

Wstęp do kwantowej teorii transportu elektronowego

Sylwia Gołąb, Paweł Rzońca

28 października 2015

Spis treści

1	Początki teorii elektronowej (subiektywnie)	2
2	Teoria elektronowa Lorenza	3
3	Makroskopowa elektrodynamika ośrodków materialnych	4
3.1	Wyprowadzenie makroskopowych praw Maxwella z mikroskopowych odpowiedników . . .	4
3.2	Podsumowanie	5
3.3	Zasada zachowania ładunku	6
3.3.1	Ogólne wyprowadzenie	6
3.3.2	Wyprowadzenie praw zachowania ładunku z praw Maxwella	6
3.3.3	Równania materiałowe	7
3.3.4	Równania Maxwella a prąd stały	7
4	Metody opisu klasycznej dynamiki cząstek	8
4.1	Mechanika Newtonowska	8
4.2	Mechanika Hamiltonowska	8

1 Początki teorii elektronowej (subiektywnie)

Elektrodynamika		Teoria kinetyczna		Teoria kwantowa
1822 r. H. Davy:	$\sigma \sim S/L$	1803 r. J. Dalton:	atomy	
1826 r. G. Ohm:	$I \sim V$	1827 r. R. Brown:	ruchy	
1845 r. G. Kirchhoff:	$j \sim E_f$	1860 r. J. Maxwell:	rozkład v	
1861 r. J. Maxwell:	równania	1865 r. J. Loschmidt:	rozmiar at.	
		1867 r. J. Maxwell:	równanie	
			ciągłości o strukturze r. kinet.	
		1872 r. L. Boltzmann:	równanie	
1881 r. Helmholtz:	elektron	1900 r. D. Hilbert		1900 r. M. Planck
Johnstone Stoney:		1905 r. Einstein i	teoria r.	
1897 r. J. J. Thompson		Smoluchowski:	Browna	
1908 r. R. Millikan:	wart. e			
1910 r. E. Rutherford:	budowa at.	1913 r. Bohr:	model at.	
1916 r. Tolman-Steward:	bezwł. el.			
				1924 r. L. de Broglie
				1926 r. E. Schrödinger
				1927 r. Fermi i Dirac: stat. kw.

Elektronowa teoria materii

1845 r. G. Fechner - Model prądu elektronowego

1846 r. W. Weber - Elektrodynamika cząstek

$$F = \frac{q_1 q_2}{r^2} \left\{ 1 + \frac{r}{c^2} \ddot{r}(t) - \frac{1}{2c^2} [\dot{r}(t)]^2 \right\}$$

1881 r. Helmholtz

1897 r. H. A. Lorentz - teoria elektronowa

1898 r. E. Riecke -

1900 r. Drude - model przewodnictwa

1927 r. Sommerfeld A. - statystyki kwantowe do opisu elektronów

1928 r. Block

Teorie na przestrzeni czasu:

1900 ÷ 1927 Klasyczna teoria transportu elektronowego

1927 ÷ 1928 Półklasyczna teoria transportu elektronowego

1928 ÷ 1933 Współczesna teoria transportu elektronowego

2 Teoria elektronowa Lorentza

Założenia:

1. Ośrodki materiału mają strukturę dyskretną, tzn. zbudowane są z cząstek naładowanych, które w sumie dają układ neutralny.
2. Wszystkie zjawiska w ośrodku materialnym są spowodowane ruchem cząstek naładowanych pod wpływem pól zewnętrznych, przy czym:
 - (a) w dielektrykach cząstki naładowane są związane i mogą wykonywać drgania wokół położenia równowagi lub ulegać nieznacznym wychyleniom pod wpływem przyłożonego \vec{E} ,
 - (b) w przewodnikach prócz cząstek związanych występują także cząstki naładowane swobodne, których ruch powoduje powstanie prądu elektrycznego,
 - (c) w ośrodkach magnetycznych istnieją cząstki naładowane posiadające wewnętrzny moment magnetyczny lub niezerowy moment pędu.
3. Mikroskopowe pola elektromagnetyczne wytwarzane przez cząstki naładowane tworzące rozpatrywany ośrodek są rozwiązaniami równań Maxwella w próżni:

$$\begin{cases} \nabla \circ \vec{e}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \\ \nabla \times \vec{b}(\vec{r}, t) - \partial_t \vec{e}(\vec{r}, t) = \vec{j}(\vec{r}, t) \\ \nabla \times \vec{e}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{b}(\vec{r}, t) = \vec{0} \\ \nabla \circ \vec{b}(\vec{r}, t) = 0. \end{cases} \quad (1)$$

$\vec{e}(\vec{r}, t)$, $\vec{b}(\vec{r}, t)$ - mikroskopowe pola elektryczne i magnetyczne

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_i q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_i \vec{v}_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$$

4. Gęstość siły działająca na $\vec{\rho}(\vec{r}, t)$ ma postać

$$\vec{f}(\vec{r}, t) = \vec{\rho}(\vec{r}, t) [\vec{e}(\vec{r}, t) + \vec{v}(t) \times \vec{b}(\vec{r}, t)]$$

$$\vec{F}(t) = \int d^3r' f(\vec{r}', t) =$$

przy założeniu jednorodności \vec{b} i \vec{e}

$$= \int d^3r' \{ \rho(\vec{r}, t) [\vec{e} + \vec{v}(t) \times \vec{b}] \} = \int d^3r' \{ q \delta(\vec{r} - \vec{r}') [\vec{e} + \vec{v}(t) \times \vec{b}] \} = q [\vec{e} + \vec{v}(t) \times \vec{b}] \int d^3r' \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

Ostatecznie

$$\vec{F} = q(\vec{e} + \vec{v} \times \vec{b}) \quad (2)$$

$$m\ddot{\vec{r}}(t) = q[\vec{e} + \vec{v}(t) \times \vec{b}]. \quad (3)$$

Zmiany przestrzenne $\vec{e}(\vec{r}, t)$ i $\vec{b}(\vec{r}, t)$ są znaczące na odcinkach rzędu $10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$.

Zmiany czasowe są rzędu $10^{-13} \div 10^{-17} \text{ s}$.

Klasyczny promień elektronu $r_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mc^2} \approx 2,82 \cdot 10^{-6} \text{ nm}$, rozmiar protonu $r_p \approx 0,88 \cdot 10^{-6} \text{ nm}$ natomiast promień atomu $r_p \approx 0,1 \text{ nm}$.

3 Makroskopowa elektrodynamika ośrodków materialnych

Hipotezia: Makroskopowe pola \vec{E} i \vec{B} są wartościami średnimi pól mikroskopowych \vec{e} i \vec{b} .

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \langle \vec{e}(\vec{r}, t) \rangle \quad (4)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \langle \vec{b}(\vec{r}, t) \rangle, \quad (5)$$

gdzie średnia jest przestrzenna, czyli

$$\langle \vec{f}(\vec{r}, t) \rangle \equiv \int d^3r' w(\vec{r}') \vec{f}(\vec{r} - \vec{r}', t).$$

$w(\vec{r}')$ - funkcja wagowa spełniająca warunki:

1. jest funkcją rzeczywistą dodatnio określoną,
2. jest znormalizowana

$$\int_{\Omega} d^3r' w(\vec{r}') = 1,$$

3. jest wolnozmienna, tj.

$$w(\vec{r}' + \vec{a}) = \sum_n \frac{1}{n!} [\vec{a} \nabla]^n w(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{r}'}$$

$$w(\vec{r}' + \vec{a}) = w(\vec{r}') \pm [\vec{a} \nabla] w(\vec{r}') + \frac{1}{2} [\vec{a} \nabla]^2 w(\vec{r}'),$$

4. rozciągłość duża w porównaniu z wielkością cząstek.

RYSUNEK

3.1 Wyprowadzenie makroskopowych praw Maxwella z mikroskopowych odpowiedników

Zgodnie z równaniami mikroskopowymi 1:

$$\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = \langle \rho(\vec{r}, t) \rangle \quad (6)$$

$$\nabla \times \vec{B}(\vec{r}, t) - \partial_t \vec{E}(\vec{r}, t) = \langle \vec{j}(\vec{r}, t) \rangle \quad (7)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{0} \quad (8)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (9)$$

RYSUNEK

Najpierw obliczymy średnią z gęstości ładunków. Gęstość ładunku można rozbić na gęstość ładunków swobodnych oraz gęstość ładunków związanych

$$\rho(\vec{r}, t) = \rho_{free}(\vec{r}, t) + \rho_{bound}(\vec{r}, t)$$

gdzie:

$$\rho_{free}(\vec{r}, t) = q_e \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$$

$$\rho_{bound}(\vec{r}, t) = \sum_n \underbrace{\rho_n(\vec{r}, t)}_{n-\text{tego jonu}} = \sum_n \sum_j q_{jn} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) = \sum_n \sum_j g_{jn} \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t) - \vec{r}_{jn}(t)).$$

$$\langle \rho(\vec{r}, t) \rangle = \langle \rho_{free}(\vec{r}, t) \rangle + \langle \rho_{bound}(\vec{r}, t) \rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \int d^3r' w(\vec{r}') \rho_{free}(\vec{r} - \vec{r}_j'(t)) + \int d^3r' w(\vec{r}') \rho_{bound}(\vec{r} - \vec{r}_j'(t)) = \\
&= \int d^3r' w(\vec{r}') q_e \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t) - \vec{r}') + \int d^3r' w(\vec{r}') \sum_n \sum_j q_{jn} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j'(t) - \vec{r}') = \\
&= q_e \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) + \sum_n \sum_j q_{jn} w(\vec{r} - \vec{r}_n(t) - \vec{r}_{jn}(t)) = (*). \text{ Z własności } w \text{ wiemy, że:}
\end{aligned}$$

$$w(\vec{r} - \vec{r}_n(t) - \vec{r}_{jn}(t)) \simeq w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) - [\vec{r}_{jn} \cdot \nabla] w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)).$$

$$(*) = q_e \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) + \sum_n \sum_j q_{jn} [w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) - [\vec{r}_{jn} \cdot \nabla] w(\vec{r} - \vec{r}_n(t))]$$

Całkowity ładunek jonu: $q_n = \sum_j q_{jn}$.

Moment dipolowy $\vec{d}_n(t) = \sum_j d_{jn}(t) = \sum_j q_{jn} \vec{r}_{jn}(t)$.

$$\begin{aligned}
\langle \rho(\vec{r}, t) \rangle &= q_e \sum_i w(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) + \sum_n q_n w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) - \nabla \cdot \sum_n w(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) \vec{d}_n \\
\langle \rho(\vec{r}, t) \rangle &= \underbrace{\left\langle q_e \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \right\rangle}_{\text{makroskopowa gęstość ładunku}} + \underbrace{\left\langle \sum_n q_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) \right\rangle}_{\text{makroskopowa polaryzacja}} - \nabla \cdot \underbrace{\left\langle \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) \vec{d}_n(t) \right\rangle}_{\text{makroskopowa polaryzacja}} \\
\langle \rho(\vec{r}, t) \rangle &= \rho(\vec{r}, t) - \nabla \cdot \vec{P}(\vec{r}, t).
\end{aligned}$$

Wracając do równania 6

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) &= \langle \rho(\vec{r}, t) \rangle = \rho(\vec{r}, t) - \nabla \cdot \vec{P}(\vec{r}, t) \\
\nabla \cdot (\vec{E}(\vec{r}, t) + \nabla \vec{P}(\vec{r}, t)) &= \rho(\vec{r}, t) \\
\vec{E}(\vec{r}, t) + \nabla \vec{P}(\vec{r}, t) &\equiv \vec{D}(\vec{r}, t)
\end{aligned}$$

gdzie $\vec{D}(\vec{r}, t)$ - wektor indukcji elektrycznej

$$D_i(\vec{r}, t) = \sum_{k/1}^3 \int d^3r \int_{-\infty}^t dt' \epsilon_{kj}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') E_j(\vec{r}', t')$$

$$D_i = \sum_{k/1}^3 \epsilon_{kj} E_j.$$

3.2 Podsumowanie

Równania Maxwella w postaci makroskopowej (w ośrodkach materialnych) mają postać:

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \wp(\vec{r}, t) \quad (10)$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) - \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) = \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (11)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \partial_t \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{0} \quad (12)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (13)$$

gdzie \wp oznacza makroskopową gęstość ładunku, zdefiniowaną poprzednio jako: $\wp = < q_e \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) > + < \sum_n q_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t)) >$

wn.1. Makroskopowe pola $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ są wartościami średnimi pól mikroskopowych \vec{e} , \vec{b} . Są to pola pierwotne, natomiast pola \vec{D} , \vec{H} są polami wtórnymi wynikającymi z ustalonej procedury średniowania.

3.3 Zasada zachowania ładunku

3.3.1 Ogólne wyprowadzenie

Lokalnie (czyli w ośrodku) jest spełniona zasada zachowania ładunku, tzn. zmiana gęstości ładunku w ograniczonym obszarze Ω jest spowodowana przepływem prądu przez powierzchnię zamkniętą $\partial\Omega$ otaczającą ten obszar.

(RYSUNEK WSTAW)

$$\frac{dQ}{dt} = - \int d\vec{S} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (14)$$

gdzie:

- Q- całkowity ładunek, wyrażający się wzorem:

$$Q(t) = \int d^3r \rho(\vec{r}, t) \quad (15)$$

- $d\vec{S}$ - wektor powierzchni, którego długość jest równa polu powierzchni,
- natomiast wyrażenie po prawej stronie to natężenie prądu będące równe strumieniowi przepływającemu przez daną powierzchnię:

$$I(t) = \int d\vec{S} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (16)$$

uw. Minus w równaniu (14) oznacza, że ładunek może tylko wypływać spod powierzchni.

uw2. Wyrażenie pod całką to strumień prądu płynący przez rozważany obszar.

Wstawmy równanie (15) do równania (14):

$$\partial_t \int_{\partial\Omega} d^3r \rho(\vec{r}, t) = - \int_{\partial\Omega} d\vec{S} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \stackrel{\text{tw. Gaussa}}{=} - \int_{\Omega} d^3r \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (17)$$

$$\int d^3r \{ \partial_t \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \} = 0 \quad (18)$$

Stąd:

$$\partial_t \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0 \quad (19)$$

Wzór (19) to prawo zachowania ładunku - ładunek nie może zniknąć, może tylko przepłynąć przez powierzchnię.

3.3.2 Wyprowadzenie praw zachowania ładunku z praw Maxwella

Zadziałajmy obustronnie ∂_t na 1. równanie Maxwella (10) oraz $\nabla \cdot$ na 2. równanie Maxwella (11):

$$(1) \Rightarrow \partial_t \nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \delta_t \rho(\vec{r}, t) \Rightarrow \nabla \cdot [\partial_t \vec{D}(\vec{r}, t)] = \partial_t \rho(\vec{r}, t) \quad (20)$$

$$(2) \Rightarrow \underbrace{\nabla \cdot [\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t)]}_{=0 \text{ (bo jest to div z rot)}} - \nabla \cdot \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) = \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (21)$$

Łącząc oba te równania dostajemy:

$$- \partial_t \rho(\vec{r}, t) = \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (22)$$

Równanie (22) to zasada zachowania ładunku.

3.3.3 Równania materiałowe

Z jednej strony równania Maxwella są niezmiennicze względem zmiany ośrodka, z drugiej strony ich rozwiązania- pola $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ - są różne w różnych ośrodkach. Dlatego potrzebujemy dodatkowych równań, które będą określać ośrodek- dlatego postulujemy równania materiałowe:

$$D_i(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^3 \int d^3r' \int_{-\infty}^t dt' \epsilon_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') E_j \quad (23)$$

$$H_i(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^3 \int d^3r' \int_{-\infty}^t dt' \mu_{ij}^{-1}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') B_j \quad (24)$$

$$J_i(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^3 \int d^3r' \int_{-\infty}^t dt' \sigma_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') E_j - \text{mikroskopowe prawo Ohma} \quad (25)$$

wn.1. Mamy zatem zestaw równań: Równania Maxwella+równania materiałowe

wn.2. W równaniach materiałowych jądrem całkowym są:

(23): $\epsilon_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ - to element tensora przenikalności elektrycznej ośrodka

(24): $\mu_{ij}^{-1}(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ - to element tensora odwrotności przenikalności magnetycznej

(25): $\sigma_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ - to element tensora przewodnictwa elektrycznego.

uw.1. Równania materiałowe mają swoje uzasadnienie w termodynamice stanów nierównowagowych, natomiast do elektrodynamiki zostały dodane *ad hoc*. uw.2.

uw.2. Ostatnie (25) równanie to mikroskopowe (lokalne) prawo Ohma, które można również zapisać w popularniejszej wersji:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \sigma(\vec{r}, t) \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (26)$$

3.3.4 Równania Maxwella a prąd stały

Zał. Załóżmy, że **prąd jest stały**, tzn. płynie w sposób ciągły i nie gromadzi się (jest stały w czasie).

Wówczas:

- Równanie Maxwella (11) \Rightarrow powstaje stałe pole \vec{H}
- Równanie Maxwella (12) $\Rightarrow \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) + \underbrace{\partial_t \vec{B}(\vec{r})}_{=0} = 0$

Stąd:

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) = 0 \quad (27)$$

Ponieważ wiemy, że dywergencja z rotacji daje 0, to \vec{E} musi dać się przedstawić jako:

$$\vec{E} = -\nabla V(\vec{r}) \quad (28)$$

gdzie $V(\vec{r})$ to potencjał.

wn. Jeśli prąd jest stały, to pole elektryczne ma potencjał.

- Prawo zachowania ładunku (19) $\Rightarrow \underbrace{\partial_t \rho(\vec{r}, t)}_{=0} + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0$
- $$\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}) = 0 \quad (29)$$

- Mikroskopowe prawo Ohma $\Rightarrow \nabla[\sigma(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r})] = 0$

Łącząc to równanie z równaniem (28), dostajemy:

4 Metody opisu klasycznej dynamiki cząstek

W rozważaniach opuszczamy mechanikę Lagrangowską.

4.1 Mechanika Newtonowska

Siła Lorentza

$$\vec{F}_l(\vec{r}, t) = q[\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}(t) \times \vec{B}(\vec{r}, t)] \quad (30)$$

Jeżeli postać siły jest określona, to równanie ruchu możemy zapisać w postaci

$$m \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F}_L(\vec{r}, t) \quad (31)$$

Zauważmy, że w mechanice Newtonowskiej nie ma ograniczenia na postać siły \vec{F}_L .

Przykład - równanie Langevine'a

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) = \vec{F}_R - \gamma \vec{v}(t) + \vec{\Gamma}(t),$$

gdzie \vec{F}_R to siła regularna (np. od zewnętrznego pola elektrycznego, γ to współczynnik tarcia, a $\vec{\Gamma}(t)$ to siła stochastyczna.

4.2 Mechanika Hamiltonowska