

# Optische Untersuchungen an der halbleitenden Mischkristallreihe $\text{In}(\text{As}_y\text{P}_{1-y})^*$

Von F. OSWALD

Aus dem Forschungslaboratorium der Siemens-Schuckertwerke AG., Erlangen  
(Z. Naturforschg. **14 a**, 374–379 [1959]; eingegangen am 4. Februar 1959)

Aus Durchlässigkeits- und Reflexionsmessungen im Spektralbereich von 1 bis  $35\ \mu$  an n-leitenden Proben des Mischkristallsystems  $\text{In}(\text{As}_y\text{P}_{1-y})$  werden die Absorptionskonstanten und Brechungsindizes bestimmt und graphisch dargestellt.

Für den Bandabstand  $\Delta E$  (in eV) ergibt sich eine lineare Abhängigkeit sowohl vom Arsengehalt  $y$  (in Atomanteilen) als auch von der Temperatur  $T$  (in  $^\circ\text{K}$ )

$$\Delta E = 1,42 - 0,98 y - (4,6 - 1,1 y) \cdot 10^{-4} T.$$

Aus der von freien Ladungsträgern hervorgerufenen kontinuierlichen Absorption im mittleren Spektralbereich lassen sich die effektiven Elektronenmassen im Leitungsband abschätzen. Sie fallen monoton von InP über die Mischkristalle zu InAs.

Reststrahlmaxima im langwelligen Bereich der Reflexionsspektrogramme geben die Frequenzlage der Eigenschwingungen des Gitters und ermöglichen eine Aussage über den polaren Anteil der Bindung.

Wie FOLBERTH<sup>1</sup> zeigen konnte, ist das quasi-binäre System Indiumphosphid–Indiumarsenid zur Bildung einer lückenlosen Mischkristallreihe  $\text{In}(\text{As}_y\text{P}_{1-y})$   $0 \leq y \leq 1$  fähig, die im Zinkblendegitter kristallisiert. Über deren elektrische und thermische Eigenschaften wurde ausführlich von WEISS<sup>2</sup> berichtet. Aus den im folgenden mitgeteilten optischen Messungen lassen sich weitere Daten dieses Systems in Abhängigkeit von der Zusammensetzung und der Temperatur ableiten.

## I. Experimentelles

Es wurde die Durchlässigkeit und das Reflexionsvermögen von n-leitenden Proben verschiedener Zusammensetzung und verschiedener Leitfähigkeit im Ultraroten zwischen  $1\ \mu$  und  $35\ \mu$  Wellenlänge gemessen. Dieser Bereich wurde mit einem PERKIN-ELMER Double-Pass Spektrometer Mod. 112 unter Zuhilfenahme dreier Prismen aus Glas, Steinsalz und Cäsiumbromid überstrichen. Die Durchführung der Messungen und die Berechnung der optischen Konstanten sind in einer früheren Arbeit<sup>3</sup> beschrieben.

## II. Die optischen Konstanten

In Abb. 1 ist der Verlauf der Absorptionskonstanten über der Wellenlänge bei wechselnder Zusammensetzung aufgetragen. Es wurden dazu die Pro-

ben kleinster Ladungsträgerkonzentration ausgesucht, so daß die Absorptionswerte denen des reinen, eigenleitenden Materials sehr nahe kommen dürften. Die Dichten und Beweglichkeiten der Ladungsträger\*\* sind in der Unterschrift zu Abb. 1 verzeichnet.

Die nach der BEERSchen Formel berechneten Brechungsindizes (Abb. 2) beschränken sich auf den Bereich normaler Dispersion, da die zur Berechnung des Brechungsindex erforderlichen Werte der Absorptionskonstanten in dem bei  $\lambda \approx 30\ \mu$  beginnenden Bereich anomaler Dispersion fehlen. Die Genauigkeit der aufgetragenen Werte beträgt etwa eine Einheit der ersten Dezimale. Die Kurven lassen eine beträchtliche Dispersion des Brechungsindex erkennen, die von InAs über die Mischkristalle zu InP zunimmt.

## III. Die Breite der verbotenen Zone

Die Abhängigkeit der Lage der Absorptionskante von der Zusammensetzung des Materials ist aus Abb. 1 ersichtlich. Es ergibt sich daraus ein linearer Zusammenhang des Bandabstandes mit dem Arsengehalt der Proben in Atomprozenten.

Messungen der Temperaturabhängigkeit der Lage der Absorptionskante wurden im Temperaturbereich von etwa  $90\ ^\circ\text{K}$  bis  $470\ ^\circ\text{K}$  durchgeführt<sup>4</sup> und sind

\* Teilweise vorgetragen auf der Physikertagung, Essen 1958.

<sup>1</sup> O. G. FOLBERTH, Z. Naturforschg. **10 a**, 502 [1955].

<sup>2</sup> H. WEISS, Z. Naturforschg. **11 a**, 430 [1956]; Ann. Phys., Lpz. (7) **3** [1959], im Erscheinen.

<sup>3</sup> F. OSWALD u. R. SCHADE, Z. Naturforschg. **9 a**, 611 [1954].

\*\* Die elektrischen Daten der untersuchten Proben wurden freundlicherweise von Herrn Dr. H. WEISS zur Verfügung gestellt.

<sup>4</sup> Zur Meßmethode vgl.: F. OSWALD, Z. Naturforschg. **10 a**, 927 [1955].



in Abb. 3 dargestellt. In diesem Temperaturbereich ändert sich die Bandbreite linear mit der Temperatur. Beide Abhängigkeiten zusammengefaßt lassen für das System  $\text{In}(\text{As}_y\text{P}_{1-y})$  den Verlauf des Bandabstandes (der Breite der verbotenen Zone) darstellen durch:

$$\Delta E = 1,42 - 0,98 y - (4,6 - 1,1 y) \cdot 10^{-4} T \text{ (eV)}$$

( $y$  = Arsenanteil in Atomanteilen;  $0 \leq y \leq 1$   
 $100^\circ\text{K} \leq T \leq 500^\circ\text{K}$ ).

Die in Abb. 3 aufgetragenen Geraden verlaufen dieser Formel entsprechend. Die Abweichungen der Werte liegen innerhalb der Fehlergrenzen der Messungen, welche die Lage der Absorptionskante, die Temperatur und den Arsenanteil der Proben umfassen.

#### IV. Die Bestimmung der effektiven Masse der Ladungsträger

Der Spektralbereich zwischen der im nahen Ultrarot liegenden Absorptionskante und den oberhalb von etwa  $15 \mu$  auftretenden Gitterschwingungen ist frei von Absorptionen durch den reinen, eigenleitenden Halbleiter, so daß in diesem Bereich die durch freie Ladungsträger hervorgerufene Absorption auch bei verhältnismäßig kleiner Trägerdichte beobachtet werden kann. Die Messungen zeigen den bekannten Verlauf: Die Absorption wächst mit der Zahl der Träger und nimmt mit der Wellenlänge zu. Unter Zuhilfenahme der Leitfähigkeitswerte konnte die Proportionalität der Absorptionskonstanten zur *Ladungsträgerdichte* an Proben sonst gleicher Zusammensetzung innerhalb der Meßgenauigkeit bestätigt werden. Als Bezugswert wurde dabei die Intensität der Absorption bei  $\lambda = 10 \mu$  gewählt, um einerseits möglichst weit über der „Grundabsorption“<sup>5</sup> zu liegen, die unabhängig von der Ladungsträgerdichte ist und vermutlich von Verunreinigungen und Streuung an Korngrenzen herrührt, und andererseits noch weit genug von den Gitterabsorptionen entfernt zu sein.

Die Zunahme der kontinuierlichen Absorption mit der *Wellenlänge* erfolgt gemäß der DRUDESCHEN Theorie<sup>6</sup> mit  $\lambda^2$ .

$$K_{(\text{n. DRUDE})} = \frac{N e^3}{\pi n c^3 m^{*2} \mu} \lambda^2,$$

$N$  = Trägerdichte,  
 $e$  = Elementarladung (in cgs-Einheiten),  
 $n$  = Brechungsindex,

$c$  = Lichtgeschwindigkeit,  
 $m^*$  = effektive Masse der Träger,  
 $\mu$  = Trägerbeweglichkeit (in cgs-Einheiten).

Eine neuere, auf FRÖHLICH zurückgehende Betrachtung<sup>7</sup>, die die Wechselwirkung der Elektronen mit dem schwingenden Gitter und die Aussendung von Phononen berücksichtigt, führt zu einer Zunahme

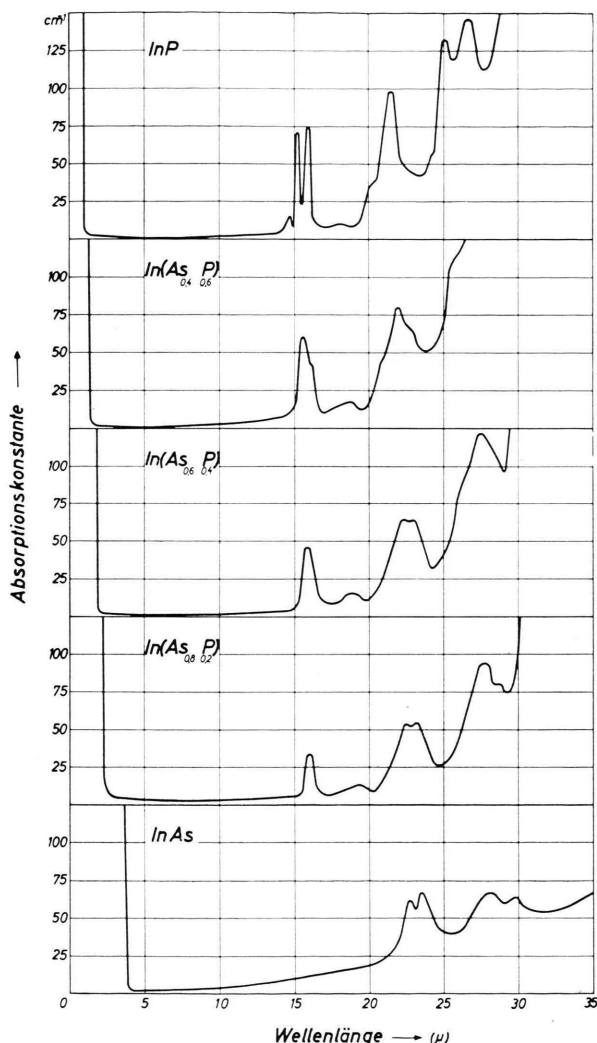


Abb. 1. Verlauf der Absorptionskonstanten von  $\text{In}(\text{As}_y\text{P}_{1-y})$ -Mischkristallen. Proben wie bei Abb. 2.

der Absorptionskonstanten mit  $\lambda^{3/2}$  (Anm.<sup>7</sup> s. S. 376).

$$K_{(\text{n. FRÖHLICH})} = K_{(\text{n. DRUDE})} \cdot \frac{4}{9} \sqrt{\frac{h c}{\pi k T}} \lambda^{-1/2}.$$

<sup>5</sup> R. KESSLER u. D. RICCIUS, Z. Naturforsch. **12a**, 443 [1957].

<sup>6</sup> Vgl. E. GROSCHWITZ u. R. WIESNER, Z. angew. Phys. **8**, 391 [1956].

Substanz	InP	In(As <sub>0,4</sub> P <sub>0,6</sub> )	In(As <sub>0,6</sub> P <sub>0,4</sub> )	In(As <sub>0,8</sub> P <sub>0,2</sub> )	InAs
$\frac{m_n^*}{m_0}$ opt.	0,10	0,08	0,06	0,045	0,02
$\frac{m_n^*}{m_0}$ Literaturwerte	0,02 <sup>8</sup>				0,064 <sup>9</sup> 0,055 <sup>10</sup> 0,020 <sup>11</sup> 0,030 <sup>12</sup>

Tab. 1. Effektive Massen  $m_n^*$  der negativen Ladungsträger von In(As<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub>).  
(Bezogen auf die Elektronenmasse  $m_0$ )

Der doppeltlogarithmische Auftrag der gemessenen, auf die Leitfähigkeit 1 reduzierten Absorptionswerte ergab einen von InAs über die Mischkristallreihe nach InP steiler werdenden Anstieg, der bei InAs mit etwa  $\lambda^{1,85}$  beginnt und bei InP  $\lambda^{2,3}$  erreicht (Abb. 4). Im Mittel werden die Absorptionswerte durch die quadratische Form also besser wiedergegeben.

Um trotzdem keiner der beiden Theorien den Vorrang zu geben, wurden den folgenden Rechnungen die aus Abb. 4 bei  $\lambda = 3,07 \mu$  entnommenen  $K$ -Werte zugrunde gelegt, da für diese Wellenlänge und bei Zimmertemperatur der nach FRÖHLICH einzusetzende Korrekturfaktor gleich 1 wird.

Aus den angegebenen Formeln lassen sich dann durch Einsetzen der elektrisch bestimmten Werte für  $N$  und  $\mu$  und den optisch bestimmten  $K$  und  $n$  die effektiven Massen der Elektronen im Leitungsband berechnen.

Die gefundenen Werte, deren Genauigkeit etwa  $\pm 30\%$  betragen dürfte, bestätigen die von WEISS<sup>2a</sup> ausgesprochene Vermutung, daß die effektiven Elektronenmassen  $m_n^*$  kontinuierlich von InAs zu InP steigen. Tab. 1 gibt zum Vergleich noch die bisher veröffentlichten Werte an. Bei InAs liegen die beiden durch Messung der differentiellen Thermospannungen gewonnenen Werte merklich über den optisch bestimmten. Dem von REYNOLDS u. Mitarb.<sup>8</sup> angegebenen (optischen) Wert für InP liegt die Annahme einer mit  $\lambda^{3/2}$  ansteigenden Absorption zugrunde, was teilweise den sehr niederen Wert erklärt.

## V. Abschätzung des polaren Bindungsanteils

Wie Abb. 1 zeigt, treten im Wellenlängenbereich über  $15 \mu$  selektive Absorptionsbanden auf. Diese können durch Fremdstoffbeimengungen, durch Störstellen oder durch Gitterschwingungen verursacht sein.

Absorptionen durch Verunreinigungen sind daran erkennbar, daß sie von Probe zu Probe ihre Intensität verändern. Soweit bei den untersuchten Proben die selektiven Absorptionen nicht vollständig in der kontinuierlichen Absorption durch die Ladungsträger verschwanden, zeigten sich keine Unterschiede bei den einzelnen Proben, so daß die selektiven Absorptionen als charakteristisch für das reine Material anzusehen sind. Die Entscheidung darüber, ob es sich um Störstellenabsorption oder um Gitterschwingungen handelt, läßt sich aus dem Temperaturverhalten der Absorptionen fällen. Störstellen, die nahe den Bandkanten liegen, sind meist schon bei der Temperatur des flüssigen Stickstoffs dissoziiert, so daß ihre optische Anregung nur bei tiefsten Temperaturen möglich ist. Die Absorption nimmt daher mit steigender Temperatur ab. Die bei den vorliegenden Proben gefundene Temperaturabhängigkeit der langwelligen Absorption zeigt gerade entgegengesetztes Verhalten, sie müssen also Gitterschwingungen zugeschrieben werden.

Die Absorptionen unterhalb  $30 \mu$  sind noch verhältnismäßig schwach. Vermutlich stellen sie Ober- und Kombinationsschwingungen dar. Die eigentliche Grundschiwingung liegt bei InP und den Mischkristallen gerade an der langwelligen Grenze des Spektrometermeßbereiches und wird nur noch in ihrem Anstieg erfaßt. Es ist jedoch zu erkennen, daß die Absorptionskonstante wesentlich größer ist als bei Si und Ge<sup>13</sup>, was auf den teilweise polaren Charakter der Bindung bei den A<sup>III</sup>B<sup>V</sup>-Verbindungen bzw. deren Mischkristallen hinweist. Noch deutlicher

<sup>7</sup> Vgl. H. Y. FAN, Rep. Progr. Phys. **19**, 107 [1956].

<sup>8</sup> W. N. REYNOLDS, M. T. LILBURNE u. R. M. DELL, Proc. Phys. Soc., Lond. **71**, 416 [1958].

<sup>9</sup> H. WEISS, Z. Naturforschg. **11 a**, 131 [1956].

<sup>10</sup> R. P. CHASMAR u. R. STRATTON, Phys. Rev. **102**, 1686 [1956].

<sup>11</sup> R. J. SLADEK, Phys. Rev. **105**, 460 [1957].

<sup>12</sup> W. G. SPITZER u. H. Y. FAN, Phys. Rev. **106**, 882 [1957].

<sup>13</sup> R. J. COLLINS u. H. Y. FAN, Phys. Rev. **93**, 674 [1954].

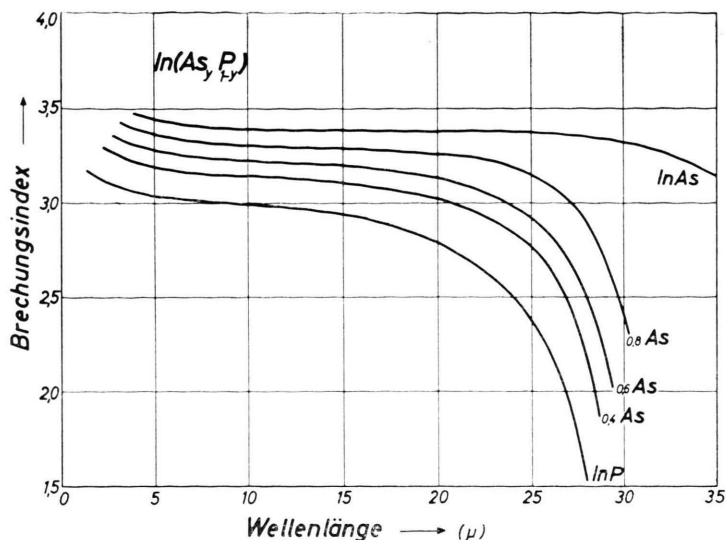


Abb. 2. ↑

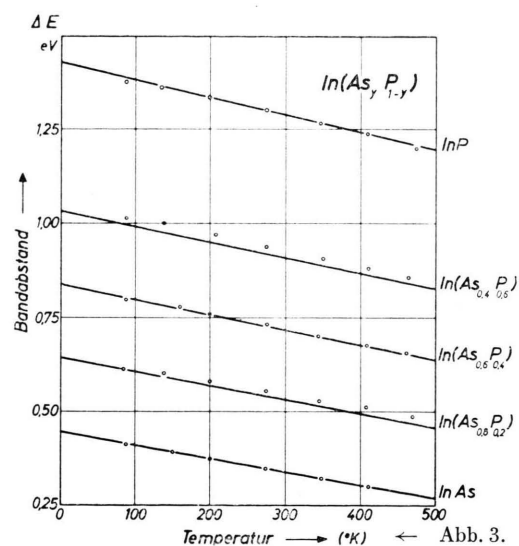


Abb. 3.

Abb. 2. Verlauf des Brechungsindex von  $\text{In}(\text{As}_y \text{P}_{1-y})$ -Mischkristallen.

Proben	InP	$\text{In}(\text{As}_{0.4} \text{P}_{0.6})$	$\text{In}(\text{As}_{0.6} \text{P}_{0.4})$	$\text{In}(\text{As}_{0.8} \text{P}_{0.2})$	InAs
$n$ in $\text{cm}^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{16}$	$4,1 \cdot 10^{16}$	$1,0 \cdot 10^{16}$	$0,7 \cdot 10^{16}$	$3,0 \cdot 10^{16}$
$\mu$ in $\text{cm}^2/\text{Vsec}$	3300	4900	7200	10 000	25 000

Abb. 3. Abhängigkeit des Bandabstandes von der Temperatur und der Zusammensetzung.

$n$ in $\text{cm}^{-3}$	$0,8 \cdot 10^{16}$	$4,1 \cdot 10^{16}$	$1,0 \cdot 10^{16}$	$0,7 \cdot 10^{16}$	$11 \cdot 10^{16}$
$\mu$ in $\text{cm}^2/\text{Vsec}$	3200	4900	7200	10 000	23 000

Abb. 4. Zunahme der kontinuierlichen Absorption mit der Wellenlänge.

Proben	InP	$\text{In}(\text{As}_{0.4} \text{P}_{0.6})$	$\text{In}(\text{As}_{0.6} \text{P}_{0.4})$	$\text{In}(\text{As}_{0.8} \text{P}_{0.2})$	InAs	
Zeichen	●	×	◇	△	▲	○
$n$ in $\text{cm}^{-3}$	$9,2 \cdot 10^{16}$	$4,1 \cdot 10^{16}$	$3,3 \cdot 10^{16}$	$1,6 \cdot 10^{16}$	$17 \cdot 10^{16}$	$3,0 \cdot 10^{16}$
$\mu$ in $\text{cm}^2/\text{Vsec}$	3500	4900	6400	12 000	10 000	25 000

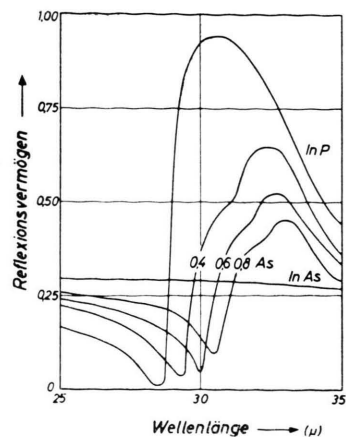


Abb. 5. Reststrahl-Reflexionsmaxima von  $\text{In}(\text{As}_y \text{P}_{1-y})$ -Mischkristallen. Proben wie bei Abb. 2.

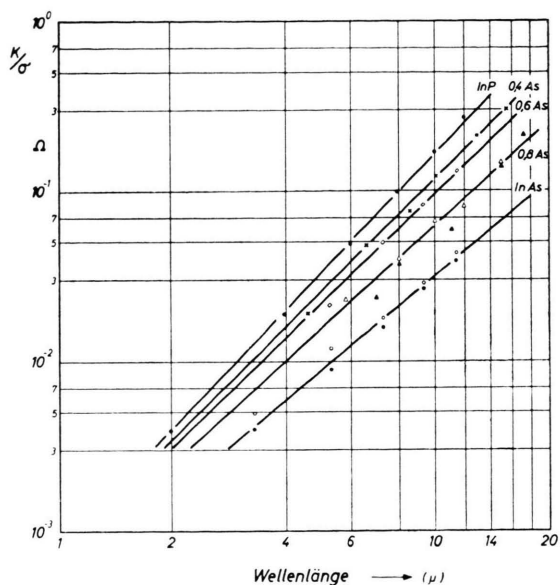


Abb. 4. ↑

Substanz	InP	$\text{In}(\text{As}_{0,4}\text{P}_{0,6})$	$\text{In}(\text{As}_{0,6}\text{P}_{0,4})$	$\text{In}(\text{As}_{0,8}\text{P}_{0,2})$	InAs
$\nu_0$ in Hz	$8,95 \cdot 10^{12}$	$8,83 \cdot 10^{12}$	$8,83 \cdot 10^{12}$	$8,80 \cdot 10^{12}$	
Polarer Anteil $s$	0,69	0,63	0,58	0,57	
$s$ nach PICUS et. al. <sup>16</sup>	0,60				0,56
$E_{\text{ion}}$ $E_{\text{F}}$ nach FOLBERTH <sup>17</sup>	0,20				0,15

Tab. 2. Frequenz der Gitter-Grundschiwing und polarer Anteil der Bindung von  $\text{In}(\text{As}_{1-y}\text{P}_y)$ -Mischkristallen.

kommt dieser polare Charakter im Gang des Reflexionsvermögens zum Ausdruck, das wie bei den Ionenkristallen ein Reflexionsmaximum zeigt (Abb. 5). Diese Reststrahlfrequenz, genauer die langwellige Kante des Reflexionsabfalls, gibt angenähert die Frequenz der Gitter-Eigenschwingung. Aus dieser Resonanzfrequenz sowie dem Unterschied zwischen der statischen Dielektrizitätskonstante und dem Quadrat des Brechungsindex im Ultraroten läßt sich gemäß der von SZIGETI<sup>14</sup> fortgeführten DRUDEschen Theorie eine scheinbare schwingende Ladung jeder InP- bzw. InAs-Bindung berechnen, die – ausgedrückt in Bruchteilen der Elementarladung – als der polare Anteil  $s$  der Bindung aufgefaßt werden kann.

$$s^2 = \left( \frac{3}{n^2 + 2} \right)^2 \frac{\pi(\varepsilon - n^2) \nu_0^2 M_r}{(ze)^2 N},$$

- $s$  = polarer Anteil,  
 $\varepsilon$  = statische Dielektrizitätskonstante,  
 $\nu_0$  = Frequenz der Gitter-Eigenschwingung,  
 $M_r$  = reduzierte Masse des schwingenden Dipols  
 $= m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ ,  
 $z$  = Anzahl der an der Bindung beteiligten Elementarladungen,  
 $e$  = Elementarladung (in cgs-Einheiten),  
 $N$  = Anzahl der Dipole pro  $\text{cm}^3$ .

Die vorliegenden Messungen erlauben nicht, die Differenz  $(\varepsilon - n^2)$  aus dem vor und nach der Resonanzstelle gemessenen Brechungsindex zu bestimmen, da infolge der Durchlässigkeitsgrenze des Spektrometers der Abfall des Reflexionsvermögens nicht genügend weit nach langen Wellen verfolgt werden kann. Der Messung der Dielektrizitätskonstanten in einer Kapazitätsmeßbrücke steht die zu hohe Gleichstromleitfähigkeit der Proben entgegen. Dadurch

übertrifft bei den zur Verfügung stehenden Frequenzen der Wirkstromanteil die kapazitive Blindstromkomponente um mehrere Größenordnungen.

Nach HAAS und KETELAAR<sup>15</sup> besteht noch die Möglichkeit, die statische Dielektrizitätskonstante angenähert aus der Bandbreite der Reflexionsbande zu bestimmen

$$\varepsilon = n_0^2 (\nu_e / \nu_0)^2$$

- $\nu_e$  = hochfrequente Grenze der Reflexionsbande,  
 $\nu_0$  = niederfrequente Grenze der Reflexionsbande (Resonanzfrequenz).

Mit den nach dieser Methode gemessenen  $\varepsilon$ -Werten und den aus den Gitterkonstanten<sup>1</sup> bestimmten Werten der Anzahl der Dipole pro  $\text{cm}^3$  konnte dann nach der von SZIGETI angegebenen Formel der polare Anteil der Bindungen in den Mischkristallen berechnet werden. Die reduzierte Masse  $M_r$  wurde anteilig aus den reduzierten Massen von InP und InAs gemittelt.

Entsprechend der tetraedrischen Anordnung der Atome im Kristallgitter, bei der jeder Gitterbaustein von vier nächsten Nachbarn umgeben ist, wurde die Zahl der an jeder Bindung beteiligten Elementarladungen  $z=1$  gesetzt. Die berechneten Werte  $s$  sind in Tab. 2 aufgeführt.

Zum Vergleich enthält die Tabelle noch Werte des polaren Anteils, wie sie nach der gleichen Methode von PICUS, BURSTEIN und HENVIS<sup>16</sup> an InP und InAs bestimmt wurden. Der Unterschied der beiden für InP angegebenen Werte dürfte auf die Unsicherheit in der Bestimmung der Frequenzen zur Berechnung der statischen Dielektrizitätskonstanten zurückzuführen sein. Weitere Werte stammen von FOLBERTH<sup>17</sup> aus Betrachtungen über den Einfluß der Polarisation

<sup>14</sup> B. SZIGETI, Trans. Faraday Soc. **45**, 155 [1949].

<sup>15</sup> C. HAAS u. J. A. A. KETELAAR, Phys. Rev. **103**, 564 [1956].

<sup>16</sup> G. S. PICUS, E. BURSTEIN u. B. W. HENVIS, Bull. Amer. Phys. Soc. **2**, 66 [1957] und Vortrag auf der „International Conference on Semiconductors“, Rochester 1958.

<sup>17</sup> O. G. FOLBERTH, Z. Naturforschg. **13 a**, 856 [1958].



auf die Halbleitereigenschaften von  $A^{III}B^V$ -Verbindungen.

Den angeführten Werten gemeinsam ist der Abfall des polaren Anteils von InP nach InAs, dem sich auch die Mischkristalle gut einfügen. Weitergehende Vergleiche zwischen  $s$  und  $E_{ion}/E_F$  dürften bei der Verschiedenartigkeit der zur Ermittlung dieser Größen beschrittenen Wege nicht möglich sein.

In all den betrachteten Fällen liegen die Eigenschaften der Mischkristalle in der ihrer Zusammensetzung entsprechenden Reihenfolge zwischen denen der Ausgangssubstanzen.

Den Herren Dr. O. G. FOLBERTH und Dr. R. GREMMELMAIER bin ich für die Überlassung der Präparate zu Dank verpflichtet, Herrn E. CASSEL für die sorgfältige Bearbeitung der optischen Flächen der Meßproben.

## Transporterscheinungen in elastisch anisotropen Metallen\*

VON JOACHIM APPEL

Aus der O s r a m - Studiengesellschaft, Augsburg

(Z. Naturforschg. 14 a, 379—393 [1959]; eingegangen am 30. Januar 1959)

Es werden die elektrischen Transporteigenschaften der Metalle unter Berücksichtigung der Richtungsabhängigkeit und der Dispersion von Phasen- und Gruppengeschwindigkeit der thermischen Gitterwellen untersucht. Der Berechnung der Wechselwirkung von Elektronen und quantisierten Gitterschwingungen wird die Theorie von BLOCH zugrunde gelegt. Jedem Ausbreitungsvektor  $q$  im Wellenvektor-Raum der thermischen Gitterwellen werden gerade so viele longitudinale akustische Phononen zugeordnet wie der Kristall nichtäquivalente ausgezeichnete Richtungen hat ( $n$ ), in denen es reine Longitudinal- und Transversalwellen gibt. Die Übergangswahrscheinlichkeit eines jeden der  $n$  möglichen Stoßprozesse hängt von einem Gewichtungsfaktor ab, der eine Funktion von  $q/|q|$  ist und der der vollen Symmetrie des  $q$ -Raumes Rechnung trägt.

Die sich damit ergebende Blochsche Integralgleichung wird nach KOHLER als Variationsprinzip formuliert. Die Störung der Verteilungsfunktion der Elektronen unter dem Einfluß eines äußeren elektrischen Feldes und eines Temperaturgradienten wird nach harmonischen Funktionen entwickelt, die invariant sind unter allen Symmetrioperationen der betreffenden Kristallpunktgruppe. Diese Funktionen bilden für die Winkelabhängigkeit der Störung im  $k$ -Raum ( $k$ =Ausbreitungsvektor einer Elektronenwelle) ein vollständiges Funktionensystem im Sinne von WEIERSTRASS. Durch die Anwendung der Darstellungstheorie der reinen dreidimensionalen Drehgruppe können die Koeffizienten für die elektrische und thermische Leitfähigkeit sowie für die Thermokraft mit dem RITZschen Verfahren einfach berechnet werden.

Verschiedene Möglichkeiten zur Anwendung, insbesondere auf einige Alkalimetalle, werden diskutiert.

Metalle, die in nichtkubischen Systemen kristallisieren, sind elastisch anisotrop. Die unabhängigen Komponenten des vierstufigen elastischen Tensors, insbesondere deren Anzahl, können mit den Methoden der Gruppentheorie für ein beliebiges Kristallsystem einfach ermittelt werden<sup>1</sup>. Das elastische Verhalten von Metallen, die in kubischen Systemen kristallisieren, wird im allgemeinen durch drei unabhängige elastische Konstante  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  und  $c_{44}$  beschrieben<sup>2</sup>. Gilt die CAUCHY-Relation

$$2c_{44} = c_{11} - c_{12}, \quad (1)$$

so gibt es nur zwei unabhängige elastische Konstanten, der Kristall verhält sich elastisch isotrop.

Kennt man die elastischen Konstanten eines Kristalls, so liefert die phänomenologische Theorie der Elastizität folgende allgemeine Ergebnisse für elastische Wellen mit der Wellenlänge  $\lambda \gg a$  ( $a$ =kleinste Gitterkonstante):

a) Die ausgezeichneten Richtungen im  $q$ -Raum (= 1. BRILLOUIN-Zone im reziproken Gitter), in denen die ebenen elastischen Wellen mit dem reduzierten Wellenvektor  $q$  longitudinal oder transversal polarisiert sind<sup>3</sup>.

b) Die Schallgeschwindigkeiten  $u_l$ ,  $u_{t1}$  und  $u_{t2}$  der longitudinalen bzw. transversalen polarisierten Wellen für die ausgezeichneten Richtungen. Die Schallgeschwindigkeiten sind in erster Näherung un-

\* Vorgetragen im Tieftemperatur-Ausschuß auf der Deutschen Physikertagung in Essen, Oktober 1958.

<sup>1</sup> K. MÜLLER, Abhandl. d. Braunschweiger Wiss. Ges. 9, 115 [1957]. — H. J. JURETSCHKE, Notes for Physics 8493, Polytechn. Institute of Brooklyn, März 1951; l. c.<sup>2</sup>, S. 585. —

W. VOIGT, Lehrbuch d. Kristallphysik, Teubner, Leipzig 1910, S. 569 ff.

<sup>2</sup> G. LEIBFRIED, Handb. d. Physik VII/1, Berlin 1955, S. 180.

<sup>3</sup> F. BORGNIS, Phys. Rev. 98, 1000 [1956].