6. Stochastische Prozesse und Transporttheorie

6.1. Stochastische Prozesse, Master-Gleichung

Wir betrachten eine stochastische zeitabhängige Variable $X(t)$ mit Werten $\{x\}$ (kontinuierliche Variable) bzw. $\{x_1, x_2, \dots\}$ (diskrete Variable)

- Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(x_1,t_1) \equiv \rho_1(x_1,t_1) = \langle \delta(X(t_1)-x_1)\rangle \qquad \left[\text{bzw. Wahrscheinlichkeit } \langle \delta_{X(t_1),x_1}\rangle\right]$$

- gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho_2(x_1t_1;x_2t_2) = \langle \delta(X(t_1)-x_1)\,\delta(X(t_2)-x_2)\rangle$$

- - - -

$$\rho_n(x_1t_1\dots x_nt_n) = \langle \delta(X(t_1)-x_1)\dots\delta(X(t_n)-x_n)\rangle$$

- bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho_{1|1}(x_1t_1|x_2t_2) = \langle \delta(X(t_2)-x_2)\rangle\Big|_{X(t_1)=x_1} = \frac{\rho_2(x_1t_1;x_2t_2)}{\rho_1(x_1t_1)}$$

- - - -

$$\rho_{k|n}(x_1t_1,\dots x_kt_k|x_{k+1}t_{k+1}\dots x_{k+n}t_{k+n}) =$$

$$= \langle \delta(X(t_{k+1})-x_{k+1})\dots\delta(X(t_{k+n})-x_{k+n})\rangle\Big|_{X(t_1)=x_1\dots X(t_k)=x_k}$$

$$= \frac{\rho_{k+n}(x_1t_1,\dots x_{k+n}t_{k+n})}{\rho_k(x_1t_1\dots x_kt_k)}$$

- analog gilt für mehrere stochastische Variablen $X^{(1)}, X^{(2)}, \dots$

$$\rho_1(x_1^{(1)}, x_1^{(2)}, \dots x_1^{(n)}, t) = \langle \delta(X^{(1)}(t_1)-x_1^{(1)})\cdot\dots\cdot\delta(X^{(n)}(t_1)-x_1^{(n)})\rangle$$

usw.

Eigenschaften:

- Positivität $\rho_n(x_1t_1, \dots x_nt_n) \geq 0$
- Norm $\int dx_1\, \rho_1(x_1t_1) = 1$ usw
- Reduktion $\int dx_n\, \rho_n(x_1t_1 \dots x_nt_n) = \rho_{n-1}(x_1t_1 \dots x_{n-1}t_{n-1})$

$\Rightarrow \quad \int dx_2\, \rho_{1|1}(x_1t_1 | x_2t_2) = 1$

und $\int dx_1\, \rho_1(x_1t_1)\rho_{1|1}(x_1t_1 | x_2t_2) = \rho_1(x_2t_2)$

- bei gleichen Zeiten $\rho_{1|1}(x_1t_1 | x_2t_1) = \delta(x_1 - x_2)$

Zeitabhängige Momente: $\langle X(t_1) \dots X(t_m) \rangle =$
(beschreiben Korrelationen zu verschiedenen Zeiten) $= \int dx_1 \dots dx_n\, x_1 \dots x_n\, \rho_n(x_1t_1 \dots x_nt_n)$

Stationäre Prozesse:

$\rho_n(x_1t_1 \dots x_nt_n) = \rho_n(x_1, t_1+\tau; \dots; x_n, t_n+\tau)$

$\rightarrow \quad \rho_1(x_1t_1) = \rho_1(x_1)$

$\rho_2(x_1t_1; x_2t_2) = \rho_2(x_1, t_1 - t_2; x_2, 0)$

Klassifizierung von Prozessen, $t_1 < t_2 < \dots < t_n$

a) rein zufälliger Prozess (kein Gedächtnis)

$\rho_{n-1|1}(x_1t_1 \dots x_{n-1}t_{n-1} | x_nt_n) = \rho_1(x_nt_n)$
(unabhängig von Werten $x_1 \dots x_{n-1}$ zu früheren Zeiten)

$\Leftrightarrow \quad \rho_n(x_1t_1 \dots x_nt_n) = \rho_1(x_1t_1)\rho_1(x_2t_2) \dots \rho_1(x_nt_n)$

b) Markov-Prozess (kurzes Gedächtnis: nur über die unmittelbare Vergangenheit)

$\rho_{n-1|1}(x_1t_1 \dots x_{n-1}t_{n-1} | x_nt_n) = \rho_{1|1}(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n)$

Diskrete Zeit:  (Markov-Kette)

Gedächtnis: nur ein Schritt lang

$\rho_{1|1}(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n)$ hängt mit der Übergangswahrscheinlichkeit zusammen (siehe unten)

Chapman - Kolmogorov - Gleichung:

$$\rho_3(x_1t_1, x_2t_2, x_3t_3) = \rho_2(x_1t_1, x_2t_2)\,\rho_{2|1}(x_1t_1, x_2t_2 | x_3t_3) =$$

|| (Markov)

$$= \rho_1(x_1t_1)\,\rho_{1|1}(x_1t_1|x_2t_2)\,\rho_{1|1}(x_2t_2|x_3t_3)$$

$$\int dx_2 \ldots \Rightarrow \rho_2(x_1t_1, x_3t_3) = \rho_1(x_1t_1)\int dx_2\, \rho_{1|1}(x_1t_1|x_2t_2)\,\rho_{1|1}(x_2t_2|x_3t_3)$$

Andererseits gilt $\rho_2(x_1t_1, x_3t_3) = \rho_1(x_1t_1)\,\rho_{1|1}(x_1t_1|x_3t_3)$

$$\Rightarrow \boxed{\rho_{1|1}(x_1t_1|x_3t_3) = \int dx_2\, \rho_{1|1}(x_1t_1|x_2t_2)\,\rho_{1|1}(x_2t_2|x_3t_3)}$$

(Wahrscheinlichkeiten $x_1t_1 \to x_2t_2$ und $x_2t_2 \to x_3t_3$ unabhängig) Chapman - Kolmogorov - Gl.

c) allgemeine Prozesse: längeres Gedächtnis – werden hier nicht betrachtet

Master - Gleichung

ist vollständig durch $\rho_1(x,t)$ und $\rho_{1|1}(x,t|x't')$ charakterisiert;

Markov - Prozess kann durch eine Differentialgleichung beschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(x,t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\rho_1(x,t+\Delta t) - \rho_1(x,t)}{\Delta t} =$$

$$= \int dx_1\, \rho_1(x_1,t) \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t}\left[\rho_{1|1}(x_1,t|x,t+\Delta t) - \rho_{1|1}(x_1,t|x,t)\right]$$

Wir entwickeln $\rho_{1|1}(x_1,t|x,t+\Delta t)$ bis zur ersten Ordnung in Δt:

$$\rho_{1|1}(x_1,t|x,t+\Delta t) = \delta(x_1-x)\underbrace{\left[1 - \Delta t\int dx_2\, W_t(x_1,x_2)\right]} + \underbrace{\Delta t\, W_t(x_1,x)}$$

$W_t(x_1,x)$ – Übergangsrate (Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit) $x_1 \to x$

Wahrscheinlichkeit, dass keinen Übergang $x_1 \to \ldots$ passierte im Zeitfenster Δt

Wahrscheinlichkeit, dass Übergang $x_1 \to x$ passierte im Zeitintervall Δt

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} p_1(x,t) = \int dx_1\, p_1(x_1,t) \left[W_t(x_1,x) - \int dx_2\, W_t(x_1,x_2)\, \delta(x_1-x) \right]$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \int dx' \left[p(x',t)\, W_t(x',x) - p(x,t)\, W_t(x,x') \right]}$$

Master-Gleichung

$p(x,t) \equiv p_1(x,t)$

Für diskrete Variablen X mit Werten x_i gilt analog

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} p(x_i,t) = \sum_j \left[p(x_j,t)\, W_t(x_j,x_i) - p(x_i,t)\, W_t(x_i,x_j) \right]}$$

<u>1. Beispiel</u>: <u>Hüpfen auf einem Gitter</u>

Betrachtet wird ein Teilchen, das auf einem 1D Gitter (Gitterplätze $j \in \mathbb{Z}$) mit den Raten Γ_l bzw. Γ_r nach links bzw rechts hüpfen kann, d.h.

$$W_t(j,j') = \Gamma_l\, \delta_{j',j-1} + \Gamma_r\, \delta_{j',j+1}.$$

Anfangs $(t=0)$ sei das Teilchen am Ursprung:

$$p(j,0) = \delta_{j,0}$$

Gesucht ist die Wahrscheinlichkeit $p(j,t)$ für $t>0$ sowie die entsprechenden Momente $\langle j^n(t) \rangle$.

Master-Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(j,t) = \Gamma_r\, p(j-1,t) + \Gamma_l\, p(j+1,t) - (\Gamma_l+\Gamma_r)\, p(j,t)$$

Zur Lösung ist es hilfreich, die <u>charakteristische Funktion</u> einzuführen [Fourier-Transformation $j \rightarrow k$]:

$$\Phi(k,t) = \sum_j p(j,t)\, e^{ikj} \; ; \quad p(j,t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikj}\, \Phi(k,t)$$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} \Phi(k,t) = \left[\Gamma_r (e^{ik}-1) + \Gamma_\ell (e^{-ik}-1) \right] \Phi(k,t)$$

mit der Anfangsbedingung $\Phi(k,0) = 1$

$$\rightarrow \quad \Phi(k,t) = \exp\left\{ \left[\Gamma_r (e^{ik}-1) + \Gamma_\ell (e^{-ik}-1) \right] t \right\}$$

Momente:

$$\langle j^n(t) \rangle = \frac{1}{i^n} \frac{d^n}{dk^n} \Phi(k,t) \Big|_{k=0}$$

$$\rightarrow \quad \langle j(t) \rangle = (\Gamma_r - \Gamma_e) t \; ; \quad \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2 = (\Gamma_r + \Gamma_e) t, \text{ usw}$$

Wahrscheinlichkeitsverteilung:

$$p(j,t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikj} \exp\left\{ \left[\Gamma_r (e^{ik}-1) + \Gamma_e (e^{-ik}-1) \right] t \right\}$$

- Lange Zeiten: $\Gamma_r t, \Gamma_e t \gg 1$

$$\rightarrow \text{Entwicklung: } \{\cdots\} \simeq \left[i(\Gamma_r - \Gamma_e) k - \tfrac{1}{2} (\Gamma_r + \Gamma_e) k^2 \right] t$$

$$\rightarrow \quad p(j,t) \simeq \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikj}\, e^{[\;\cdot\;]t}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Gamma_r + \Gamma_e) t}} \exp\left\{ - \frac{\left[j - (\Gamma_r - \Gamma_e) t \right]^2}{2 (\Gamma_r + \Gamma_e) t} \right\}$$

Gauss-Verteilung

- Kurze Zeiten $\Gamma_e t, \Gamma_r t \ll 1$

$$\rightarrow \quad \Phi(k,t) \simeq 1 + \left[\Gamma_r (e^{ik}-1) + \Gamma_e (e^{-ik}-1) \right] t$$

$$\rightarrow \quad p(j,t) \simeq \left[1 - (\Gamma_r + \Gamma_e) t \right] \delta_{j,0} + \Gamma_r t\, \delta_{j,1} + \Gamma_e t\, \delta_{j,-1}$$

2. Beispiel: Geburt und Tod

Population von n Bakterien

Sterberate (pro Bakterium) μ, Geburtsrate λ

Master-Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(n,t) = \lambda(n-1)\rho(n-1,t) + \mu(n+1)\rho(n+1,t) - (\lambda+\mu)\, n\rho(n,t)$$

Lösung über die charakt. Funktion: Reichl, Kap 6F

$\langle n(t)\rangle = n(t=0)\cdot e^{(\lambda-\mu)t}$ usw

3. Beispiel: Atome im klassischen Strahlungsfeld: S. 124a

Weitere Beispiele: unten, unter "Boltzmann-Gleichung"

6.2. Fokker-Planck-Gleichung, Diffusion

Wir betrachten eine kontinuierliche stochastische Variable X, die sich nur in kleinen Schritten ändert. Dies erlaubt es, eine Entwicklung nach $x'-x$ durchzuführen und damit eine Differentialgleichung in x zu formulieren

$$W_t(x',x) = \tilde{W}_t(x', x-x') = \tilde{W}_t(x',\xi), \quad \xi = x-x'$$

$$\Rightarrow \quad \rho(x',t)\,W_t(x',x) = \rho(x-\xi,t)\,\tilde{W}_t(x-\xi,\xi)$$

Master-Gl.:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = \int d\xi\, \rho(x-\xi,t)\,\tilde{W}_t(x-\xi,\xi) - \int d\xi\, \rho(x,t)\,\tilde{W}_t(x,-\xi)$$

2. Term: ersetzen $\tilde{W}_t(x,-\xi) \to \tilde{W}_t(x,\xi)$ unter dem Integral $\int d\xi$.

Danach: Entwicklung der Differenz nach ξ:

3. Beispiel: Atome im klassischen Strahlungsfeld

Ensemble wechselwirkungsfreier Atome mit Zuständen

$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$

Extern angelegtes klassisches Feld als Störung

$$H = H_0 + H_1 \; ; \quad H_1 = \int d\omega \, V(\omega)\, e^{i\omega t}$$

$$V^*(-\omega) = V(\omega)$$

$H_1 \rightarrow$ Übergänge zwischen Zuständen $|n\rangle$

Fermi Goldene Regel (zeitabhängige Störungstheorie)

$$\rightarrow \quad W_{n\to n'} = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\omega \, |\langle n'|V(\omega)|n\rangle|^2 \, \delta(E_{n'} - E_n - \hbar\omega)$$

$\omega > 0$ – Absorption
$\omega < 0$ – Emission

$\rightarrow$ Mastergleichung für die Wahrscheinlichkeit, ein Atom im Zustand n zu finden

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho(n,t) = \sum_{n'} \left[\rho(n',t)\, W_{n'\to n} - \rho(n,t)\, W_{n\to n'} \right]}$$

(Atome – Strahlungsfeld: der Quantencharakter des Feldes muss berücksichtigt werden!)

Im thermischen Gleichgewicht

$$\rho(n,t) = \rho^{eq}(n) \propto e^{-E(n)/k_B T} \; ; \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho(n,t) = 0$$

Die Gleichung ist erfüllt, wenn $\rho^{eq}(n')\, W_{n'\to n} = W_{n\to n'}\, \rho^{eq}(n)$

$$\rightarrow \quad \frac{W_{n'\to n}}{W_{n\to n'}} = \exp\left[-\frac{E(n) - E(n')}{k_B T} \right]$$

<u>detailliertes Gleichgewicht</u>

(kann unter ganz allgemeinen Bedingungen bewiesen werden)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = -\int d\xi\, \xi \frac{\partial}{\partial x}\left[\rho(x,t)\tilde{W}_t(x,\xi)\right] + \frac{1}{2}\int d\xi\, \xi^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\rho(x,t)\tilde{W}_t(x,\xi)\right] \cancel{+\ldots}$$

Wir definieren Momente der Übergangsrate:

$$\alpha^{(n)}(x,t) = \int d\xi\, \xi^n \tilde{W}_t(x,\xi) = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t}\int d\xi\, \xi^n \rho_{1|1}(x,t\,|\,x+\xi, t+\Delta t)$$

$$= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\left\langle\left[X(t+\Delta t)-X(t)\right]^n\right\rangle\Big|_{X(t)=x}$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\left[\alpha^{(1)}(x,t)\rho(x,t)\right] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\alpha^{(2)}(x,t)\rho(x,t)\right]}$$

<u>Fokker-Planck-Gleichung</u>
(auch: Smoluchowskii-Gl.)

Verallgemeinerung: mehr Variablen (Komponenten) $x_1, x_2, \ldots, x_N$ (z.B. x, y, z, oder Ort x und Geschwindigkeit v, oder...)

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(\{x\},t) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\alpha_i^{(1)}(\{x\},t)\rho(\{x\},t)\right] + \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}\left[\alpha_{ij}^{(2)}(\{x\},t)\rho(\{x\},t)\right]}$$

$$\alpha_i^{(1)}(\{x\},t) = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\left\langle X_i(t+\Delta t)-X_i(t)\right\rangle\Big|_{\{X_k(t)=x_k\}}$$

<u>Driftvektor</u>

$$\frac{1}{2}\alpha_{ij}^{(2)}(\{x\},t) = \frac{1}{2}\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\left\langle\left(X_i(t+\Delta t)-X_i(t)\right)\left(X_j(t+\Delta t)-X_j(t)\right)\right\rangle\Big|_{\{X_k(t)=x_k\}}$$

<u>Diffusionsmatrix</u>

Die Fokker-Planck-Gl hat die Form einer Drift-Diffusionsgleichung im $\underbrace{\text{Raum}}_{\text{(N-dimensionalen)}}$ von Variablen $\{x\}$.

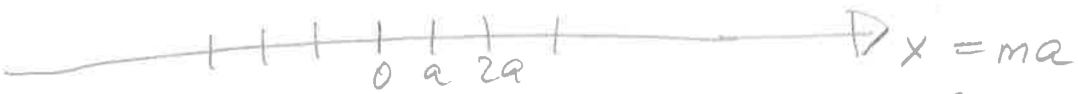
Sie kann als eine Kontinuitätsgleichung dargestellt werden:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} J_i = 0 ,$$

mit der Wahrscheinlichkeitsflussdichte

$$J_i(\{x\},t) = \alpha_i^{(1)}(\{x\},t)\,\rho(\{x\},t) - \frac{1}{2}\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j}\Big[\alpha_{ij}^{(2)}(\{x\},t)\cdot \rho(\{x\},t)\Big]$$

Beispiel: Random Walk in einem externen Feld



Pro Zeiteinheit sei die Wahrscheinlichkeit für einen Schritt nach rechts q, nach links $1-q$

$$\rightarrow \quad \alpha^{(1)} = \frac{1}{\Delta t}\big\langle X(t+\Delta t) - X(t)\big\rangle\Big|_{X(t)=x} =$$

$$= \frac{a}{\Delta t}\big[q\cdot 1 + (1-q)\cdot(-1)\big] = \frac{a}{\Delta t}(2q-1) \equiv \bar{v}$$

Drift-geschwindigkeit

$$\frac{1}{2}\alpha^{(2)} = \frac{1}{2\Delta t}\big\langle \big(X(t+\Delta t) - X(t)\big)^2\big\rangle\Big|_{X(t)=x} =$$

$$= \frac{a^2}{2\Delta t}\big[q\cdot 1 + (1-q)\cdot 1\big] = \frac{a^2}{2\Delta t} \equiv D$$

Diffusions-konstante

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = -\bar{v}\frac{\partial}{\partial x}\rho(x,t) + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,t)$$

Lösung: Fourier-Transformation $\rho(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi}\,\rho(k,t)\,e^{ikx}$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(k,t) = -(ik\bar{v} + Dk^2)\rho(k,t)$$

$$\Rightarrow \rho(k,t) = \rho(k,0)\exp[-(ik\bar{v}+Dk^2)t]$$

Anfangsbedingung $x(0) = 0 \Rightarrow \rho(x,0) = \delta(x)$

$\Rightarrow \rho(k,0) = 1$

$$\boxed{\rho(k,t) = \exp[-(ik\bar{v}+Dk^2)t]}$$

Fourier $\rightarrow$ $\boxed{\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{(x-\bar{v}t)^2}{4Dt}\right]}$

6.3. Langevin-Gleichung, Brown'sche Bewegung

Brown'sche Bewegung: ein Teilchen, das sich in der Umgebung vieler kleiner Teilchen bewegt, die verantwortlich sind für

i) Dämpfung mit Konstante γ
und ii) Rauschen $\Big\} \Rightarrow$

Langevin-Gleichung für die Geschwindigkeit $v = \dot{x}$:

$$\boxed{m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = \xi(t)}$$

$\xi(t)$ – stochastische Kraft ("Rauschen"):

$$\boxed{\langle \xi(t)\rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t')\rangle = q\,\delta(t-t')}$$

Spektraldichte $S(\omega) = 2\int_{-\infty}^{\infty} d(t-t')\, e^{i\omega(t-t')}\langle \xi(t)\xi(t')\rangle$

$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = q\,\delta(t-t') \Leftrightarrow S(\omega) = 2q$ "weißes Rauschen"

Weitere übliche Annahme: Gauß'sche Verteilung von $\xi(t)$:

$$\rho(\{\xi(t)\}) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2q}\int dt\, \xi^2(t)\right\}$$

Lösung der Langevin-Gl.:

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + \frac{1}{m}\int_0^t dt' e^{-\gamma(t-t')}\xi(t')$$

$[v_0 = v(0)]$

$$\Rightarrow \langle v(t_1)v(t_2)\rangle = v_0^2 e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \frac{1}{m^2}\int_0^{t_1}dt_1'\int_0^{t_2}dt_2'\, e^{-\gamma(t_1+t_2-t_1'-t_2')} \cdot q\,\delta(t_1'-t_2') =$$

$$= v_0^2 e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \frac{q}{2\gamma m^2}\left(e^{-\gamma|t_1-t_2|} - e^{-\gamma(t_1+t_2)}\right)$$

Für lange Zeiten $t_1, t_2 \gg \gamma^{-1}$ hängt die Korrelationsfunktion nicht von den Anfangsbedingungen ab:

$$\langle v(t_1)v(t_2)\rangle = \frac{q}{2\gamma m^2} e^{-\gamma|t_1-t_2|}$$

$$\langle v^2(t)\rangle = \frac{q}{2\gamma m^2}$$

Im thermischen Gleichgewicht soll gelten:

$$\langle E_{kin}\rangle = \frac{m}{2}\langle v^2(t)\rangle = \frac{1}{2}k_B T \qquad \text{(Gleichverteilungssatz)}$$

$$\Rightarrow \boxed{q = 2m\gamma k_B T}$$

Fluktuations-Dissipations-Theorem (klassische Version)

Fluktuationen Dissipation

$$x(t) = x_0 + \int_0^t dt'\, v(t')$$

$$\Rightarrow \langle [x(t)-x_0]^2\rangle = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle v(t')v(t'')\rangle$$

$$= \left(v_0^2 - \frac{q}{2\gamma m^2}\right)\frac{(1-e^{-\gamma t})^2}{\gamma^2} + \frac{q}{\gamma^2 m^2}t - \frac{q}{\gamma^3 m^2}\left(1-e^{-\gamma t}\right)$$

$t\to\infty$

$$\left[\xrightarrow{t\to\infty} t \int_{-\infty}^{\infty} d(t'-t'') \underbrace{\langle v(t') v(t'') \rangle}_{\frac{q}{2\gamma m^2} e^{-\gamma|t'-t''|}} = \right]$$

$$= \frac{q}{\gamma^2 m^2} t$$

Vergleichen mit dem Diffusionsproblem:

$\langle [x(t)-x_0]^2 \rangle = 2Dt$, D – Diffusionskonstante

$$\rightarrow \boxed{D = \frac{q}{2\gamma^2 m^2} = \frac{k_B T}{m\gamma}}$$ Einstein-Relation

$\frac{1}{m\gamma} = \mu$ – Beweglichkeit des Brown'schen Teilchens:

$\langle v \rangle \equiv \langle \dot{x} \rangle = \mu F$ ← $m \cancel{\langle \ddot{x} \rangle} + m\gamma \langle \dot{x} \rangle = F + \cancel{\langle \xi(t) \rangle}$

äußere Kraft

Von der Langevin-Gl. zur Fokker-Planck-Gl.

$$\alpha^{(1)} = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{\langle v(t+\Delta t) - v(t) \rangle}{\Delta t}\Big|_{v(t)=v} = -\gamma v$$

Aus der Langevin-Gl.: $v(t+\Delta t) - v(t) \simeq -\gamma v(t)\,\Delta t + \frac{1}{m}\int_t^{t+\Delta t} \xi(t')dt'$

$$\frac{1}{2}\alpha^{(2)} = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{2\Delta t} \langle [v(t+\Delta t) - v(t)]^2 \rangle \Big|_{v(t)=v}$$

$$= \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{2\Delta t} \left\langle \left[-\gamma v \Delta t + \frac{1}{m}\int_t^{t+\Delta t} dt' \xi(t') \right]^2 \right\rangle$$

$$= \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{2\Delta t} \left[\frac{1}{m^2} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \langle \xi(t')\xi(t'') \rangle + \cancel{O((\Delta t)^2)} \right]$$

$$= \frac{q}{2m^2} = D\gamma^2 = \frac{\gamma}{m} k_B T$$

→ Fokker-Planck-Gl.

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(v,t) = \gamma\frac{\partial}{\partial v}\left[v\rho(v,t)\right] + \frac{\gamma}{m}k_B T\frac{\partial^2}{\partial v^2}\rho(v,t)}$$

Stationäre Lösung:

$$\rho^{eq}(v) \propto \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right)$$

(Maxwell-Boltzmann Verteilung)

~~9. Elektronischer Transport in Festkörpern~~

6.4. ~~9.1.~~ Boltzmann-Gleichung

Hinreichend langsam variiernde äußere Felder

$\rightarrow$ quasiklassische Beschreibung. $\boxed{\vec{p} = \hbar \vec{k}}$

Verteilungsfunktion: $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ – mittlere Zahl von Elektronen im Zustand $\vec{k}$ am Punkt $\vec{r}$ zur Zeit t.

Äquivalent: $\frac{2}{(2\pi)^3} f(\vec{k}, \vec{r}, t)\, \Delta^3 k\, \Delta^3 r$ – Anzahl von Elektronen im Phasenraumvolumen $\Delta^3 k \cdot \Delta^3 r$

Spin

(Reduzierte Beschreibung: 1-Teilchen-Verteilungsfunktion!)

Die Beschreibung gilt sowohl für freie Elektronen, als auch für Elektr. in einem period. Potential, d. h. mit beliebigem Spektrum $\epsilon_j(\vec{k})$. Dann hat die Verteilungsf. noch den Bandindex: $f_j(\vec{k}, \vec{r}, t)$. Wir werden annehmen, dass nur ein Band relevant (teilweise gefüllt) ist, und den Index nicht schreiben.

Elektronendichte $\quad n(\vec{r}, t) = 2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f(\vec{k}, \vec{r}, t)$;

– – – stromdichte $\quad \vec{j}(\vec{r}, t) = -2e \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} v(\vec{k})\, f(\vec{k}, \vec{r}, t)$;

$v(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$ – Geschwindigkeit

freie Elektronen:
$\epsilon = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m$
$v = \vec{p}/m = \hbar \vec{k}/m$

Bewegungsgleichungen:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = v(\vec{k}) \; ; \qquad \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{E} - \frac{e}{c} \vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}$$

El.-Ladung: $-e$

Falls Elektronen laut dieser Gleichungen sich bewegen würden, hätten wir

$$f(\vec{k}(t), \vec{r}(t), t) = f(\vec{k}(0), \vec{r}(0), 0),$$

oder, äquivalent, $\quad \frac{df}{dt} = 0 \qquad$ (Liouvillscher Satz)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\vec r}\,\frac{\partial f}{\partial \vec r} + \dot{\vec k}\,\frac{\partial f}{\partial \vec k} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec v(\vec k)\frac{\partial f}{\partial \vec r} - \frac{e}{\hbar}\left[\vec E + \frac{1}{c}\vec v(\vec k)\times\vec B\right]\frac{\partial f}{\partial \vec k} = 0$$

Es gibt aber noch quantenmechanische Stoßprozesse (Störstellenstreuung, E-Phonon-Streuung, E-E-Streuung)

→ Stoßterm (Stoßintegral) $\frac{df}{dt} = \left(\frac{df}{dt}\right)_{coll} \equiv I[f]$

→ $$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \vec v(\vec k)\frac{\partial f}{\partial \vec r} - \frac{e}{\hbar}\left[\vec E + \frac{1}{c}\vec v(\vec k)\times\vec B\right]\frac{\partial f}{\partial \vec k} = I[f]}$$

Boltzmann-Gleichung

<u>Stoßintegral für (elastische) Streuung an Störstellen</u>

$W_{\vec k,\vec k'}$ – Wahrscheinlichkeit der Elektronenstreuung $\vec k \to \vec k'$ pro Zeiteinheit

Für schwache Störstellen: die Goldene Regel gibt

$$W_{\vec k,\vec k'} = \frac{2\pi}{\hbar}\, n_i\, \delta(\varepsilon(\vec k)-\varepsilon(\vec k'))\,|\langle \vec k|U|\vec k'\rangle|^2 =$$

n_i: Störstellendichte

U: Potential einer Störstelle

[Im Allgemeinen $|\langle \vec k|U|\vec k'\rangle|^2 \to$ exakte Streumatrix an der Störstelle]

$$= \delta(\epsilon(\vec k)-\epsilon(\vec k'))\, w_{\vec k\vec k'}$$

$\epsilon(k) = \epsilon(k')$

$$I[f](k) = -\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\left\{\underbrace{W_{kk'}\, f(k)[1-f(k')]}_{I_{out}} - \underbrace{W_{k'k}\, f(k')[1-f(k)]}_{I_{in}}\right\}$$

$W_{kk'} = W_{k'k}$ "detailed balance" (detailliertes Gleichgewicht)

$$\rightarrow I[f](k) = -\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{kk'} \left(f(k) - f(k')\right)$$

Leitfähigkeit

zunächst Magnetfeld $\vec{B} = 0$, el. Feld homogen, schwach (→ lineare Antwort)

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_\omega e^{-i\omega t}$$

B.-Gl.:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \cancel{\vec{v}\frac{\partial f}{\partial \vec{r}}} - e\vec{E}(t)\frac{1}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = -\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{kk'}\left(f(k) - f(k')\right)$$

$\vec{E} = 0 \longrightarrow f = f_0(\epsilon_k)$ Fermi-Dirac $\quad \epsilon(k) \equiv \epsilon_k$

$\vec{E} \neq 0 \longrightarrow f = f_0 + \delta f$ linear in E (lineare Antwort)

$$\delta f(\vec{k}, t) = \delta f_\omega(\vec{k})\, e^{-i\omega t}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial \delta f}{\partial t} = (-i\omega)\, \delta f_\omega\, e^{-i\omega t}$$

$$\frac{1}{\hbar}\vec{E}\frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \simeq \frac{1}{\hbar}\vec{E}\frac{\partial f_0}{\partial \vec{k}} = \vec{E}\vec{v}_k \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}$$

$$I[f](k) = -\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{kk'}\left(f(k) - f(k')\right) = I[\delta f](k)$$

$$\simeq -\frac{1}{\tau_k}\,\delta f(\vec{k})$$

Relaxationszeitnäherung (Berechnung von $1/\tau$ – siehe unten)

$$\rightarrow -i\omega\, \delta f_\omega(\vec{k}) - e\vec{E}_\omega \vec{v}_k \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} = -\frac{1}{\tau_{\vec{k}}}\,\delta f_\omega(\vec{k})$$

$$\rightarrow \delta f_\omega(\vec{k}) = \frac{\tau_{\vec{k}}}{1 - i\omega\tau_{\vec{k}}} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \cdot e\,\vec{v}_k \cdot \vec{E}_\omega$$

Elektrische Stromdichte:

$$\vec{j}_\omega = -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_{\vec{k}} \, f(\vec{k}) = 2e^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\tau_{\vec{k}}}{1-i\omega\tau_{\vec{k}}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}\right) \cdot (\vec{v}_k \cdot \vec{E}_\omega) \, \vec{v}_{\vec{k}}$$

Leitfähigkeitstensor:

$$\vec{j}_{\omega,\alpha} = \sigma^{(\omega)}_{\alpha\beta} \vec{E}_\omega$$

$$\rightarrow \sigma_{\alpha\beta} = 2e^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_{\vec{k},\alpha} v_{\vec{k},\beta} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}\right) \frac{\tau_{\vec{k}}}{1-i\omega\tau_{\vec{k}}}$$

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \simeq \delta(\epsilon-\mu) \underbrace{- \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \delta''(\epsilon-\mu) + \ldots}_{\text{vernachlässigen } (k_B T \ll \mu)}$$

Sommerfeld-Entwicklung

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}\right) \ldots \longrightarrow \text{Integral über die Fermi-Fläche} \quad \nu(\mu) \int d\Omega \ldots$$

Zur Vereinfachung: Annahme isotropischer Dispersion $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon(|\vec{k}|)$

$$\rightarrow \sigma_{\alpha\beta} = \frac{2e^2 \nu \tau}{1-i\omega\tau} \int \frac{d\Omega}{4\pi} v_\alpha v_\beta = \boxed{\frac{2e^2\nu\tau}{1-i\omega\tau} \frac{v_F^2}{3} \delta_{\alpha\beta}}$$

Drude-Formel

$$\nu \equiv \nu(\mu) \; ; \quad \tau \equiv \tau_{k_F}$$

Berechnung der Relaxationszeit

(isotropische Dispersion)

$$\delta f_\omega(\vec{k}) = -\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}\right) \frac{\tau}{1-i\omega\tau} e \vec{v}_k \cdot \vec{E}_\omega = -\vec{n}_{\vec{k}} \cdot \vec{g}(\epsilon_k)$$

$\approx \delta(\epsilon_k - \mu) \Rightarrow |\vec{k}| = k_F$

$\vec{k}/|\vec{k}|$

$$I[\delta f](k) = -\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{\vec{k}\vec{k}'} (f(\vec{k}) - f(\vec{k}'))$$

$$= + \vec{g}(\epsilon_k) \, \nu \int d\Omega_{k'} \, w_{\vec{k}\vec{k}'} (\vec{n}_{\vec{k}} - \vec{n}_{k'})$$

$\nu \equiv \nu(\mu)$
$w(\theta) \equiv w_{k_F}(\theta)$

$$w_{\vec{k}\vec{k}'} = w(\theta)$$

Winkel ; $\cos\theta = \vec{n}_{\vec{k}} \cdot \vec{n}_{\vec{k}'}$

$$\underbrace{\int d\Omega_{k'}\, w_{\vec{k}\vec{k}'} (\vec{n}_{\vec{k}} - \vec{n}_{\vec{k}'})} \propto \vec{n}_{\vec{k}} \quad \text{aus Symmetriegründen}$$

$$\Rightarrow \quad \hookrightarrow = \vec{n}_{\vec{k}} \int d\Omega_{k'}\, w_{\vec{k}\vec{k}'} (1 - \vec{n}_{\vec{k}} \cdot \vec{n}_{\vec{k}'})$$

$$= \vec{n}_{\vec{k}} \int d\Omega\, w(\theta)\, (1-\cos\theta)$$

$$= \vec{n}_{\vec{k}} \cdot \frac{1}{2} \int_0^{\pi} d\theta\, \sin\theta\, w(\theta)\, (1-\cos\theta)$$

$$\Rightarrow \quad I[\delta f](k) = \vec{g}(\epsilon_k) \cdot \vec{n}_k \cdot \nu \int d\Omega\, w(\theta)\,(1-\cos\theta)$$

$$= -\frac{1}{\tau}\, \delta f(k)$$

mit $$\boxed{\frac{1}{\tau} = \nu \int d\Omega\, w(\theta)\, (1-\cos\theta)}$$

$$w(\theta) = \frac{2\pi}{\hbar} n_i\, |U(\theta)|^2 \; ; \qquad U(\theta) = \langle \vec{k} | U | \vec{k}' \rangle ; \quad \theta = \widehat{\vec{k}, \vec{k}'}$$

Die oben berechnete τ ist Transportrelaxationszeit, oft τ_{tr} bezeichnet.

Im Allgemeinen unterscheidet sich von "Quantumrelaxationszeit" τ_q:
$$1/\tau_q = \nu \int d\Omega\, w(\theta)$$
("Lebensdauer" des Zustands mit gegebenem $\vec{k}$)

Grenzfälle:

* isotrope Streuung: $w(\theta) = \text{const} \Rightarrow \frac{1}{\tau_{tr}} = \frac{1}{\tau_q}$
* Kleinwinkelstreuung: typische $\theta \ll 1$
$$\Rightarrow \frac{1}{\tau_{tr}} \ll \frac{1}{\tau_q}$$

[redacted] Thermoelektrische Transporteigenschaften

Wir möchten auch $\vec{\nabla}\mu$ und $\vec{\nabla}T$ anlegen.
Dafür betrachten wir eine Verteilungsfunktion mit $T(\vec{r})$ und $\mu(\vec{r})$:

$$f_0^l(\vec{k}) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\epsilon_k - \mu(\vec{r})}{k_B T(\vec{r})}\right] + 1}$$ „lokales Gleichgewicht"

$$I[f_0^l] = 0$$ (wie für globales Gleichgewicht)

$$f = f_0^l + \delta f \longrightarrow$$ in Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} - \frac{e\vec{E}}{\hbar}\vec{\nabla}_k (f_0 + \delta f) + \vec{v}_k \vec{\nabla}_r (f_0 + \delta f) = I[\delta f]$$

Benutzen $\vec{\nabla}_r f_0 = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}\right)\left(\vec{\nabla}_r \mu + \frac{\epsilon_k - \mu}{T}\vec{\nabla}_r T\right)$

$$\rightarrow \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}\right)\vec{v}_k\left[\left(\vec{\nabla}_r \mu + e\vec{E}\right) + \frac{\epsilon_k - \mu}{T}\vec{\nabla}_r T\right] =$$

$$= \underset{\uparrow \, -\frac{\delta f}{\tau}}{I[\delta f]} - \frac{\partial \delta f}{\partial t} + \underbrace{\frac{e\vec{E}}{\hbar}\vec{\nabla}_k \delta f - \vec{v}_k \vec{\nabla}_r \delta f}_{\text{vernachlässigen}}$$

$\boxed{\tau \equiv \tau_{tr}}$

vernachlässigen [tragen nicht in linearer Ordnung bei: $\vec{E}$, δf, $\vec{\nabla}_r$ – klein]

$$\Rightarrow \boxed{\delta f(k) = \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}\vec{v}_k \frac{\tau_{tr}}{1 - i\omega\tau_{tr}}\left[\left(\vec{\nabla}_r \mu + e\vec{E}\right) + \frac{\epsilon_k - \mu}{T}\vec{\nabla}_r T\right]}$$

„elektrochemisches Feld" $e\vec{E}_{el.ch}$

$\vec{E}_{el.ch} = -\nabla \varphi_{el.ch}$;

$\varphi_{el.ch} = \varphi_{el} - \frac{1}{e}\mu$ – elektrochemisches Potential

Elektrische Stromdichte $\vec{j}_i(\vec{r}, t) = -2e\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\vec{v}_k \delta f(\vec{k}, \vec{r}, t)$

Wärmestromdichte $\vec{j}_Q(\vec{r}, t) = 2\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}(\epsilon_k - \mu)\vec{v}_k \delta f(\vec{k}, \vec{r}, t)$

(folgt aus $dQ = dU - \mu dN$)

$$\begin{pmatrix} \vec{j} \\ \vec{j}_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E}_{el.ch} \\ -\frac{\vec{\nabla} T}{T} \end{pmatrix}$$

$$\vec{j} = -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{v}_k \, \delta f(\vec{k}) = -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tau \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \left[\vec{v}_k \cdot \left(e\vec{E}_{el.ch} + \frac{\epsilon_k - \mu}{T} \vec{\nabla} T \right) \right] \vec{v}_k$$

wir setzen $\omega = 0$;
sonst $\tau \to \frac{\tau}{1 - i\omega\tau}$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} K_{11,\alpha\beta} &= 2e^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \right) v_{k,\alpha} v_{k,\beta} \tau \\ K_{12,\alpha\beta} &= -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \right) (\epsilon_k - \mu) v_{k,\alpha} v_{k,\beta} \tau \end{aligned}}$$

Analog für $\vec{j}_Q$ $\quad (-e \to (\epsilon_k - \mu))$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} K_{21,\alpha\beta} &= -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \right) (\epsilon_k - \mu) v_{k,\alpha} v_{k,\beta} \tau \\ K_{22,\alpha\beta} &= 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \right) (\epsilon_k - \mu)^2 v_{k,\alpha} v_{k,\beta} \tau \end{aligned}}$$

[redacted]

K_{11} - elektrische Leitfähigkeit, siehe oben

K_{22}: benutzen $\quad -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \simeq \delta(\epsilon - \mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \delta''(\epsilon - \mu)$

$$\to K_{22,\alpha\beta} \simeq 2\nu \frac{v_F^2}{3} \delta_{\alpha\beta} \tau \underbrace{\int d\epsilon \, \underbrace{\left[\delta(\epsilon - \mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \delta''(\epsilon - \mu) \right]}_{\approx -\partial f_0 / \partial \epsilon} (\epsilon - \mu)^2}_{\to \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2}$$

$$= \frac{2\pi^2}{9} (k_B T)^2 \nu v_F^2 \tau \, \delta_{\alpha\beta}$$

Man definiert <u>termische Leitfähigkeit</u>:

$$\vec{j}_Q = -\varkappa \vec{\nabla} T \qquad \text{bei } \vec{j} = 0$$

$$\Rightarrow \varkappa = \frac{1}{T} \left(K_{22} - \frac{K_{12} K_{21}}{K_{11}^2} \right) \simeq \frac{K_{22}}{T}$$

↳ Korrektur $\sim \frac{k_B T}{\mu}$

$$\Rightarrow \boxed{\varkappa = \frac{2\pi^2}{9} k_B^2 T \nu v_F^2 \tau}$$

Vergleichen mit $\sigma = \frac{2}{3} e^2 \nu v_F^2 \tau$

$\Rightarrow$ $\boxed{\frac{\varkappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3}\frac{k_B^2}{e^2} T}$ Wiedemann–Franz–Gesetz

(nicht allgemein gültig! Es ist wichtig, dass die Streuung elastisch ist!)

$K_{12} = K_{21}$ – Onsager-Symmetrie

$K_{12} \rightarrow$ Thermokraft: Temperaturgradient induziert elektrisches Feld im offenen Stromkreis ($\vec{j} = 0$)

9.4. Magnetotransporteigenschaften

$\vec{B} \parallel z$, parabolische Dispersion $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (Fall offener Bahnen wird später diskutiert)

B-Gl.: $f = f_0 + \delta f$, Linearisierung, $\omega = 0$:

$$\underbrace{-\frac{e}{\hbar c}(\vec{v}_k \times \vec{B})\vec{\nabla}_k \delta f_k}_{} - e\vec{E}\cdot\vec{v}_k \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} = -\frac{1}{\tau}\delta f$$

hier f_0 trägt nicht bei, weil $\frac{1}{\hbar}(\vec{v}_k \times \vec{B})\cdot\nabla_k f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}(\vec{v}_k \times \vec{B})\cdot\vec{v}_k = 0$

Wir suchen $\delta f_{\vec{k}} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}\right)(-e)\tau\vec{v}_k\cdot\vec{X}$

$\Rightarrow$ Gleichung für $\vec{X}$:

$$-\omega_c\tau(\vec{v}_k \times \cancel{\vec{B}}\,\vec{b})\cdot\vec{X} + \vec{v}_k\cdot\vec{X} = \vec{v}_k\cdot\vec{E}$$

$\boxed{\omega_c = \frac{eB}{mc}}$

$\boxed{\vec{b} = \vec{B}/B}$

Wir suchen $\vec{X} = |\vec{E}|\,(\alpha\hat{e} + \beta\hat{b} + \gamma\hat{e}\times\hat{b})$

$\hat{e} = \vec{E}/|\vec{E}|$ $\qquad$ $\hat{b} = \vec{B}/|\vec{B}|$

Substitution $\rightarrow$ Gleichungen für Koeffizienten vor $\vec{v}_k\cdot\vec{e}$, $\vec{v}_k\cdot\vec{b}$, $\vec{v}_k\cdot(\vec{e}\times\vec{b})$ $\longrightarrow$

$$\alpha = \frac{1}{1+\omega_c^2\tau^2}, \quad \beta = \frac{\omega_c^2\tau^2}{1+\omega_c^2\tau^2}(\vec{e}\cdot\vec{b}); \quad \gamma = \frac{-\omega_c\tau}{1+\omega_c^2\tau^2}$$

$$\vec{X} = \frac{1}{1+\omega_c^2\tau^2}\left(\vec{E} - \omega_c\tau\, \vec{E}\times\vec{b} + \omega_c^2\tau^2 (\vec{E}\cdot\vec{b})\,\vec{b}\right)$$

Stromdichte $\vec{j} = \sigma_0 \vec{X}$; $\quad \sigma_0 = \frac{2}{3} e^2 \nu v_F^2 \tau = \frac{ne^2\tau}{m}$

$\vec{j} = -2e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{v}_k \, \delta f_k$

$$\rightarrow \quad \sigma = \frac{\sigma_0}{1+\omega_c^2\tau^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+\omega_c^2\tau^2 \end{pmatrix}$$

$\vec{B} \parallel z$
$(\Leftrightarrow \vec{b} = \hat{z})$

Invertieren $\rightarrow$ Widerstandstensor

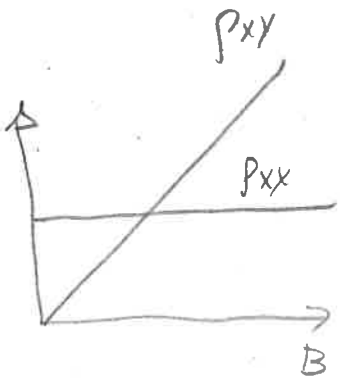
$$\rho = \sigma^{-1} = \rho_0 \begin{pmatrix} 1 & \omega_c\tau & 0 \\ -\omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \rho_0 = 1/\sigma_0$$

* $\sigma_{zz} = \sigma_0$, $\rho_{zz} = \rho_0$ wie bei $\vec{B} = 0$, weil die Bewegung in z-Richtung durch $\vec{B}$ nicht beeinflusst ist.

* Hall-Koeffizient:

$$R = \frac{\rho_{yx}}{B} = -\rho_0 \frac{\omega_c\tau}{B} = -\frac{m}{ne^2\tau}\,\frac{eB\tau}{mcB} = \frac{-1}{nec}$$

$$\mathrm{sign}(R) = \mathrm{sign}\left(\text{Ladung von Ladungsträger}\right) \quad !$$



* Magnetowiderstand:
$\rho_{xx} = \rho_{yy} = \rho_0$ — B-unabhängig

Das Verhalten für den Fall offener Bahnen unterscheidet sich aber qualitativ im Limes von hohen Magnetfeldern

Elektron - Elektron - Stöße

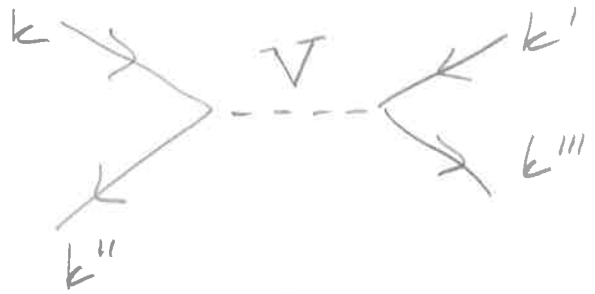
$$I_{ee}[f](k) = -\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \frac{d^3k'''}{(2\pi)^3} \cdot$$

$$\cdot \Big[W_{kk' \to k''k'''} f_k f_{k'} (1-f_{k''})(1-f_{k'''}) - W_{k''k''' \to kk'} f_{k''} f_{k'''} (1-f_k)(1-f_{k'}) \Big]$$

$f_k = f(\vec{k})$

alle r - Argumente identisch

$$W_{kk' \to k''k'''} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k'', k''' | V | k, k' \rangle|^2 \, \delta(\epsilon_k + \epsilon_{k'} - \epsilon_{k''} - \epsilon_{k'''})$$



$V(q)$ - Potential der E-E-Wechselwirkung

$$W_{kk' \to k''k'''} = W_{k''k''' \to kk'}$$

$$I_{ee}[f](k) = -\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \frac{d^3k'''}{(2\pi)^3} W_{kk' \to k''k'''} \Big[f_k f_{k'} (1-f_{k''})(1-f_{k'''}) - f_{k''} f_{k'''} (1-f_k)(1-f_{k'}) \Big]$$

$I_{ee}[f_0] = 0$ für die Fermi-Funktion!

H-Theorem

Entropie

$$S(t) = -k_B \int \frac{d^3k \, d^3r}{(2\pi)^3} \Big[f(\vec{k},\vec{r},t) \ln f(\vec{k},\vec{r},t) + \{1 - f(\vec{k},\vec{r},t)\} \ln [1 - f(\vec{k},\vec{r},t)] \Big]$$

Boltzmann - Gl. $\to$ $dS/dt \geq 0$ [ohne Stoßintegral: $dS/dt = 0$]

$\to$ Relaxation zum Gleichgewicht ($f = f_0$), in dem $I[f_0] = 0$ und $dS/dt = 0$