

第七章 金属电导理论

- 7.1 分布函数和 Boltzmann 方程
- 7.2 驰豫时间近似
- 7.3 热导率
- 7.4 热电效应
- 7.5 散射机制
- 7.6 Boltzmann 方程的局限性

一、分布函数

不考虑相互作用、处于平衡时，电子的分布遵从 Fermi - Dirac 统计， $f_n(\mathbf{k}) = f_0(\varepsilon_n(\mathbf{k})) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_n - \mu)/k_B T} + 1}$ ，其中 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 是能量， $\mu \simeq \varepsilon_F$ 。在有外场（如电场、磁场或温度梯度场）存在时，电子的平衡分布被破坏。在散射比较弱的情况下，类似于气体分子运动论，我们可以用由坐标 \mathbf{r} 和波矢 \mathbf{k} 组成的单粒子相空间中的半经典分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 来描述电子的运动。

分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 的物理意义是，在 t 时刻，电子的位置处在 $\mathbf{r} - \mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}$ 的体积元内，波矢处在 $\mathbf{k} - \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$ 范围内单位体积的电子数， $\Delta n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)\Delta R\Delta\mathbf{k}$ 。也就是说， $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ 是在单粒子相空间中的粒子数密度。

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) &= \left\langle \sum_{i=1}^N \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)] \delta[\mathbf{k} - \mathbf{k}_i(t)] \right\rangle \\ &= \text{Tr} \left\{ \sum_{i=1}^N \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)] \delta[\mathbf{k} - \mathbf{k}_i(t)] \rho(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{k}_i\}, t) \right\} \\ &= N \text{Tr} \left\{ \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_1(t)] \delta[\mathbf{k} - \mathbf{k}_1(t)] \rho(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{k}_i\}, t) \right\} \end{aligned}$$

分布函数

从分布函数我们可以得到各种物理量，例如粒子数、能量密度；
电流、热流密度等

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

$$\mathbf{J} = \sum_{\mathbf{k}} (-e) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = -e \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

$$U(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

$$\mathbf{J}_U = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \varepsilon_n(\mathbf{k}) f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

$$dQ = T dS = dU - \mu dN = d \sum_{\mathbf{k}} [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu] f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

$$\mathbf{J}_Q = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu] f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$

分布函数的改变

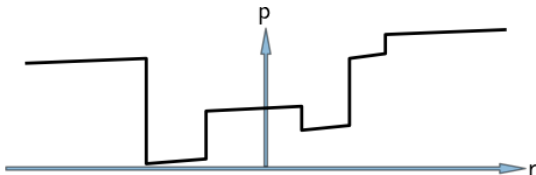
- 漂移运动：粒子受到外场作用下的运动改变

$$\mathbf{r} \Rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{v}(\mathbf{k})\Delta t, \quad \mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{F}\Delta t/\hbar$$

- 碰撞：粒子受到其它粒子的碰撞导致的运动状态改变

短程作用 $\Delta l \sim 1\text{\AA}$ ，碰撞持续时间 $\Delta t \sim \text{\AA}/v(\mathbf{k}) \sim 10^{-15}\text{s}$ 。可以看成是瞬时完成，在碰撞前后粒子空间位置基本不变，但是动量（波矢）有较大的变化。

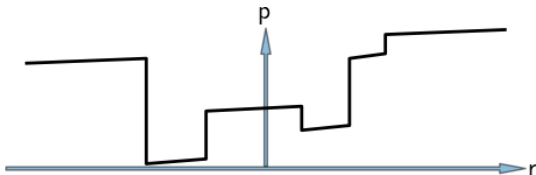
$$\mathbf{r} \Rightarrow \mathbf{r}, \quad \mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{k}'$$



分布函数的改变

- Boltzmann 方程

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = \frac{\partial f_n}{\partial t} \Big|_{drift} + \frac{\partial f_n}{\partial t} \Big|_{scatt}$$



漂移项

时间 t 到 $t+\Delta t$ 内, $[(\mathbf{r}-\Delta\mathbf{r}/2)—(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r}/2)]$, $[(\mathbf{k}-\Delta\mathbf{k}/2)—(\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}/2)]$ 之间的粒子数 n 的改变量

$$\begin{aligned}\Delta n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t + \Delta t) - \Delta n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) &= \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{k} \Delta t \\ &= [-f(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}/2, \mathbf{k}, t) \frac{d(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}/2)}{dt} \\ &\quad + f(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{r}/2, \mathbf{k}, t) \frac{d(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{r}/2)}{dt}] \Delta \mathbf{k} \\ &+ [-f(\mathbf{r}, \mathbf{k} + \Delta \mathbf{k}/2, t) \frac{d(\mathbf{k} + \Delta \mathbf{k}/2)}{dt} \\ &\quad + f(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \Delta \mathbf{k}/2, t) \frac{d(\mathbf{k} - \Delta \mathbf{k}/2)}{dt}] \Delta \mathbf{r} \\ &= - \left\{ \left[f + \frac{\Delta \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f}{2} \right] \left[\dot{\mathbf{r}} + \frac{\Delta \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}}}{2} \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[f - \frac{\Delta \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f}{2} \right] \left[\dot{\mathbf{r}} - \frac{\Delta \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}}}{2} \right] \right\} \Delta \mathbf{k} \Delta t + \dots\end{aligned}$$

漂移项

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \Delta r \Delta k \Delta t = -\{\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \dot{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f \\ + f[\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}}]\} \Delta r \Delta k \Delta t$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{drift} = -\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \dot{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f$$

从边界进出相空间体积元导致的粒子数改变

$$-f[\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}}]$$

相空间体积元体积随时间改变导致密度变化

漂移项

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \mathbf{v}_n(\mathbf{k})$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F} = -e[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)]$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} &= \nabla_{\mathbf{k}} \cdot [\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \\ &= [\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{v}_n(\mathbf{k})] \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = [\nabla_{\mathbf{k}} \times \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})] \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \end{aligned}$$

$$\left. \frac{\partial f_n}{\partial t} \right|_{drift} = -\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_n - \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_n$$

☞ 漂移项驱动系统，使得系统偏离平衡态

碰撞项

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{scatt} &= \sum_{\mathbf{k}'} \{P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) \\ &\quad - P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t)] f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)\} \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \{P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) \\ &\quad - P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t)] f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)\}\end{aligned}$$

$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 是粒子从 $(\mathbf{r}, \mathbf{k}')$ 到 (\mathbf{r}, \mathbf{k}) 的跃迁几率。第一项是从处于 $(\mathbf{r}, \mathbf{k}')$ 的态经过碰撞后变为 (\mathbf{r}, \mathbf{k}) 的几率；第二项是从处于 (\mathbf{r}, \mathbf{k}) 的态经过碰撞后变为 $(\mathbf{r}, \mathbf{k}')$ 的几率。这里考虑了 Pauli 不相容原理。

☞ 散射项使得系统恢复平衡

平衡态时的散射项

$$f_n^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})] = \frac{1}{e^{[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T} + 1}$$

$$\left. \frac{\partial f_n}{\partial t} \right|_{scatt} = 0 \quad \Leftarrow \quad \text{细致平衡}$$

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - f_n^{(0)}(\mathbf{k})] f_n^{(0)}(\mathbf{k}') = P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [1 - f_n^{(0)}(\mathbf{k}')] f_n^{(0)}(\mathbf{k})$$

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T} = P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{[\varepsilon_n(\mathbf{k}') - \mu]/k_B T}$$

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{[\varepsilon_n(\mathbf{k}') - \varepsilon_n(\mathbf{k})]/k_B T}$$

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad \Leftarrow \quad \text{弹性散射: } \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}')$$

Chapman-Enskog 展开

- 漂移项：外场驱动使得系统偏离平衡态，线性， $\propto \lambda$
- 碰撞项：恢复平衡，非线性

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} [\propto \lambda^1] + f^{(2)} [\propto \lambda^2] + f^{(3)} [\propto \lambda^3] + \dots$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{drift} = \hat{D}[f] = \hat{D}[f^{(0)}] [\propto \lambda^1] + \hat{D}[f^{(1)}] [\propto \lambda^2] + \hat{D}[f^{(2)}] [\propto \lambda^3] + \dots$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{scatt} = \hat{S}[f] = \hat{S}_0[f^{(0)}] \quad (\boxed{=0}) + \hat{S}_1[f^{(0)}, f^{(1)}] [\propto \lambda^1] \\ + \hat{S}_2[f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}] [\propto \lambda^2] + \hat{S}_3[f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}, f^{(3)}] [\propto \lambda^3] + \dots$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{drift} + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{scatt}$$

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} = \hat{D}[f^{(0)}] + \hat{S}_1[f^{(0)}, f^{(1)}] \quad \Leftarrow \propto \lambda^1$$

$$\frac{\partial f^{(2)}}{\partial t} = \hat{D}[f^{(1)}] + \hat{S}_2[f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}] \quad \Leftarrow \propto \lambda^2$$

...

二、弛豫时间近似

碰撞项是 Boltzmann 方程中最复杂的因素，因此常常需要采用不同的近似才能解出方程。考虑到碰撞项是使得系统恢复到平衡态，因此一个最简单、应用最广泛的近似是弛豫时间近似。

$$\left. \frac{\partial f_n}{\partial t} \right|_{scatt} = -\frac{f_n - f_n^{(0)}}{\tau_n(\mathbf{k})}$$

其中 $f_n^{(0)}$ 是平衡时的 Fermi-Dirac 分布函数； $\tau_n(\mathbf{k})$ 是弛豫时间，依赖于电子的波矢 / (准) 动量。

$\tau_n(\mathbf{k})$ 的物理意义可以从下面这个模型理解。假设从 $t = 0$ 时刻开始撤除外场，那么系统在碰撞项作用下回复平衡态，在弛豫时间近似下，

$$\frac{\partial f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\frac{f_n - f_n^{(0)}}{\tau_n(\mathbf{k})} \quad \Rightarrow$$
$$f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f_n^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + \Delta f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t = 0)e^{-t/\tau_n(\mathbf{k})}$$

二、弛豫时间近似

因此弛豫时间近似就是假设碰撞促使对平衡分布的偏差是以指数的形式消失，分布函数大体上在 $\tau_n(\mathbf{k})$ 时间内回复到平衡状态。

散射越强、越频繁，回复平衡越快，弛豫时间越短。因此弛豫时间可以大体上看成是发生两次散射的平均间隔。

直流电导率

我们先考虑最简单的直流电导率。驱动项是空间均匀的电场 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}$, $\dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F}/\hbar = -e\mathbf{E}/\hbar$ 。假设分布函数也是空间均匀的, $\nabla_{\mathbf{r}} f_n = 0$ 。在驰豫时间近似下, Boltzmann 方程简化为

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = +\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_n - \frac{f_n - f_n^{(0)}}{\tau_n(\mathbf{k})}$$

达到稳定后, f_n 不发生改变, $\partial f_n / \partial t = 0$ 。电场不是很强时, 可以把 E 当成 Chapman-Enskog 展开的系数, 把分布函数展开

$$f_n = f_n^{(0)} + f_n^{(1)} + f_n^{(2)} + \dots$$
$$f_n^{(1)} \propto E, \quad f_n^{(2)} \propto E^2 \dots,$$

$$0 = \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_n^{(0)} - \frac{f_n^{(1)}}{\tau_n(\mathbf{k})}$$

$$0 = \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_n^{(1)} - \frac{f_n^{(2)}}{\tau_n(\mathbf{k})}$$

...

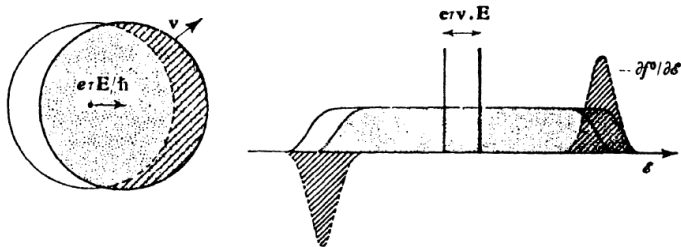
直流电导率：分布函数

在线性输运区间，只需要考虑电场的一阶项

$$\begin{aligned} f_n^{(1)} &= \frac{e\tau_n(\mathbf{k})}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_n^{(0)} \\ &= \frac{e\tau_n(\mathbf{k})}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})]}{\partial \varepsilon} \\ &= e\tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})]}{\partial \varepsilon} \end{aligned}$$

$$f_n(\mathbf{k}) = f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})] + e\tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})]}{\partial \varepsilon}$$

分布函数整体偏移；或者电子从 $-k$ 变成 $+k$

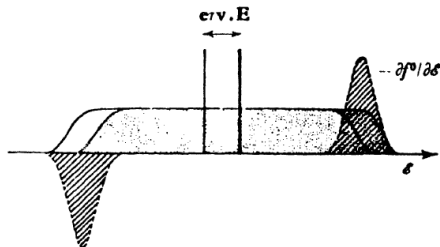
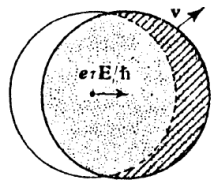


直流电导率：分布函数

$$f_n(\mathbf{k}) = f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})] + e\tau_n(\mathbf{k})\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})]}{\partial \varepsilon}$$
$$\simeq f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k} + e\mathbf{E}\tau_n/\hbar)]$$

位移 Fermi 分布, $\mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{k} + e\mathbf{E}\tau_n(\mathbf{k})/\hbar$

$$0 = \frac{d\delta k}{dt} = \frac{-e\mathbf{E}}{\hbar} - \frac{\delta k}{\tau_n(\mathbf{k})} \Rightarrow \delta k = -\frac{e\mathbf{E}\tau_n(\mathbf{k})}{\hbar}$$



直流电导率：分布函数

直流电导

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n &= \sum_{\mathbf{k}} (-e) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) f_n(\mathbf{k}) \\ &= \boxed{-e \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) f_0 = 0} - e^2 \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \boxed{= \overleftrightarrow{\sigma}_n \cdot \mathbf{E}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\sigma}_n &= -e^2 \sum_{\mathbf{k}} \tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \\ &= -e^2 \sum_{\mathbf{k}} \tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})]}{\partial \varepsilon} \\ &= \int d\varepsilon e^2 \sum_{\mathbf{k}} \delta[\varepsilon - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \frac{-\partial f_0[\varepsilon_n(\mathbf{k})]}{\partial \varepsilon} \\ &= \int d\varepsilon \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \end{aligned}$$

直流电导率：分布函数

直流电导

$$\begin{aligned}\overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon) &= e^2 \sum_{\mathbf{k}} \tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \delta[\varepsilon - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \\ &= e^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \delta[\varepsilon - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \cdots \\ &\Rightarrow \int \oint_{\varepsilon_n(\mathbf{k})=\varepsilon} \frac{dS_{\mathbf{k}} dk_{\perp}}{(2\pi)^3} \tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \delta[\varepsilon - \varepsilon_n(\mathbf{k})] \\ &= e^2 \oint_{\varepsilon_n(\mathbf{k})=\varepsilon} \frac{dS_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \frac{\tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k})}{|\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k})|} \\ &= g(\varepsilon) \langle e^2 \tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \rangle_{\varepsilon_n(\mathbf{k})=\varepsilon}\end{aligned}$$

各向同性时：

$$\overleftrightarrow{\sigma}_n = \frac{1}{3} g(\varepsilon) e^2 \tau_n(\varepsilon) \mathbf{v}_n^2(\varepsilon) \hat{I}$$

各向同性材料

在各向同性的带顶或者带底中， $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{k}/m^*$

$$\begin{aligned}\overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon) &= \frac{e^2}{3}g(\varepsilon)v(\varepsilon)^2\tau_n(\varepsilon) = \frac{e^2\tau_n(\varepsilon)}{m^*} \frac{2}{3}g(\varepsilon) \frac{1}{2}m^*v_n^2 = \frac{e^2\tau_n(\varepsilon)}{m^*} \frac{2}{3}g(\varepsilon)\varepsilon \\ &= \frac{n(\varepsilon)e^2\tau(\varepsilon)}{m^*} \\ &= ne\mu_{\text{mobility}}\end{aligned}$$

和 Drude 模型结果相同，只是用有效质量取代电子质量

$\mu_{\text{mobility}} = e\tau/m^*$ ，迁移率。

强弱简并情况

金属中,属于强简并极限,可以用 $T = 0$ 近似, $-\partial f_0/\partial \varepsilon = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$,

$$\sigma_n = \sigma_n(\varepsilon_F) = g(\varepsilon_F) \oint_{\varepsilon = \varepsilon_F} \langle e^2 \tau_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \rangle_{\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_F}$$

半导体中,弱简并极限:

$$f_0 \simeq e^{-(\varepsilon - \mu)/k_B T}$$

$$-\partial f_0/\partial \varepsilon = \frac{f_0}{k_B T}$$

$$\overleftrightarrow{\sigma}_n = \int \overleftrightarrow{\sigma}(\varepsilon) e^{-(\varepsilon - \mu)/k_B T} d \frac{\varepsilon}{k_B T}$$

三、扩散和热导率

同时存在电场、化学势梯度和温度梯度时

$$\begin{aligned} f_n^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) &= \frac{1}{e^{[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu(\mathbf{r})]/k_B T(\mathbf{r})} + 1} \\ \nabla_{\mathbf{r}} f_n^{(0)} &= \left[\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu(\mathbf{r})}{k_B T(\mathbf{r})} \right] k_B T(\mathbf{r}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \\ &= \left[-\frac{\nabla_{\mathbf{r}} \mu}{k_B T} - \frac{[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu] \nabla_{\mathbf{r}} T}{k_B T^2} \right] k_B T \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \\ &= - \left[\nabla_{\mathbf{r}} \mu + \frac{[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu]}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T \right] \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \end{aligned}$$

保留到 $\nabla_{\mathbf{r}} \mu$, $\nabla_{\mathbf{r}} T$ 和 \mathbf{E} 的一次方项, 稳定时

$$\begin{aligned} 0 &= -\mathbf{v}_n \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_n^{(0)} - \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_n^{(0)} - \frac{f_n^{(1)}}{\tau_n} \\ f_n^{(1)} &= \tau_n \mathbf{v}_n \cdot \left[\nabla_{\mathbf{r}} \mu + \frac{(\varepsilon_n - \mu)}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T \right] \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + e \tau_n \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_n \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \\ &= e \tau_n \mathbf{v}_n \cdot \left[\tilde{\mathbf{E}} + \frac{(\varepsilon_n - \mu)}{T} \nabla_{\mathbf{r}} T \right] \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Leftarrow \tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{E} + \nabla_{\mathbf{r}} \mu / e \end{aligned}$$

扩散

只有浓度梯度和外电场时

$$f_n^{(1)} = e\tau_n v_n \cdot \tilde{\mathbf{E}} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Leftarrow \tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{E} + \nabla_{\mathbf{r}} \mu / e$$

$$\mathbf{J} = \overleftrightarrow{\sigma}_n \tilde{\mathbf{E}} = \overleftrightarrow{\sigma}_n [\nabla_{\mathbf{r}} (\mu/e) + \mathbf{E}] = \frac{1}{e} \overleftrightarrow{\sigma}_n \frac{\partial \mu}{\partial n} \nabla_{\mathbf{r}} n + \overleftrightarrow{\sigma}_n \mathbf{E}$$

$$= e \overleftrightarrow{D}_n \nabla_{\mathbf{r}} n + \overleftrightarrow{\sigma}_n \mathbf{E}$$

$$\overleftrightarrow{D}_n = \frac{1}{e^2} \frac{\partial \mu}{\partial n} \overleftrightarrow{\sigma}_n$$

Einstein 关系

各向同性 $\sigma = ne\mu_{\text{mobility}}$,

$$\mathbf{J} = eD \nabla_{\mathbf{r}} n + ne\mu_{\text{mobility}} \mathbf{E}$$

$$D = \frac{1}{e^2} \frac{\partial \mu}{\partial n} ne\mu_{\text{mobility}} = \frac{\mu_{\text{mobility}}}{e} \frac{\partial \mu}{\partial \ln n}$$

扩散

☞ 强简并极限: $\mu \simeq \varepsilon_F \propto n^{2/3}$

$$D = \frac{2\mu_{\text{mobility}}\varepsilon_F}{3e}$$

☞ 弱简并极限: $\frac{\mu}{k_B T} = \ln \frac{N}{z} = \ln \frac{N}{V(2\pi m k_B T/h^2)^{3/2}} = \ln n + \dots$

$$D = \frac{\mu_{\text{mobility}} k_B T}{e}$$

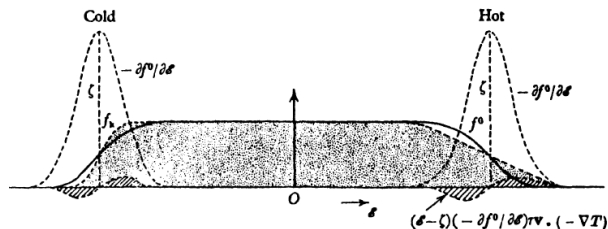
☞ 有多种载流子时

$$\mathbf{J} = eD_e \nabla \mathbf{r} n_e + n_e e \mu_e - eD_h \nabla \mathbf{r} n_h + n_h e \mu_h$$

热导率：分布函数

只有温度梯度时 Boltzmann 方程的解

$$f_n = f_0 + e\tau_n v_n \cdot \left[\frac{\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu}{eT} \nabla_r T \right] \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$



- ☞ 电导率主要由速度和电场同向的电子变成与电场反向的电子决定。
- ☞ 热导率主要由从在 Fermi 面下面的电子变成 Fermi 面上面的电子决定。

热导率

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \sum_{\mathbf{k}} (-e) \mathbf{v}_n f_n = e^2 \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n \cdot \left[\tilde{\mathbf{E}} + \frac{\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu}{eT} \nabla_{\mathbf{r}} T \right] \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \\ &= \overleftrightarrow{\sigma}_n^{(0)} \cdot \tilde{\mathbf{E}} + \overleftrightarrow{\sigma}_n^{(1)} \frac{\nabla_{\mathbf{r}} T}{eT} = \overleftrightarrow{L}_{11} \tilde{\mathbf{E}} + \overleftrightarrow{L}_{12} \frac{-\nabla_{\mathbf{r}} T}{T} \end{aligned} \quad \text{电流}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_Q &= \sum_{\mathbf{k}} [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu] \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) f_n \\ &= -\frac{\overleftrightarrow{\sigma}_n^{(1)}}{e} \cdot \tilde{\mathbf{E}} - \frac{\overleftrightarrow{\sigma}_n^{(2)}}{e^2} \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{r}} T}{T} = \overleftrightarrow{L}_{21} \tilde{\mathbf{E}} + \overleftrightarrow{L}_{22} \frac{-\nabla_{\mathbf{r}} T}{T} \end{aligned} \quad \text{热流}$$

$$\overleftrightarrow{\sigma}_n^{(l)} = \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^l \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right)$$

Onsager 关系

$$\mathbf{J} = \overleftrightarrow{L}_{11} \mathbf{E} + \overleftrightarrow{L}_{12} \frac{-\nabla_r T}{T}$$

$$\mathbf{J}_Q = \overleftrightarrow{L}_{21} \mathbf{E} + \overleftrightarrow{L}_{22} \frac{-\nabla_r T}{T}$$

$$\overleftrightarrow{L}_{12} = \overleftrightarrow{L}_{21} = -\frac{\sigma^{(1)}}{e}$$

Onsager 关系

更加一般的结果：广义力 F_i ，广义流 J_i ，如果熵产生率

$\frac{d_i S}{dt} = \sum_i J_i F_i$ ，那么线性效应系数 $J_i = \sum_j L_{ij} F_j$ 有对称关系：

$L_{ij} = L_{ji}$ 。⇐ 时间反演对称的结果。

例如：不同方向的电阻率 $\rho_{ij} = \rho_{ji}$ 。

Onsager-Casimir 关系： $L_{ij}(\mathbf{B}) = L_{ji}(-\mathbf{B})$ 。

$$\rho_{xx}(B) = \rho_{xx}(-B) = \rho_{xx}(0) + \Delta\rho B^2$$

$$\rho_{xy}(B) = \rho_{yx}(-B) = R_H B$$

热导率

强简并（金属或者低温下的非本征半导体），

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{k_B T} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] \simeq \delta(\varepsilon - \mu) \simeq \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$$

$$\overleftrightarrow{\sigma}^{(0)} \simeq \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon_F) = \overleftrightarrow{L}_{11}$$

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\sigma}^{(1)} &= \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu) \sigma_n(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \\ &= \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu) [\sigma_n(\mu) + \sigma'_n(\mu)(\varepsilon - \mu) + \dots] \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \\ &\simeq \overleftrightarrow{\sigma}'_n(\varepsilon_F) \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3} = -e \overleftrightarrow{L}_{12} = -e \overleftrightarrow{L}_{21} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\sigma}^{(2)} &= \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^2 \sigma_n(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \\ &\simeq \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon_F) \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3} = -e^2 \overleftrightarrow{L}_{22} \end{aligned}$$

热导率

只有外加电场,

$$\mathbf{J} = \overleftrightarrow{L}_{11} \cdot \mathbf{E} = \overleftrightarrow{\sigma}_n \cdot \mathbf{E} \simeq \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon_F) \cdot \mathbf{E}$$

纯热流 $\mathbf{J} = 0$, $\tilde{\mathbf{E}} = \overleftrightarrow{L}_{11}^{-1} \overleftrightarrow{L}_{12} \frac{\nabla_{\mathbf{r}} T}{T}$,

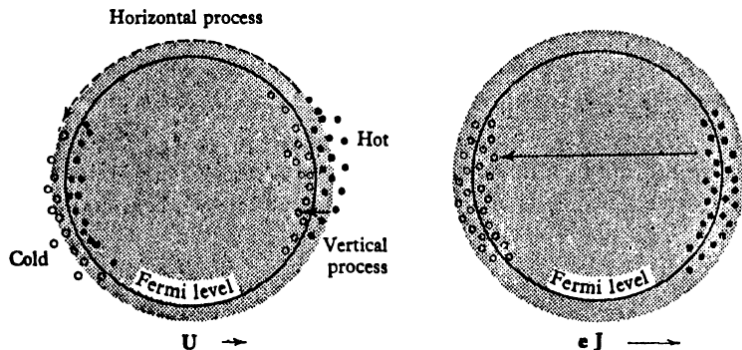
$$\mathbf{J}_Q = [\overleftrightarrow{L}_{22} - \overleftrightarrow{L}_{21} \overleftrightarrow{L}_{11}^{-1} \overleftrightarrow{L}_{12}] \cdot \frac{-\nabla_{\mathbf{r}} T}{T} = -\overleftrightarrow{\kappa} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} T$$

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\kappa} &= \frac{1}{T} \left[\overleftrightarrow{L}_{22} \left(\propto T^2 \right) - \overleftrightarrow{L}_{21} \left(\propto T^2 \right) \overleftrightarrow{L}_{11}^{-1} \overleftrightarrow{L}_{12} \left(\propto T^2 \right) \right] \\ &\simeq \overleftrightarrow{L}_{22} / T \simeq \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e^2} \overleftrightarrow{\sigma}_n \end{aligned}$$

各向同性时, $\overleftrightarrow{\sigma} = \sigma \overleftrightarrow{I}$, $\overleftrightarrow{\kappa} = \kappa \overleftrightarrow{I}$,

☞ Wiedmann-Franz 定律: $\frac{\kappa}{T\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2$

弹性散射和非弹性散射



- 在得到 Wiedmann-Franz 定律时，我们假设电导和热导的弛豫时间相同。实际上不同散射对电导和热导贡献不同，因此弛豫时间可能不同。
- 电荷输运：主要贡献是 $v_n(\mathbf{k})$ 改变比较大的散射
 - ☞ 小角度的非弹性散射不重要
- 热输运：主要贡献是 $[\epsilon_n(\mathbf{k}) - \mu]v_n(\mathbf{k})$ 改变比较大的散射
 - ☞ 小角度的非弹性散射也有重要贡献

弹性散射和非弹性散射

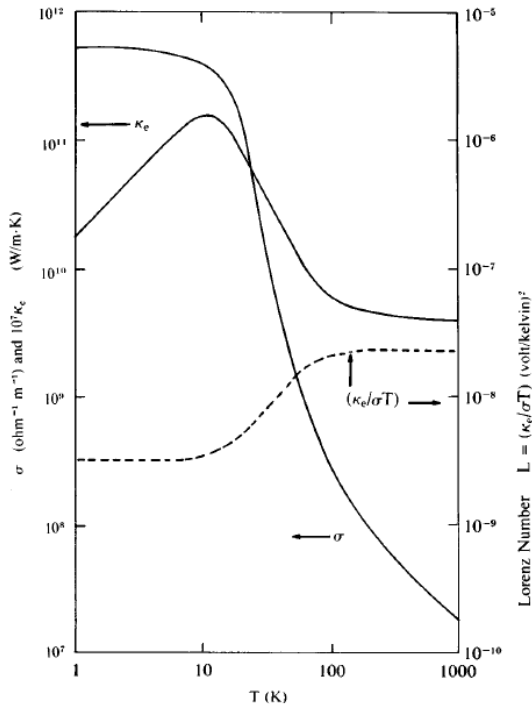
非弹性散射对电导和热导的贡献不同，因此 Wiedemann-Franz 定律在弹性散射占主导的时候成立，非弹性散射重要时，Wiedemann-Franz 定律就不成立。

这可以解释 Cu 的 Lorenz 常数（图中的虚线）随温度变化的关系：低温和高温区基本上是个常数，但在 10-100 K 范围内随温度变化。

☞ 高温 ($T \gg T_D$) 下，电声子散射近乎是弹性；

☞ 低温 ($T \ll T_D$) 下，主要是弹性的杂质散射。

☞ 在中间温区 ($T \sim T_D$)，非弹性散射主导。



四、热电效应

Zeebeck 效应：温差导致电场 / 电压差

$$\mathbf{J} = L_{11}\mathbf{E} + L_{12}\frac{-\nabla_{\mathbf{r}}T}{T}$$

$$\mathbf{J}_Q = L_{21}\mathbf{E} + L_{22}\frac{-\nabla_{\mathbf{r}}T}{T}$$

$$0 = \mathbf{J} \Rightarrow$$

$$\mathbf{E} = L_{11}^{-1}L_{12}\frac{-\nabla_{\mathbf{r}}T}{T} = \epsilon\nabla_{\mathbf{r}}T$$

$$V = \int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} = \epsilon\Delta T$$

ϵ 的意义：只有电场时

$$\mathbf{J} = L_{11}\mathbf{E}$$

$$\mathbf{J}_Q = -L_{21}\mathbf{E} = T\left[\frac{-L_{21}L_{11}^{-1}}{T}\right]L_{11}\mathbf{E} = T\epsilon\mathbf{J}$$

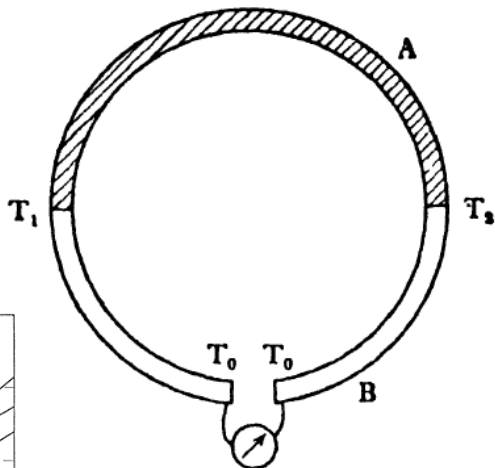
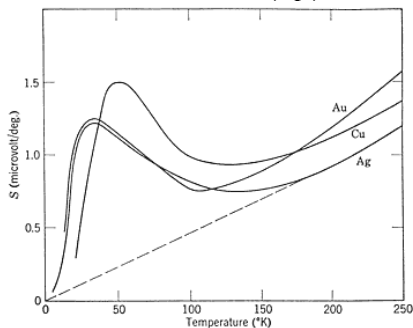
$$\mathbf{J}_Q = T\mathbf{J}_S \Rightarrow \mathbf{J}_S = \epsilon\mathbf{J}$$

$\Rightarrow \epsilon$ 是单位电流携带的熵 \Rightarrow 超导体没有热电效应

Seebeck 效应

- 热电偶温度计
- 发电
- Seebeck 系数

$$\epsilon = \frac{L_{11}^{-1} L_{12}}{T}$$
$$= \frac{-\pi^2 k_B T}{3e} \frac{\sigma'(\epsilon_F)}{\sigma(\epsilon_F)}$$



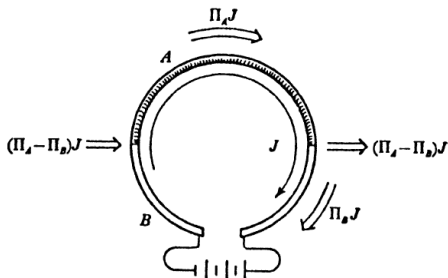
Seebeck 效应的测量
Ziman, Fig. 128

Peltier 效益

Peltier 效应：电流通过不同导体界面上产生的热

$$J_Q = T\epsilon_A J - T\epsilon_B J = T(\epsilon_A - \epsilon_B)J = \Pi_{AB}J$$

- ☞ 可吸热或者放热；改变电流方向可以改变热流方向
- ☞ 集制冷、制热于一体



Peltier 效益

Ziman, Fig. 129

五、Matthiessen 定则

不同散射机制对电导贡献不同，当散射不是特别强的时候，不同散射机制可以简单叠加。

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau} &= \frac{1}{\tau_{imp}} + \frac{1}{\tau_{ph}} + \dots \\ \rho &= \frac{1}{\sigma} = \frac{m^*}{ne^2\tau} = \frac{m^*}{ne^2\tau_{imp}} + \frac{m^*}{ne^2\tau_{ph}} \\ &= \rho_{imp} + \rho_{ph}\end{aligned}$$

- 电离杂质导致的 ρ_{imp} 和温度变化关系不大；低温下 ($T \ll \Theta_D$) 声子导致 $\rho_{ph} \propto T^5$ ；高温下 ($T \gg \Theta_D$) $\rho_{ph} \propto T$ 。
- 👉 在弛豫时间近似下，Boltzmann 方程得到的线性输运系数（电导、热导等）和 Drude 模型没有区别。但在 Drude 模型中，弛豫时间是唯象参数，无法从理论上得到。而在 Boltzmann 方程中，我们可以通过计算散射项的贡献得到弛豫时间。

杂质散射

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{scatt} = \sum_{\mathbf{k}'} \{ P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) \\ - P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t)] f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \}$$

$$\mathcal{H}_I = \sum_{I=1}^{N_{imp}} u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_I) = \sum_I \sum_{\mathbf{q}} u(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_I)}$$

$$P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{n\mathbf{k}'} | \mathcal{H}_I | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}'} - \varepsilon_{n\mathbf{k}}) = P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\ \simeq \frac{2N_{imp}\pi}{\hbar} u^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}'} - \varepsilon_{n\mathbf{k}})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{scatt} = \sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})] \\ = \frac{2\pi N_{imp}}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} u^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) [f^{(1)}(\mathbf{k}') - f^{(1)}(\mathbf{k})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})$$

杂质电导

$$\begin{aligned} 0 &= \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{drift} + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{scatt} \\ &= \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f^{(0)} - \frac{2\pi N_{imp}}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} u^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) [f^{(1)}(\mathbf{k}) - f^{(1)}(\mathbf{k}')] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \end{aligned}$$

驱动项： $\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f^{(0)} = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ ，假设能谱以及散射都是各向同性，在线性响应区间： $f^{(1)}(\mathbf{k}) = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) \tau_{imp}(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ ，

$$\frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}}}{\tau_{imp}(\mathbf{k})} = \frac{2\pi N_{imp}}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} u^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})$$

各向同性时

$$\frac{1}{\tau_{imp}(\varepsilon)} = \frac{2\pi N_{imp}}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} u^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) [1 - \cos \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})$$

☞ 输运的弛豫时间和粒子寿命不同，小角度散射不重要

杂质电导

各向同性时

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_{imp}(\varepsilon)} &= \frac{2\pi N_{imp}}{\hbar} \int \frac{dk'_\perp d\Omega_{\mathbf{k}'}}{(2\pi)^3} u^2 \left[\sqrt{2(1 - \cos \theta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}})} \right] \\ &\quad \times v_k [1 - \cos \theta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \\ &= \frac{2\pi N_{imp}}{\hbar} \int \frac{d\Omega}{(2\pi)^3} u^2(\varepsilon, \theta) [1 - \cos \theta]\end{aligned}$$

☞ 输运的弛豫时间和粒子寿命不同，小角度散射不重要

各项异性的情况

$$f^{(1)}(\mathbf{k}) = f(\varepsilon(\mathbf{k}), \theta_{\mathbf{k}}, \phi_{\mathbf{k}}) = \sum_{lm} f_{lm}^{(1)}(\varepsilon) Y_{lm}(\theta_{\mathbf{k}}, \phi_{\mathbf{k}})$$

计算复杂很多

声子散射

Bloch 的结果：假设声子处于平衡态

$$H_{ph} = \sum_l [v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l - \mathbf{u}_l) - v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)]$$
$$P(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_{\lambda \mathbf{q} \mathbf{G}} |M_{\mathbf{q}\lambda}|^2 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G})$$
$$\times [n_{\mathbf{q}\lambda} \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}'} - \varepsilon_{n\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda})$$
$$+ (n_{\mathbf{q}\lambda} + 1) \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}'} - \varepsilon_{n\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda})]$$

正常过程 $\mathbf{G} = 0$

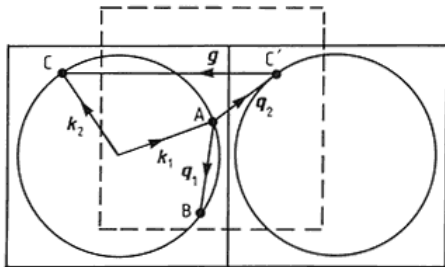
$$\frac{1}{\tau_{ph}} \propto \int n_{\mathbf{q}\lambda} (1 - \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}) \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}$$
$$\propto \int_0^\infty \frac{1}{e^{\hbar v_s q / k_B T} - 1} (1 - \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}) q^2 dq$$
$$\propto \int_0^\infty \frac{1}{e^{\hbar v_s q / k_B T} - 1} \frac{q^2}{k_F^2} q^2 dq \propto \begin{cases} T^5 & T \ll \Theta_D \\ T & T \gg \Theta_D \end{cases}$$

声子散射：U-过程

Umklapp 过程 $\mathbf{G} \neq 0$

$$\mathbf{q}_m = \mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{G}$$

$$\frac{1}{\tau_U} \propto n(\mathbf{q}_m) \propto e^{-\hbar\omega_{\mathbf{q}_m}/k_B T}$$



六、Boltzmann 方程的局限性

- 粒子性占主导，在扩散极限成立： $L \gg l, l_w$
样品尺寸远大于平均自由程和相干长度
 - ☞ 纳米器件里的弹道输运
- 散射之间没有关联
 - 弱局域化
 - ☞ 不同杂质散射形成一个回路
 - Kondo 效应
 - 磁性杂质的高阶散射的相干叠加