä sironnan seurauksena poistuneitten
- lisättävä oikealle puolelle aaltovektorin $\mathbf{k}$ ympäristöön sironnan seurauksena saapuneiden

elektronien osuus. Saamme siis

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) &= g(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k}) dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) dt/\hbar, t - dt) \\ &+ \left(\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{out}} dt + \left(\frac{\partial g(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right)_{\text{in}} dt. \end{aligned}$$

Kehittämällä ensimmäinen oikeanpuoleinen termi Taylorin sarjaksi pidättäytyen korkeintaan välin dt lineaarisiin termeihin saadaan

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{1}{\hbar} \frac{\partial g}{\partial \mathbf{k}} = \left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{\text{coll}}.$$

Tämä on kuuluisa Boltzmannin yhtälö.

Sironta epäpuhtauksista

Tarkastellaan elastista sirontaa sellaisista epäpuhtauksista, jotka satunnaisissa hilapisteissä korvaavat kiteen alkuperäiset rakenneosat (ns. substitutionaaliset epäpuhtaudet). Tämä on alhaisissa lämpötiloissa hyvinkin realistinen aproksimaatio, sillä lämpötilan laskiessa

- termisten värähtelyjen aiheuttama sironta samoin kuin elektroni-elektronisironta käyvät heikoiksi,
- epäpuhtauksien konsentraatio sekä elektronien ja epäpuhtauksien väliset vuorovaikutukset säilyvät lähes muuttumattomina.

Epäpuhtaussironta on elastista, jos epäpuhtauden perustilan ja ensimmäisen viritystilan välinen energiarako (tyypillisesti elektronivolttien suuruusluokkaa) on huomattavasti suurempi kuin terminen energia $k_B T$. Tällöin nimittäin

- vain harvat viritetyt epäpuhtausionit luovuttavat energiaa siroaville elektroneille ja

- elektronien käytettävissä on vain hyvin harvoja sellaisia alhaisen energian tiloja, joihin ne voisivat asettua luovutettuaan energiaansa epäpuhtausionin virityksiin.

Jos epäpuhtaudet ovat kyllin harvassa sekä niiden ja elektronien välinen potentiaali $U(\mathbf{r})$ kyllin heikko, on aikayksikköä kohti laskettu elastisen sironnan todennäköisyys tilasta $\mathbf{k}$ tilaan $\mathbf{k}'$ Fermin kultaisen säännön mukaan

$$W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \delta(\mathcal{E}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}(\mathbf{k}')) |\langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k}' \rangle|^2.$$

Tässä n_i on epäpuhtauksien lukumäärätiheys,

$$\langle \mathbf{k} | U | \mathbf{k}' \rangle = \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

ja Blochin tilat oletetaan normitetuiksi kuten

$$\int_{\text{koppi}} d\mathbf{r} |\psi_{\mathbf{k}}|^2 = v_{\text{koppi}}.$$

Huomataan, että

- delta-funktiosta johtuen $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 0$, jollei $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}(\mathbf{k}')$, ts. sironta on eksplisiittisesti elastista.
- $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ ei riipu lainkaan jakaumafunktiosta g . Tämä aiheutuu riippumattomien elektronien aproksimaatiosta: Paulin kieltoääntöä lukuunottamatta elektronin vuorovaikutus epäpuhtauden kanssa on täysin riippumaton muista elektroneista.
- vuorovaikutuksen U hermiittisyydestä johtuen $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ on symmetrinen,

$$W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = W_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}.$$

Tämä symmetria on voimassa, vaikka potentiaali U ei olisikaan heikko kunhan vain kide- ja epäpuhtauspotentiaalit ovat reaalisia ja invariantteja avaruuden inversiossa. Tämän symmetrian ollessa voimassa törmäystermin yksinkertaistuu muotoon

$$\left(\frac{dg(\mathbf{k})}{dt} \right)_{\text{coll}} = - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} [g(\mathbf{k}) - g(\mathbf{k}')].$$