Transportna svojstva

« Fizika čvrstog stanja »

Ivo Batistić

Fizički odsjek, PMF
Sveučilište u Zagrebu

predavanja 2014/2015 (zadnja inačica 21. srpnja 2016.)

Pregled predavanja

Neravnotežno stanje

Do transportnih pojava dolazi u prostorno nehomogenim sustavima: tamo gdje postoji temperaturni gradijent ili/i prostorno nehomogena gustoća čestica ili/i neko vanjsko polje.

Prostorno nehomogeni sustavi su u neravnotežnom stanju.

- Općenito neravnotežna termodinamika je vrlo složeni problem za koji ne postoji recept kako što izračunati.
  (osim rješavanja Schrödingerove jednadžbe)

- U mnogim slučajevima, međutim, poremećaji izazvani vanjskim poljima su samo mala smetnja ravnotežnom stanju pa se mogu tretirati računom smetnje (teorija linearnog odziva).

Prostorno nehomogeni sustavi

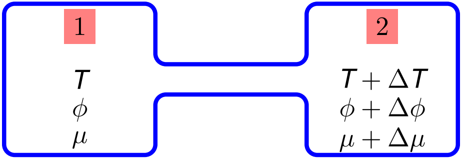
- Nehomogeni sustav se može promatrati kao niz malih povezanih termodinamičkih sustava koji su svi u **lokalnoj** termodinamičkoj ravnoteži.
- Točka prostora nije matematička - beskonačna mala, nego dovoljno velikih dimenzija da se može smatrati malim termodinamičkim sustavom.
- Točke prostora su međusobno u globalnom neravnotežnom stanju jer imaju različite temperature ili/i kemijske potencijale ili/i koncentracije čestica i sl.
- S obzirom na neravnotežno stanje, između njih postoji prijenos ili čestica ili energije ili neke druge fizikalne veličine.

Dva povezana sustava u međusobnoj neravnoteži

Prostorno nehomogeni sustavi - jednostavni slučaj

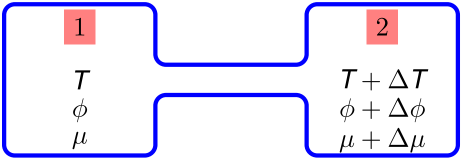
Promotrimo dva sustava (označena 1 i 2) koji su kontaktu

- pa mogu razmjenjivati energiju i čestice.
- ali se ne nalaze na istoj temperaturi, ni imaju isti kemijski potencijal, a i potencijal električnog polja je različit.



Svaki sustav je lokalno u ravnoteži, ali međusobno su u neravnotežnom stanju. Između sustava doći će do razmjene energije i čestica.

Prostorno nehomogeni sustavi - jednostavni slučaj



U jedinici vremena Δt neka je:

- promjena energije 1. sustava: $\Delta U_1 \equiv \Delta U = -\Delta U_2$.
- te promjena broja čestica: $\Delta n_1 \equiv \Delta n = -\Delta n_2$.
- Čestice imaju naboj q.

Za svaki sustav posebno moguće je napisati osnovnu relaciju termodinamike:

Promjena entropije 1. sustava: $$\Delta S_1 = \frac{\Delta U}{T} - \frac{\mu(T) + q\,\phi}{T}\,\Delta n$$

Promjena entropije 2. sustava: $$\Delta S_2 = -\frac{\Delta U}{T + \Delta T} + \frac{\mu(T + \Delta T) + q\,(\phi + \Delta\phi)}{T + \Delta T}\,\Delta n$$

Prostorno nehomogeni sustavi - jednostavni slučaj

Ukupna promjena entropije u jedinici vremena:

$$\frac{\Delta S}{\Delta t} \approx \frac{\Delta U}{\Delta t}\,\frac{1}{T}\left[\frac{\Delta T}{T}\right] + q\,\frac{\Delta n}{\Delta t}\,\frac{1}{T}\left[\Delta\phi + \Delta\frac{\mu}{q}\right]$$

$$J_1 = \frac{\Delta U}{\Delta t} \quad \text{Toplinska struja } W$$

$$J_2 = q\,\frac{\Delta n}{\Delta t} \quad \text{Struja naboja } I$$

Generalizirane sile:

$$X_1 = \left[\frac{\Delta T}{T}\right] \quad \text{za toplinsku struju}$$

$$X_2 = \left[\Delta\phi + \Delta\frac{\mu}{q}\right] \quad \text{za električnu struju}$$

Općenito vrijedi da je porast entropije u jedinici vremena:

$$\frac{\Delta S}{\Delta t} = \frac{1}{T}\sum_i J_i X_i$$

Prostorno nehomogeni sustavi - jednostavni slučaj

- Ako je $X_2 = 0$, postoji samo struja topline. Prirast entropije u jedinici vremena:
$$\frac{\Delta S}{\Delta t} = \frac{W \Delta T}{T^2}$$

- Ako je $\Delta T = 0$, postoji samo električna struja koja stvara Jouleovu toplinu:
$$\frac{\Delta S}{\Delta t} = \frac{I \Delta \phi}{T}$$
(pretpostavlja se da je $\mu(T)$ funkcija temperature!)

Onsagerove relacije

Onsagerove relacije

Za sustave u *blagom* neravnotežnom stanju može se pretpostaviti **linearna veza** između struja i generaliziranih sila koje su ih izazvale (teorija linearnog odgovora):

$$J_i = \sum_j L_{ij} X_j$$

pa je:

$$\frac{\Delta S}{\Delta t} = \frac{1}{T} \sum_{i,j} L_{ij} X_i X_j \qquad (> 0) \text{ također}$$

Matrica linearnog odgovora koja povezuje generalizirane sile i struje je simetrična:

$$L_{ij} = L_{ji}$$

L. Onsager, Phys. Rev. **37** (1931) 405
L. Onsager, Phys. Rev. **38** (1931) 2265

i **nije negativna.** Entropija se u vremenu povećava.

Nobelova nagrada 1968.

Lars Onsager - Nobelova nagrada 1968. za otkriće «Onsagerovih relacija» koje su od fundamentalne važnosti u termodinamici i fizici ireverzibilnih procesa.

Poopćenje na nehomogeni sustav

Izvedene relacije mogu se poopćiti na nehomogene sustave izložene vanjskom polju ili/i u kojima postoji temperaturni gradijent.

- Svaka točka prostora smatra se malim termodinamičkim sustavom koji je u lokalnoj ravnoteži.
- Dimenzija ”točaka” treba biti puno veća od srednjeg slobodnog puta čestica, ℓ. To je uvjet postojanja lokalnog ravnotežnog stanja.
- Različite (susjedne) prostorne točke su u međusobnoj neravnoteži, jer u njima može biti različita koncentracija čestica, kemijski potencijali, temperature i sl.
- Prostorne točke mogu razmjenjivati energiju i čestice.

Poopćenje na nehomogeni sustav

Za opis razmjene energije i čestica (naboja) između različitih susjednih dijelova prostora uvodimo gustoće struje:

$$
\begin{aligned}
\vec{j}_n(\vec{r}) &= 2\int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, \vec{v}\cdot 1\cdot f(\vec{r},\vec{p}) \qquad (\sim \text{gustoća čestica} \times \bar{\vec{v}}) \\
\vec{j}(\vec{r}) &= 2\int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, \vec{v}\cdot q\cdot f(\vec{r},\vec{p}) \qquad (\sim \text{gustoća naboja} \times \bar{\vec{v}}) \\
\vec{j}_U(\vec{r}) &= 2\int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, \vec{v}\cdot e\cdot f(\vec{r},\vec{p}) \qquad (\sim \text{gustoća energije} \times \bar{\vec{v}})
\end{aligned}
$$

gdje je $f(\vec{r},\vec{p})$ jednočestična funkcija raspodjele.

Gustoće struje neke veličine su dane gustoćom te veličine pomnoženom s brzinom gibanja čestica u toj točci prostora.

Poopćenje na nehomogeni sustav

Ako u sustavu postoji električno polje tada je gustoća električne struje

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} = -\sigma \vec{\nabla} \phi$$

gdje je σ električna vodljivost (općenito je tenzor). Ako postoji temperaturni gradijent tada postoji i gustoća toplinske struje:

$$\vec{j}_Q = -\kappa \vec{\nabla} T$$

gdje je κ toplinska vodljivost. Ako postoji nehomogena raspodjela čestica, ona će dovesti do strujanja čestica, što se može opisati gustoćom struje:

$$\vec{j}_n = -D \vec{\nabla} n$$

gdje je D koeficijent difuzije.

Poopćenje na nehomogeni sustav

Između struje topline i struje entropije postoji veza koja dolazi iz termodinamike:

$$\vec{j}_Q = T\vec{j}_S$$

Također, postoji veza između struje čestica i električne struje. Ako električnu struju vode elektroni, tada je:

$$\vec{j} = (-e)\vec{j}_n$$

Iz termodinamičke relacije:

$$T\,dS = dU - \mu\,dN$$

dobiva se i treća veza:

$$T\vec{j}_S = \vec{j}_U - \mu\vec{j}_n$$

Poopćenje na nehomogeni sustav

Za gustoću entropije, čestica i unutrašnju energiju uvodimo oznake:

$$s = \frac{S}{V} \qquad n = \frac{N}{V} \qquad u = \frac{U}{V}$$

Vremenske promjene entropije, broja čestica i unutrašnje energije također su povezane termodinamičkom relacijom:

$$T\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t} - \mu\frac{\partial n}{\partial t}$$

te vrijede relacije balansa:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}_n &= 0 && \text{(čestica)}\\
\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}_U &= \vec{E}\cdot\vec{j} && \text{(energije)}\\
\frac{\partial s}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}_S &= \dot{s} && \text{(entropije)}
\end{aligned}$$

Poopćenje na nehomogeni sustav

Za produkciju entropije u jedinici volumena:

$$\begin{aligned}
\dot{s} &= \frac{1}{T}\left(\frac{\partial u}{\partial t} - \mu\frac{\partial n}{\partial t}\right) + \vec{\nabla}\left(\frac{\vec{j}_Q}{T}\right) = \dots \\
&= \frac{1}{T}\left\{\left(\vec{E} - \frac{\vec{\nabla}\mu}{q}\right)\cdot\vec{j} - \frac{\vec{\nabla}T}{T}\cdot\vec{j}_Q\right\} \qquad (q = -e!) \\
&= \frac{1}{T}\left(\vec{X}_e\cdot\vec{j} + \vec{X}_Q\cdot\vec{j}_Q\right)
\end{aligned}$$

gdje su poopćene sile:

$$\begin{aligned}
\vec{X}_e &= \vec{E} - \frac{\vec{\nabla}\mu}{q} = -\vec{\nabla}\left(\phi + \frac{\mu}{q}\right) \\
\vec{X}_Q &= -\frac{\vec{\nabla}T}{T}
\end{aligned}$$

Onsagerove relacije - ponovo

Između poopćenih sila i gustoća struja postoji linearna veza:

$$\vec{j} = \sum_j L_{ij} \vec{X}_j$$

Elementi tenzora L_{ij} nisu nezavisni, nego postoji simetrija

$$L_{ij} = L_{ji}$$

Tako npr. za električnu i toplinsku struju:

$$\begin{aligned} \vec{j} &= L_{11}\left(\vec{E} - \frac{\vec{\nabla}\mu}{q}\right) + {\color{red}L_{12}}\left(-\frac{\vec{\nabla}T}{T}\right) \\ \vec{j}_Q &= {\color{red}L_{12}}\left(\vec{E} - \frac{\vec{\nabla}\mu}{q}\right) + L_{22}\left(-\frac{\vec{\nabla}T}{T}\right) \end{aligned}$$

Napomena:
Za slučaj aksijalnog vektora kao što je magnetsko polje, vrijedi:

$$L_{ij}(B) = L_{ji}(-B)$$

Kvaziklasični pristup

Kvaziklasični pristup

Za izračunavanje Onsagerovih transportnih koeficijenata trebamo riješiti jednadžbe gibanja (Schrödingerovu jednadžbu) ili se poslužiti računom smetnje (teorija linearnog odziva).

Mi ćemo se poslužiti **kvaziklasičnom aproksimacijom** u kojoj **kvantne** čestice imaju i **položaj** i **impuls**.

U kvaziklasičnom opisu čestice su valni paketi.

Određeni uvjeti moraju biti zadovoljeni da bi aproksimacija bila dobra. Valne pakete konstruiramo iz kvantnih stanja koja su samo približno vlastita stanja hamiltonijana. Naime zbog raspršenja na nečistoćama, i međusobnog sudaranja (međudjelovanja) čestica, kvantna stanja od kojih polazimo imaju konačno vrijeme života.

Uvjeti kvaziklasičnog pristupa

- Vremenska dinamika valnog paketa ograničena je nasumice raspoređenim nepravilnostima rešetke i sudarima s drugim česticama.
- Postoji prosječni vremenski interval između dva sudara (vrijeme života), τ, odnosno srednji slobodni put, ℓ, koji valni paket prođe prije nego što doživi sudar ili raspršenje.
- Za kvaziklasični opis potrebno je da je neodređenost valnog paketa:

$$\Delta r \ll \ell$$

- Impuls valnog paketa je rada veličine recipročne konstante rešetke, pa je:

$$p \sim \frac{\hbar}{a} \gg \Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta r} \gg \frac{\hbar}{\ell} \qquad \Rightarrow \qquad \ell \gg a$$

Uvjeti kvaziklasičnog pristupa

- Budući da transportu sudjeluju čestice (elektroni) u uskom pojasu oko Fermijeve razine, neodređenost u energiji je rada veličine:

$$\Delta e \sim k_B T$$

- Vremensko gušenje zbog sudaranja i međudjelovanja treba biti puno manje od neodređenosti u energiji:

$$k_B T \sim \Delta e \gg \frac{\hbar}{\tau}$$

- Na dovoljno niskim temperaturama ovi uvjeti neće biti zadovoljeni.

Uvjeti za kvaziklasični pristup:

$$\ell \gg a \qquad\qquad \tau \gg \frac{\hbar}{k_B T}$$

Boltzmannova transportna jednadžba

Liouvilleova jednadžba

Općenito za statistički opis sustava služimo se konceptom **ansambla** i **funkcijom raspodjele** članova ansambla u konfiguracijskom (faznom) prostoru dimenzije $6N$, gdje je N broj čestica sustava. Pomoću funkcije raspodjele moguće je izračunati srednje vrijednosti fizikalnih veličina.

Funkcija raspodjele ansambla zadovoljava Liouvilleovu jednadžba koja opisuje gibanje članova ansambla u konfiguracijskom prostoru.

Liouvilleovu jednadžba je jednadžba balansa (kontinuiteta) koja odražava činjenicu da je broj članova ansambla konstantan u vremenu.

Liouvilleova jednadžba

Neka je:

$$f_A(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2 \ldots \vec{r}_N, \vec{p}_N, t)$$

funkcija raspodjele ansambla u konfiguracijskom prostoru.

Iz funkcije raspodjele ansambla može se izvesti **jednočestična funkcija raspodjele** $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$:

$$\begin{aligned} f(\vec{r}, \vec{p}, t) &= \left\langle \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\delta(\vec{p} - \vec{p}_i) \right\rangle \\ &= N \int \prod_{i=1}^{N} d\vec{r}_i d\vec{p}_i \;\; \delta(\vec{r} - \vec{r}_1)\, \delta(\vec{p} - \vec{p}_1) \;\; f_A(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2 \ldots \vec{r}_N, \vec{p}_N, t) \end{aligned}$$

a iz Liouvilleove jednadžbe izlazi *jednadžba gibanja* jednočestične funkcije raspodjele.

Boltzmannova transportna jednadžba (BTE)

Ako u sustavu **nema** sudara i međudjelovanja, dobivena jednadžba gibanja dana je gibanjem nemeđudjelujućih čestica:

$$
\begin{aligned}
\frac{df}{dt} &= \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \dot{\vec{p}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \\
&= \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = 0 \qquad (\text{BTE})
\end{aligned}
$$

gdje je $\vec{F}$ vanjska sila kojoj su čestice izložene. Jednadžba se može dobiti i direktno, pretpostavljajući da je:

$$
f(t, \vec{r}, \vec{p}) = f(t + \Delta t, \vec{r} + \vec{v}\Delta t, \vec{p} + \vec{F}\Delta t)
$$

jer se članovi ansambla u faznom prostoru premještaju prema Hamiltonovim jednadžbama gibanja.

Napomena: Pretpostavilo se je da unutar intervala Δt se može zanemariti prostorna-vremenska ovisnost sile.

Boltzmannova transportna jednadžba (BTE)

Raspršenja čestica na nečistoćama (nepravilnostima) i međusobne sudare čestica nije moguće jednostavno opisati Hamiltonovim jednadžbama gibanja za vremenske intervale unutar kojih se događa veliki broj sudara.

Statistički gledajući, sudari se događaju povremeno i nasumice mijenjajući putanje čestica (i putanje članova ansambla) odnosno mijenjajući funkciju raspodjele.

Ovakvi događaji nisu obuhvaćeni izvedenom jednadžbom gibanja za jednočestičnu funkciju raspodjele.

Točan izvod iz Liouvilleove jednadžbe vodi na sustav povezanih jednadžbi gibanja za jednočestične i višečestične funkcije raspodjele (Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon ili BBGKY hijerarhija).

Boltzmannova transportna jednadžba (BTE)

Pojednostavljeni pristup (molekularni kaos).

- Jednadžba gibanja jednočestične funkcije raspodjele ima dodatni član koji opisuje sudare:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \vec{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}}$$

- Među sudarima nema korelacija. Može ih se statistički tretirati.
- Sudari se događaju lokalno.
- Sudari se događaju na puno kraćim vremenskim skalama (trenutno!) od vremenskih intervala kao ja nas zanimaju.

Za proračun vjerojatnosti nekog sudara možemo rabiti kvantnu mehaniku.

Boltzmannova transportna jednadžba

Promotrimo različite doprinose BTE:

- **Eksplicitna vremenska ovisnost** funkcije raspodjele postoji samo ako se sustav nije u stacionarnom stanju.
  Ako je stanje sustava stacionarno tada je:

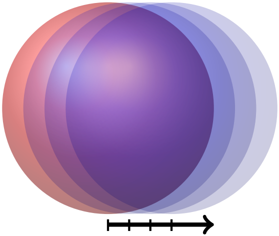
$$\underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)}_{=0} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}}$$

- Postojanje **vanjske sile** dovodi do ubrzanja svih čestica:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \underbrace{\vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}}}_{\neq 0} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}}$$

Boltzmannova transportna jednadžba

Vremenska evolucija funkcije **raspodjele elektrona u impulsnom prostoru**:



Funkcija raspodjele za elektrone je Fermijeva kugla. Pod djelovanjem konstantnog električnog polja centar kugle se linearno translatira u vremenu.

$$f(\vec{r}, \vec{p} - \vec{F}t) = \theta(p_F - |\vec{p} - \vec{F}t|)$$

- Ukoliko je sustav prostorno nehomogen, funkcija raspodjele je različita u različitim dijelovima prostora. Gibanje čestica, dovest će do promjene funkcije raspodjele što je opisano **difuznim** članom:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \underbrace{\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}}}_{\neq 0} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}}$$

Boltzmannova transportna jednadžba

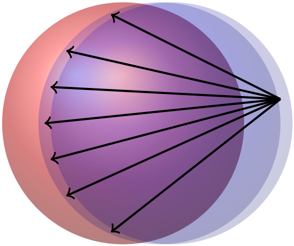
- U stacionarnom stanju, bez vanjskih polja, u sustavu u kojem nema struja funkcija raspodjele ne ovisi položaju niti o impulsu. Jedina ovisnost je ona o energiji. U tom je slučaju:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}}}_{=0}$$

  Sudari/raspršenja ne mijenjaju funkciju raspodjele iako se oni cijelo vrijeme događaju. Broj prijelaza iz nekog stanja $|a\rangle$ u stanje $|b\rangle$ kompenziran je s istim brojem prijelaza iz stanja $|b\rangle$ u $|a\rangle$.

Boltzmannova transportna jednadžba

Do neravnoteže u broju prijelaza dolazi samo ako se sustav izloži vanjskom polju. Tada je pomicanje funkcije raspodjele u impulsnom prostoru kompenziranom prijelazima izazvanim sudarima/raspršenjima.



Funkcija raspodjele pomaknuta je iz ravnoteže, s centrom proporcionalnim srednjoj brzini čestica. Daljnje pomicanje u impulsnom prostoru je kompenzirano povećanim raspršenjem čestica na drugu stranu Fermijeve površine. Ova raspršenja potpuno poništavaju gibanje funkcije raspodjele zbog prisustva vanjske sile.

Boltzmannova transportna jednadžba

Vjerojatnost sudara u jedinici vremena:

$$w_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|H_{int}|i\rangle|^2 \delta(e_f - e_i \pm \hbar\omega) \qquad \big(\text{Fermijevo zlatno pravilo}\big)$$

$$w_{i\to f} = w_{f\to i} \qquad \big(\text{Vrijedi simetrija za vjerojatnost sudara}\big)$$

Ako je čestica doživjela sudar:

$$|i\rangle = (\vec{r},\vec{p}) \longrightarrow (\vec{r},\vec{p}\,') = |f\rangle$$

funkcija raspodjele $f(\vec{r},\vec{p})$ se smanjuje
a funkcija raspodjele $f(\vec{r},\vec{p}\,')$ se povećava

Prirast funkcije raspodjele u stanju $(\vec{r},\vec{p})$:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}} (\vec{r},\vec{p}) = \sum_{\vec{p}\,'} w_{\vec{p}\leftrightarrow\vec{p}\,'} \left\{ f(\vec{r},\vec{p}\,') - f(\vec{r},\vec{p}) \right\}$$

Sudari se događaju unutar točke prostora $\vec{r}$ koja je mali termodinamički sustav veći od srednjeg slobodnog puta ℓ.

Boltzmannova transportna jednadžba

Radi jednostavnosti označimo: $f(\vec{r}, \vec{p}) = f_{\vec{p}}$.

Prirast funkcije raspodjele ako su čestice **fermioni**:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}} = \sum_{\vec{p}'} w_{\vec{p} \leftrightarrow \vec{p}'} \left\{ f_{\vec{p}'}(1 - f_{\vec{p}}) - f_{\vec{p}}(1 - f_{\vec{p}'}) \right\}$$

uzima u obzir da čestica se ne može raspršiti u stanje ako je ono već popunjeno drugom česticom.

Prirast funkcije raspodjele ako su čestice **bozoni**:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}} = \sum_{\vec{p}'} w_{\vec{p} \leftrightarrow \vec{p}'} \left\{ f_{\vec{p}'}(1 + f_{\vec{p}}) - f_{\vec{p}}(1 + f_{\vec{p}'}) \right\}$$

uzima u obzir da bozoni imaju tendenciju da budu u istom kvantnom stanju.

Boltzmannova transportna jednadžba

Moguće su različite vrste prijelaza i sudara.

- Sudar dvaju čestica.
- Proces emisije ili apsorpcije nekog bozonskog pobuđenja (fonona, fotona, …)
- Elastični sudari na nepravilnostima rešetke
- Procesi koji ne čuvaju broj čestica (uhvat, ionizacija, …)

Struktura sudarnog člana u svim slučajevima ima sličnu (i složeniju) strukturu gore navedenim primjerima.

Aproksimacija relaksacijskog vremena

Aproksimacija relaksacijskog vremena

U mnogim situacijama sudarni se član može aproksimirati:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}} = -\frac{f(\vec{r},\vec{p}) - f_0}{\tau(\vec{r},\vec{p})}$$

što je poznato kao **aproksimacija relaksacijskog vremena**.
f_0 je ravnotežna funkcija raspodjele.

Veličina τ se naziva **relaksacijsko vrijeme**, i ona može ovisiti o impulsu (energiji) i/ili položaju. Međutim ta se ovisnost vrlo se često zanemaruje.

Boltzmannova transportna jednadžba (BTE) zapisana u aproksimaciji relaksacijskog vremena:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \vec{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

Aproksimacija relaksacijskog vremena

- Zanemarimo prostornu i $\vec{k}$-ovisnost (energijsku) ovisnost relaksacijskog vremena.
- Neka u sustavu nema vanjskih sila
- Neka je funkcija raspodjele u trenutku $t = 0$ pomaknuta od ravnotežne vrijednosti

Tada je rješenje BTE u aproksimaciji relaksacijskog vremena:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f_0 + \left[f(\vec{r}, \vec{p}, t = 0) - f_0 \right] \; e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Funkcija raspodjele pomaknuta iz ravnotežne vrijednosti se relaksira u ravnotežnu vrijednost s vremenom relaksacije τ. Relaksacija je dana sa sudarnim članom u BTE.

Aproksimacija relaksacijskog vremena

Relaksacijsko je vrijeme povezano je s procesima raspršenja. Npr. u slučaju raspršenja na nečistoćama:

$$\frac{1}{\tau} = \int \frac{d\Omega'}{4\pi}\, w(\theta)\ (1 - \cos\theta) \qquad\qquad (> 0)$$

gdje je:

$$w(\theta) = \frac{\pi}{\hbar}\frac{N_i}{V}|v(\theta)|^2\, g(e)$$

a $g(e)$ je gustoća stanja, N_i je broj nečistoća u sustavu, te

$$v_{\vec{p}\vec{p}'} = v(\angle(\vec{p},\vec{p}')) = v(\theta)$$

je matrični element potencijala nečistoće koji ovisi o kutu θ između početnog $\vec{p}$ i konačnog impulsa $\vec{p}'$.

▸ DETALJNI RAČUN ZA RASPRŠENJE NA NEČISTOĆAMA

Aproksimacija relaksacijskog vremena

Ukoliko u sustavu postoji više različitih procesa koji raspršuju čestice, inverzi relaksacijskih vremena se zbrajaju:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots$$

Matthiessenovo pravilo

- raspršenje ne nečistoćama. Temperaturno neovisno, i dominantno na niskim temperaturama.
- raspršenje na fononima. Temperaturno ovisno, dominira na visokim temperaturama.
- Kulonsko raspršenje. Samo Umklapp procesi, koji ne čuvaju ukupni impuls čestica, doprinose.
- Kondo raspršenje na nezasjenjenim magnetskim nečistoćama - važno na niskim temperaturama.

Raspršenje na akustičkim fononskim titranjima

Za kvazielastično raspršenje na akustičkim fononskim titranjima:

$$e_{\vec{p}} = e_{\vec{p}'} \pm \hbar\omega_{\vec{k}} \approx e_{\vec{p}'}$$

u kojem elektron promijeni komponentu impulsa u smjeru električnog polja Δp:

$$\Delta p = p(1 - \cos\theta) = \frac{\hbar^2 k^2}{2p}$$

vrijeme relaksacije:

$$\frac{1}{\tau_{ph}} \sim \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} N_{ph}(\vec{k}) \overbrace{k^2}^{\sim(1-\cos\theta)} \sim \begin{cases} T^5 & \text{za } T \ll \Theta_D/5 \\ T & \text{za } T \geq \Theta_D/5 \end{cases}$$

Električna vodljivost

Sustav je prostorno homogen, ali je izložen električnom polju. Boltzmannova transportna jednadžba u stacionarnom stanju:

$$q\vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

Pretpostavljamo da je deformacija funkcije raspodjele mala:

$$f = f_0 + \delta f \qquad \text{gdje je } |\delta f| \ll f_0$$

Tada je:

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \approx \frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial f_0}{\partial e} \frac{\partial e}{\partial \vec{p}} = \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial e}$$

Tako se dobiva da je:

$$\delta f \approx q \left(\vec{E} \cdot \vec{v}\right) \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right)$$

Električna vodljivost

Kako je gustoća električne struje:

$$
\begin{aligned}
\vec{j} &= 2q \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, \vec{v}\, f(\vec{p}) = 2q \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, \vec{v}\, (f_0 + \delta f) \\
&= 2q^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, \vec{v}\, (\vec{v}\cdot\vec{E})\, \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right) \\
&= q^2 \int de \underbrace{\left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right)}_{\sim\delta(e-e_F)} g(e) \int \frac{d\Omega}{4\pi}\, \vec{v}(\vec{v}\cdot\vec{E})\, \tau
\end{aligned}
$$

U anizotropnom sustavu:

$$j_i = \sum_j \sigma_{ij} E_j$$

gdje je tenzor električne vodljivosti:

$$\sigma_{ij} = q^2 \langle v_i v_j \rangle_F\, g(e_F)\, \tau$$

U izotropnom sustavu je:

$$\sigma_{ij} \approx \delta_{ij} \times \frac{1}{3} q^2 \, v_F^2 \, g(e_F) \, \tau$$

Za paraboličnu izotropnu elektronsku disperziju izraz se svodi na poznati Drudeov:

$$\sigma = \frac{q^2 N_{el} \, \tau}{m}$$

Općenito može se pokazati da je (ako je τ konstantno!):

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij} &= -2q^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \, v_i \, \tau \, \frac{\partial f}{\partial p_j} = -2q^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \, \frac{\partial e}{\partial p_i} \, \tau \, \frac{\partial f}{\partial p_j} \\
&= 2q^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \, \overbrace{\frac{\partial^2 e}{\partial p_i \partial p_j}}^{\left(\frac{1}{m}\right)_{ij}} \, \tau \, f(\vec{r}, \vec{k}) = q^2 N_{el} \, \tau \left\langle \left(\frac{1}{m} \right)_{ij} \right\rangle \\
&= -2q^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \, \frac{\partial^2 e}{\partial p_i \partial p_j} \, \tau \left[1 - f(\vec{r}, \vec{k}) \right] \qquad \left[\begin{array}{c} \text{simetrija} \\ \text{elektron} \leftrightarrow \text{šupljina} \end{array} \right]
\end{aligned}$$

Brzina zanošenja

U prisustvu električnog polja (i u stacionarnom stanju) funkcija raspodjele (Fermijeva kugla) u konfiguracijskom prostoru je pomaknuta iz ishodišta.

Takva stanje se može promatrati kao da sve čestice imaju jednu dodatnu brzinu koju nazivamo **brzina zanošenja** (*drift velocity*). Gustoća struje:

$$
\begin{aligned}
j_i &= \sum_j \sigma_{ij} E_j = 2q^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left(\sum_j \frac{\partial^2 e}{\partial p_i \partial p_j} E_j \right) \tau\, f(\vec{r}, \vec{k}) \\
&= \bar{v}_i q\, N_{el} \qquad \Rightarrow
\end{aligned}
$$

$$
|\bar{v}_i| = \frac{\sum_j \sigma_{ij} E_j}{|q|\, N_{el}} = \left| \begin{matrix} \text{izotropni} \\ \text{slučaj} \end{matrix} \right| = \frac{\sigma}{e\, N_{el}}\, E_i = \mu\, E_i
$$

gdje je
$$
\mu = \frac{\sigma}{e\, N_{el}} = \frac{e\tau}{m}
$$

mobilnost čestica (ne miješati s kemijskim potencijalom!)

Električna vodljivost - neke procjene

Neka su električno polje E=1 V/m, koncentracija elektrona N_{el}= 5 10^{28} m^{-3}, te vodljivost $\sigma \approx 10^7\ \Omega^{-1}$ m^{-1}.

- Relaksacijsko vrijeme:

$$\tau = \frac{m\,\sigma}{N_{el}\,e^2} = \frac{9.1\,10^{-31}\,\text{kg}\,10^7\,\Omega^{-1}\text{m}^{-1}}{5.0\,10^{28}\,\text{m}^{-3}\,(1.6\,10^{-19}\,\text{C})^2} \approx 10^{-14}\ \text{s}$$

- Brzina zanošenja:

$$\begin{aligned}\bar{v} &= \frac{\sigma}{N_{el}\,e}E = \frac{10^7\,\Omega^{-1}\text{m}^{-1}\ 1\,\text{V m}^{-1}}{5.0\,10^{28}\,\text{m}^{-3}\ 1.6\,10^{-19}\,\text{C}} \\ &= 10^{-3}\,\text{m/s} \ll v_F \sim 10^6\ \text{m/s}\end{aligned}$$

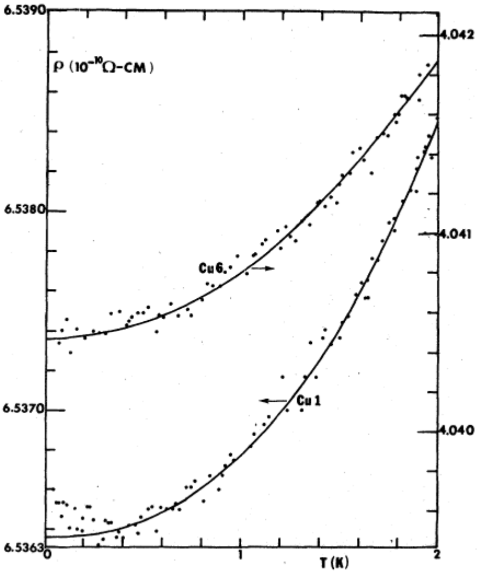
- Srednji slobodni put:

$$\lambda \sim v_F\,\tau \approx 10^{-8}\,\text{m} = 100\,\text{Å} \gg \text{konstante rešetke}$$

Električna vodljivost

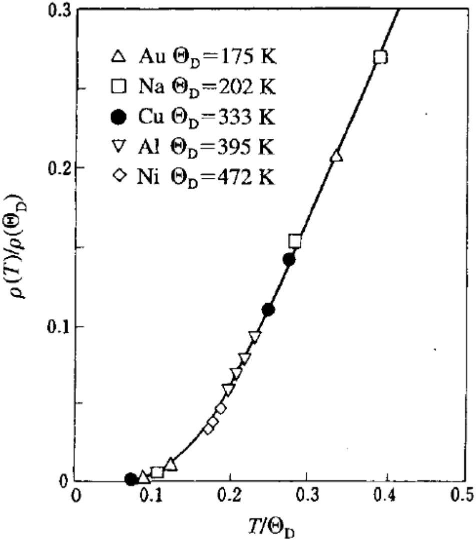
- Za tipične metale, srednji slobodni put je puno veći od konstante rešetke. Uvjet kvaziklasične aproksimacije je ispunjen.
- Tipično električno polje stvara dodatnu brzinu koja je 10^{-9} puta manja od brzina elektrona na Fermijevoj razini.
- Tipično relaksacijsko vrijeme je 10^{-14} s. U jednoj sekundi elektron se 10^{14} puta sudari ili na nečistoćama ili s drugim česticama.
- Temperaturna ovisnost koja postoji u vodljivosti (ili otpornosti) metala dolazi od temperaturne ovisnosti relaksacijskog vremena.

Električna vodljivost



Niskotemperaturni otpor dvaju uzoraka bakra različite čistoće. Posuđeno od M. Khoshenevisan et al. Phys. Rev. B **19** (1979) 3873.

Električna vodljivost



Otpor različitih metala kao funkcija T/Θ_D. Posuđeno iz knjige F.J.Blatt, Physics of Electronic Conduction in Solids, McGraw-Hill Book Co., New York (1968).

Električna vodljivost

- U području niskih temperatura ($T \ll \Theta_D/5$) čestice se pretežno raspršuju na nečistoćama. Raspršivanje na nečistoćama nema temperaturnu ovisnost.
- Za $T \leq \Theta_D/5$ **očekivano** ponašanje otpornosti je $\sim T^5$ (jednostavni metali s jednom vrpcom).
  U metalima s više vrpci opaža se $\rho \sim T^n$ ponašanje, gdje je $n \neq 5$.
- U svim metalima u području temperatura $T \geq \Theta_D/5$ temperaturna ovisnost otpornosti je $\sim T$.
- U metalima s magnetskim nečistoćama na niskim temperaturama opaža se anomalno ponašanje otpornosti. Minimalna otpornost nije na temperaturi $T = 0$, nego na nekoj konačnoj temperaturi.

Transportna svojstva poluvodiča

Električna vodljivost poluvodiča

Sasvim pune i sasvim prazne vrpce ne doprinose vodljivosti:

$$2q^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial^2 e}{\partial p_i \partial p_j} \tau \underbrace{f(\vec{r}, \vec{k})}_{\equiv 1} = 0$$

jer je energija periodična funkcija valnog broja.

- Poluvodiči su izolatori na $T = 0$.
- Na konačnoj temperaturi dio elektrona iz valentne vrpce je pobuđen u vodljivu vrpcu.
- Nastale šupljine u valentnoj vrpci i pobuđeni elektroni u vodljivoj vrpci daju konačnu vodljivost.
- Temperaturna ovisnost vodljivosti u poluvodičima dolazi od termalno pobuđenih elektrona i šupljina.
- Mobilnost μ je veličina koja ne sadrži broj pobuđenih elektrona i šupljina, pa tako bolje odražava transportna svojstva poluvodiča.

Električna vodljivost

Općenito vodljivost u izotropnom sustavu:

$$\sigma \quad = \quad q^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e_{\vec{k}}}\right) \tau(e_{\vec{k}}) \, \frac{1}{3} \, \vec{v}_{\vec{k}}^2$$

Promotrimo samo doprinos koji dolazi od elektrona u vodljivoj vrpci (q=-e):

$$\sigma \quad = \quad \frac{2e^2}{3\, m_e} \int_{e_c}^{\infty} de \, g_c(e) \, (e - e_c) \, \tau(e) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right)$$

gdje je $g_c(e)$ je gustoća stanja vodljive vrpce:

$$g_c(e) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{e - e_c}$$

i

$$e - e_c \approx \frac{m_c \vec{v}^2}{2}$$

Broj pobuđenih elektrona

Budući da je kemijski potencijal u procijepu između vodljive i valentne vrpce

$$f_0(e) = \frac{1}{e^{(e-\mu)/k_B T} + 1} \approx e^{-(e-e_c)/k_B T}\, e^{-(e_c-\mu)/k_B T}$$

broj pobuđenih elektrona je:

$$\begin{aligned} N_{el}(T) &= \int_{e_c}^{\infty} de\, g_c(e)\, f_0(e) \\ &\approx e^{-(e_c-\mu)/k_B T}\, \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} dx\, \sqrt{x}\, e^{-x/k_B T} \\ &= \underbrace{2\,\frac{(2\pi\, m_e\, k_B T)^{3/2}}{h^3}}_{\downarrow}\, e^{-(e_c-\mu)/k_B T} \end{aligned}$$

prefaktor koji dolazi iz parabolične gustoće stanja

Električna vodljivost

Na isti način za vodljivost se dobiva da je:

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{2e^2}{3\,m_e}\int\limits_{e_c}^{\infty} de\, g_c(e)\,(e-e_c)\,\tau(e)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial e}\right)\\ &= \frac{N_{el}(T)e^2}{m_e}\langle\tau\rangle\end{aligned}$$

gdje je:

$$\langle\tau\rangle = \frac{2}{3k_B T}\,\frac{\int\limits_{e_c}^{\infty} de\, g_c(e)\; e^{-(e-e_c)/k_B T}\,(e-e_c)\,\tau(e)}{\int\limits_{e_c}^{\infty} de\, g_c(e)\; e^{-(e-e_c)/k_B T}}$$

usrednjeno relaksacijsko vrijeme.

Električna vodljivost

Električna vodljivost može se zapisati kao:

$$\sigma_{el} = e\, N_{el}(T) \mu_{el}$$

gdje je mobilnost:

$$\mu_{el} = \frac{e}{m_e} \langle \tau \rangle$$

Ukupna vodljivost sadrži doprinose i od vodljive i od valentne vrpce:

$$\sigma = e\, [N_{el}(T)\mu_{el} + N_h(T)\mu_h]$$

gdje je koncentracija šupljina:

$$N_h(T) = \int_{-\infty}^{e_v} de\, g_v(e)\, (1 - f_0(e)) = 2\, \frac{(2\pi\, m_h\, k_B T)^{3/2}}{h^3}\, e^{-(\mu - e_v)/k_B T}$$

U intrinzičnim poluvodičima broj pobuđenih šupljina i elektrona je isti.

Temperaturna ovisnost mobilnosti

Temperaturna ovisnost mobilnosti dana je s temperaturnom ovisnošću usrednjenog relaksacijskog vremena $\langle\tau\rangle$.

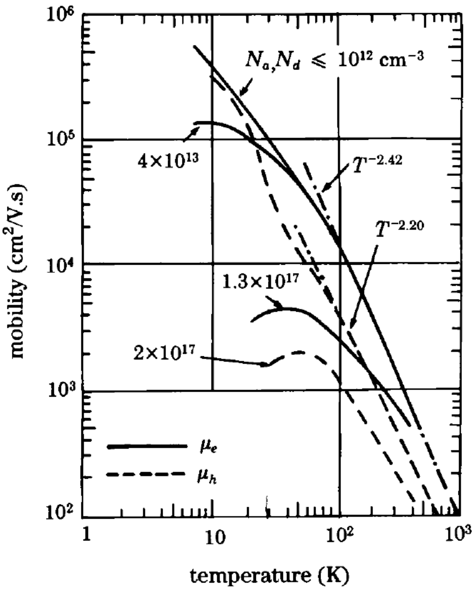
- U području niskih temperatura dominira raspršenje na nabijenim nečistoćama za koje relaksacijsko vrijeme ima energijsku ovisnost:

$$\tau(e) \sim e^{3/2} \qquad \Rightarrow \qquad \mu_{el}(T) \sim \langle\tau\rangle \sim (k_B T)^{3/2}$$

- Na višim temperatura postoji raspršenje na akustičkim fononima za koje je:

$$\tau(e) \sim \frac{e^{-1/2}}{k_B T} \qquad \Rightarrow \qquad \mu_{el}(T) \sim \langle\tau\rangle \sim (k_B T)^{-3/2}$$

Temperaturna ovisnost mobilnosti



Temperaturna ovisnost mobilnosti u siliciju na različitim razinama dopiranja. Uočava se značajno odstupanje od $T^{-1.5}$ ponašanja koje se očekuje od raspršenja na akustičkim fononskim titranjima.

Dodatak - Raspršivanje na nečistoćama

Raspršivanje na nečistoćama

U 1. Bornovoj aproksimaciji vjerojatnost sudara na nečistoći je:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} V \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \, |U_{\vec{p}\vec{p}'}|^2 \, \delta(e(\vec{p}) - e(\vec{p}'))$$

gdje je $U_{\vec{p}\vec{p}'}$ matrični element međudjelovanja elektrona s nečistoćama. Međudjelovanje elektrona i nečistoća je kratkodosežno, a nečistoće su nasumično raspoređene. Potencijal od nečistoća:

$$U(\vec{r}) = \sum_j v(\vec{r} - \vec{R}_j)$$

gdje je $\vec{R}_j$ položaj j-te nečistoće a $v(\vec{r})$ je potencijal koji stvara. Neka je:

$$\phi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{e^{\imath\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} \, u_{\vec{p}}(\vec{r})$$

Blochova valna funkcija elektrona. Tada je:

$$U_{\vec{p}\vec{p}'} = \frac{1}{V} \sum_j e^{-\imath(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{R}_j/\hbar} v_{\vec{p}\vec{p}'}$$

Raspršivanje na nečistoćama

U 1. Bornovoj aproksimaciji vjerojatnost sudara na nečistoći je:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{V}\int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}\,|v_{\vec{p}\vec{p}'}|^2\,\left[\sum_{j,k} e^{-\imath(\vec{p}-\vec{p}')\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_k)/\hbar}\right]\,\delta(e(\vec{p})-e(\vec{p}'))$$

Ako su nečistoće nasumično raspoređene i ako ih je malo, tada usrednjenje po položaju nečistoća:

$$\langle\sum_{j,k} e^{-\imath(\vec{p}-\vec{p}')\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_k)/\hbar}\rangle = N_i$$

broj nečistoća. Dakle:

$$\langle w\rangle = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{N_i}{V}\int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}\,|v_{\vec{p}\vec{p}'}|^2\,\delta(e(\vec{p})-e(\vec{p}'))$$

Raspršivanje na nečistoćama

Promjena funkcije raspodjele zbog raspršenja na nečistoćama:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}} &= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{N_i}{V}\int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}\,|v_{\vec{p}\vec{p}'}|^2\,\delta(e(\vec{p})-e(\vec{p}'))\\
&\qquad \cdot\Big\{\underbrace{f(\vec{p}')[1-f(\vec{p})]}_{\text{povećanje zbog } \vec{p}'\to\vec{p}} - \underbrace{f(\vec{p})[1-f(\vec{p}')]}_{\text{smanjenje zbog } \vec{p}\to\vec{p}'}\Big\}\\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{N_i}{V}\int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3}\,|v_{\vec{p}\vec{p}'}|^2\,\delta(e(\vec{p})-e(\vec{p}'))\,\Big\{f(\vec{p}')-f(\vec{p})\Big\}\\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{N_i}{V}\int \frac{dS'}{|\vec{v}(\vec{p}')|}\,\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\,|v_{\vec{p}\vec{p}'}|^2\,\Big\{f(\vec{p}')-f(\vec{p})\Big\}
\end{aligned}$$

gdje je napravljena integracija po plohi konstantne energije.

Ako se uvrsti ravnotežna funkcija raspodjele dobiva da je integral nula. To je situacija koja postoji u ravnotežnom stanju.

Raspršivanje na nečistoćama

Vanjsko polje deformirat će funkciju raspodjele. Može se pretpostaviti da je promjena funkcije raspodjele mala:

$$f = f_0 + \delta f, \qquad |\delta f| \ll f_0$$

uvedimo oznaku:

$$w(\theta) = \frac{\pi}{\hbar}\frac{N_i}{V}|v(\theta)|^2 \, g(e)$$

gdje je $g(e)$ gustoća stanja, a

$$v_{\vec{p}\vec{p}'} = v(\angle(\vec{p}, \vec{p}')) = v(\theta)$$

je matrični element koji ovisi o kutu θ između $\vec{p}$ i $\vec{p}'$. Tada je:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}} = \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \, w(\theta) \left\{ \delta f(\vec{p}') - \delta f(\vec{p}) \right\}$$

Raspršivanje na nečistoćama

Deformacija funkcije raspodjele treba biti skalarna veličina proporcionalna električnom polju, dakle:

$$\delta f(\vec{p}) = \vec{p} \cdot \vec{E}\, \eta(e)$$

Tada je:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}} = |\vec{p}||\vec{E}|\, \eta(e) \int \frac{d\Omega'}{4\pi}\, w(\theta) \left\{ \cos(\vec{p}', \vec{E}) - \cos(\vec{p}, \vec{E}) \right\}$$

kako je:

$$\cos(\vec{p}', \vec{E}) = \cos(\vec{p}, \vec{E}) \cos(\vec{p}', \vec{p}) + \sin(\vec{p}, \vec{E}) \sin(\vec{p}', \vec{p}) \cos(\phi_p - \phi_{p'})$$

slijedi da je:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{sudari}} = \overbrace{\vec{p} \cdot \vec{E}\, \eta(e)}^{\delta f} \int \frac{d\Omega'}{4\pi}\, w(\theta)\, (\cos\theta - 1) \equiv -\frac{\delta f}{\tau}$$

gdje je uvedena oznaka:

$$\frac{1}{\tau} = \int \frac{d\Omega'}{4\pi}\, w(\theta)\, (1 - \cos\theta) \qquad\qquad (> 0)$$

za relaksacijsko vrijeme. τ je proporcionalno prosječnom vremenu između dva sudara.

Boltzmannova transportna jednadžba:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

zapisana pomoću relaksacijskog vremena.

Pri izvodu su korištene pretpostavke (izotropnosti elastičnost raspršenja) koje nisu uvijek ispunjene. Unatoč tome, dobivena jednadžba je dobra polazna točka za proračun transportnih svojstava materijala.

POVRATAK