

# Wstęp do kwantowej teorii transportu elektronowego

Sylwia Gołąb, Paweł Rzońca

21 października 2015

## Spis treści

|          |   |          |
|----------|---|----------|
| <b>1</b> | <b>Początki teorii elektronowej (subiektywnie)</b>                              | <b>2</b> |
| <b>2</b> | <b>Teoria elektronowa Lorenza</b>   | <b>3</b> |
| <b>3</b> | <b>Makroskopowa elektrodynamika ośrodków materialnych</b>                       | <b>4</b> |
| 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        |

# 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  $\Omega$  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  $\partial_t$  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: