

Dabei ist  $\alpha = n \cdot \sigma_t$ ;  $\sigma_t$  ist der totale Wirkungsquerschnitt des Filtermaterials bei  $E = E'$  und  $n$  seine Atomdichte pro Flächeneinheit. Wählt man  $\alpha = 1$ , so stimmen (2) und (3) in ihren ersten und zweiten Momenten überein<sup>11</sup> und bei Vernachlässigung der höheren Momente wird

$$\xi = 2(1 - e^S). \quad (4)$$

Die Ergebnisse zeigt Abb. 3. Der steile Anstieg führt daher, daß die Einfallsenergie bei 0,06 eV

gerade die Anregungsschwelle der Torsionsschwingungen überschreitet. Die Diskrepanz zwischen Theorie und Experimenten folgt wahrscheinlich aus der Annahme einer einzigen Frequenz für die Torsionsschwingungen. Eine ausführlichere Beschreibung und Diskussion der Messungen, sowie einige weitere Ergebnisse werden später veröffentlicht<sup>12</sup>.

Herrn Professor H. MAIER-LEIBNITZ danken wir für die Anregung und Förderung dieser Arbeit.

<sup>12</sup> Anm. b. d. Korr.: Die von McREYNOLDS und WHITMORE (Symposium on Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, Vienna, October 1960) angegebenen

Werte für  $\cos \vartheta$ , die nach NELKIN<sup>2</sup> berechnet wurden, stimmen mit unseren sowie mit den dort angegebenen Messungen gut überein.

## Zum Variationsverfahren für die Transportgrößen in Elektronenleitern

Von RUDOLF KLEIN

Aus dem Institut für theoretische Physik der Technischen Hochschule Braunschweig

(Z. Naturforsch. 16 a, 116—121 [1961]; eingegangen am 12. September 1960)

Die statistische Fundamentalgleichung für Transportvorgänge wird nach KOHLER durch ein Variationsprinzip ersetzt. Die Variationsfunktionen werden in dieser Arbeit nicht wie bisher nach Potenzen der Energie, sondern nach einem System von Polynomen der Energie entwickelt. Diese Polynome werden dem Stoßoperator in der Weise angepaßt, daß sie ein vollständiges Orthogonalsystem bilden. Dadurch wird gegenüber der bisher benutzten Methode eine bedeutende Rechenvereinfachung und eine größere Übersichtlichkeit bei der praktischen Durchführung des Variationsverfahrens erreicht. Die Transportgrößen werden hier durch Summen dargestellt. Ein weiterer Vorteil dieses Verfahrens besteht darin, daß die Entwicklungskoeffizienten vorangegangener Näherungen sich im Zuge weiterer Rechnungen nicht mehr ändern.

Bei der Berechnung der makroskopischen Transportgrößen, wie elektrischer und thermischer Leitfähigkeiten und Thermokraft in Festkörpern, ist neben der Erfassung der mikroskopischen Prozesse (Elektron – Phonon-Wechselwirkung etc.) die Lösung der statistischen Fundamentalgleichung oder BOLTZMANN-Gleichung das Hauptproblem. Diese Integralgleichung für die Verteilungsfunktion der Elektronen kann in gewissen Spezialfällen gelöst werden, aber alle erhaltenen Lösungen haben nur begrenzte Gültigkeit. Eine zugkräftigere Methode zur Lösung besteht darin, daß die BOLTZMANN-Gleichung in ein Variationsproblem umgeschrieben wird<sup>1-3</sup>. Diese Lösungsmethode ergibt sich, wenn man die Bedingung für einen stationären Zustand der Elektronenverteilung als ein Variationsproblem formuliert, wovon KOHLER zeigte, daß es sich dabei um einen Spezialfall des allgemeinen Theorems maximaler Entropie-Vermehrung in der Thermodynamik irreversibler Prozesse handelt. Die Lösung der BOLTZMANN-Gleichung auf diese Art ist damit mehr als ein mathematisches Verfahren, sondern auch ein physikalisches Prinzip.

Während gewöhnlich die BOLTZMANN-Gleichung gelöst wird, um die Elektronenverteilungsfunktion zu erhalten, woraus man dann die Ströme berechnen kann und dann erst die Transportgrößen, kann man mit Hilfe des Variationsprinzips diese Größen einfacher erhalten. Man schreibt die BOLTZMANN-Gleichung in der Operatorform

$$\mathcal{L}(F) = G,$$

wo  $\mathcal{L}$  der Integraloperator der Änderung der Verteilungsfunktion durch Stöße ist und  $G$  den Einfluß äußerer Felder und Temperaturgradienten beschreibt. Dann ist diese Gleichung durch ein Variationsprinzip

<sup>1</sup> M. KOHLER, Z. Phys. 124, 772 [1948].

<sup>2</sup> M. KOHLER, Z. Phys. 125, 679 [1949].

<sup>3</sup> E. H. SONDHEIMER, Proc. Roy. Soc., Lond. A 203, 75 [1950].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

zip zu ersetzen, bei dem die Variationsfunktion das innere Produkt

$$(F, F) = \int F \mathcal{Q}(F) d\mathbf{f}$$

ist unter der Nebenbedingung

$$\int F G d\mathbf{f} = \int F \mathcal{Q}(F) d\mathbf{f}.$$

Gewöhnlich macht man für  $F$  den Ansatz

$$F_n = \sum_s^n a_r^{(n)} \eta^r; \quad \eta = \frac{E - \zeta}{k T},$$

wo  $\zeta$  das GIBBSSche Potential ist. Variation nach den Koeffizienten  $a_r$  ergibt dann ein System linearer Gleichungen für die  $a_r$

$$\sum_s d_{rs} a_r = \alpha_r,$$

wobei die  $d_{rs}$  und  $\alpha_r$  aus  $\mathcal{Q}$  und  $G$  berechnet werden können. Die Transportgrößen lassen sich dann durch komplizierte Determinanten aus den  $d_{rs}$  und  $\alpha_r$  bilden.

Hier soll statt dessen ein Verfahren Anwendung finden, dessen mathematische Begründung auf ENSKOG<sup>4</sup> zurückgeht. Für die Variationsfunktionen wird der Ansatz gemacht

$$F = \sum a_r h_r(\eta),$$

wobei die  $h_r(\eta)$  ein Orthogonalsystem derart bilden sollen, daß  $d_{rs} = \delta_{rs}$  wird, d. h. daß das Gleichungssystem für die  $a_r$  sofort lösbar ist.

Durch diesen Ansatz erhält man weiterhin die Transportgrößen in formal einfacher Form, was den Gang des Variationsprinzips in einem konkreten Beispiel übersichtlicher gestaltet. Elektrische und thermische Leitfähigkeiten und Thermokraft sind darstellbar durch Summen von Integralen. Ein weiterer Vorteil liegt in der Endgültigkeit der Koeffizienten  $a_r$ , die in den bisherigen Ansätzen von der Zahl  $n$  der benutzten Glieder in der Reihenentwicklung abhingen.

## 1. Das Variationsprinzip

Zur Beschreibung der Verteilung der Elektronen im Metall führt man

$$\frac{1}{4 \pi^3} f(\mathbf{f}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{f} d\mathbf{r} \quad (1)$$

ein als die Anzahl der Elektronen, die sich im Raumelement  $d\mathbf{r}$  und im Element  $d\mathbf{f}$  des  $\mathbf{f}$ -Raums (Raum

der Wellenvektoren) zur Zeit  $t$  befinden. Im Gleichgewichtszustand ist dies die FERMI-Funktion

$$f_0 = \frac{1}{\exp\{(E - \zeta)/k T\} + 1}, \quad (2)$$

in der  $\zeta$  das GIBBSSche Potential bei Abwesenheit sämtlicher äußerer Felder definiert ist.

Da man bei Leitungsproblemen vor allem an sehr kleinen Abweichungen vom Gleichgewichtszustand interessiert ist, macht man für die allgemeine Verteilungsfunktion den Ansatz

$$f = f_0 - \Phi(\mathbf{f}) d\mathbf{f}_0/dE. \quad (3)$$

Dann ergibt sich in bekannter Weise für die unbekannte Funktion  $\Phi(\mathbf{f})$  die sog. statistische Fundamentalgleichung oder BOLTZMANN-Gleichung<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{e}{\hbar} \left\{ \mathfrak{F} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathfrak{E} \right\} \cdot \text{grad}_{\mathbf{f}} f + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{\mathbf{r}} f \\ = \int V(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \{ \Phi(\mathbf{f}') - \Phi(\mathbf{f}) \} d\mathbf{f}'; \end{aligned} \quad (4)$$

$$V(\mathbf{f}, \mathbf{f}') = \frac{N \Omega}{8 \pi^3 k T} P(\mathbf{f}, \mathbf{f}') f_0 (1 - f_0'); \quad f_0' \equiv f_0(\mathbf{f}').$$

Dabei ist  $P(\mathbf{f}, \mathbf{f}') dt$  die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron des Zustands  $\mathbf{f}$  zur Zeit  $dt$  später im Zustand  $\mathbf{f}'$  anzutreffen. Weiter ist wegen der Existenz des „detaillierten Gleichgewichts“

$$V(\mathbf{f}', \mathbf{f}) = V(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \quad (5)$$

benutzt worden.  $N$  ist die Anzahl von Atomen im betrachteten Teil des Metalls und  $\Omega$  das Atomvolumen.

Im folgenden wird allein der magnetfeldfreie Fall betrachtet. Die Felder und Temperaturgradienten sollen in einem geeignet gewählten Koordinatensystem nur eine  $z$ -Richtung besitzen. Mit dem äußeren Feld  $\mathfrak{F}_z = F$  gilt für das GIBBSSche Potential

$$d\mu/dz = -e F + d\zeta/dz. \quad (6)$$

Da das elektrische Feld und der Temperaturgradient als klein angesehen werden können gegenüber den Werten des Gitterpotentials, behandelt man die BOLTZMANN-Gleichung weiter, indem man auf der linken Seite  $f = f_0$  setzt. Unter Voraussetzung kugelförmiger Energieflächen und mit

$$\frac{df_0}{dz} = \frac{df_0}{dT} \frac{dT}{dz} = \frac{dT}{dz} \left\{ -\frac{E}{T} \frac{df_0}{dE} + \left( \frac{\zeta}{T} - \frac{d\zeta}{dT} \right) \frac{df_0}{dE} \right\}$$

erhält man schließlich die BLOCHSche Integralgleichung

$$\frac{\hbar}{m} k_z \frac{df_0}{dE} \left\{ \frac{d\mu}{dz} - T(E - \zeta) \frac{d}{dz} \frac{1}{T} \right\} = \mathcal{Q}[\Phi(\mathbf{f})], \quad (7)$$

<sup>5</sup> H. JONES, Handbuch der Physik, Bd. 19, S. 227 [1956].

<sup>4</sup> D. ENSKOG, Acta Math. 54, 177 [1930].

wobei  $\mathfrak{L}$  der Integraloperator

$$\mathfrak{L}[\Phi(f)] = \int V(f, f') \{ \Phi(f) - \Phi(f') \} df' \quad (8)$$

ist.

Mit dem Ansatz

$$\Phi = \frac{\hbar}{m} \left\{ -\frac{d\mu}{dz} \varphi_1 + T \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{T} \right) \varphi_2 \right\} \quad (9)$$

spaltet man die Integralgleichung in zwei unabhängige Gleichungen auf und erhält

$$-k_z df_0/dE = \mathfrak{L}(\varphi_1); \quad (10)$$

$$-k_z(E - \zeta) df_0/dE = \mathfrak{L}(\varphi_2). \quad (11)$$

Teilchen- und Wärmestrom sind definiert durch

$$J_z = \frac{1}{4\pi^3} \int v_z f_1 df = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \int \frac{\partial E}{\partial k_z} f_1 df;$$

$$W_z = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \int \frac{\partial E}{\partial k_z} (E - \zeta) f_1 df.$$

Mit dem Ansatz (9) ist

$$-J_z = \frac{L_{11}}{T} \frac{d\mu}{dz} + L_{12} \frac{d}{dz} \frac{1}{T}, \quad (12)$$

$$W_z = \frac{L_{21}}{T} \frac{d\mu}{dz} + L_{22} \frac{d}{dz} \frac{1}{T}, \quad (13)$$

wobei

$$L_{11} = -\frac{T\hbar^2}{4\pi^3 m^2} \int k_z \varphi_1 \frac{df_0}{dE} df, \quad (14)$$

$$L_{12} = \frac{T\hbar^2}{4\pi^3 m^2} \int k_z \varphi_2 \frac{df_0}{dE} df, \quad (15)$$

$$L_{21} = \frac{T\hbar^2}{4\pi^3 m^2} \int k_z(E - \zeta) \varphi_1 \frac{df_0}{dE} df,$$

$$L_{22} = -\frac{T\hbar^2}{4\pi^3 m^2} \int k_z(E - \zeta) \varphi_2 \frac{df_0}{dE} df. \quad (16)$$

Nun kann man die isotherme elektrische Leitfähigkeit, die thermische Leitfähigkeit und die Thermokraft durch die kinetischen Koeffizienten  $L_{ik}$  ausdrücken.

Es ergibt sich die elektrische Leitfähigkeit aus

$$\sigma = \frac{e^2}{T} L_{11}, \quad (17)$$

die thermische Leitfähigkeit

$$\kappa = \frac{1}{T^2} \left( L_{22} - \frac{L_{12}^2}{L_{11}} \right) \quad (18)$$

und die Thermokraft aus

$$S = -\frac{1}{eT} \frac{L_{12}}{L_{11}}. \quad (19)$$

Dabei ist bei der Herleitung des Ausdrucks für die Wärmeleitfähigkeit aus den Strömen von der ONSEGER-Beziehung  $L_{12} = L_{21}$  Gebrauch gemacht worden.

Aus Gln. (5) und (8) folgt sofort

$$\begin{aligned} (\varphi_1, \varphi_2) &\equiv \int \varphi_1 \mathfrak{L}(\varphi_2) df = \int \varphi_2 \mathfrak{L}(\varphi_1) df \\ &\equiv (\varphi_2, \varphi_1). \end{aligned} \quad (20)$$

Multipliziert man die beiden aus der BLOCHSchen Integralgleichung erhaltenen Integralgleichungen geeignet, d. h. (10) mit  $\varphi_2$  und (11) mit  $\varphi_1$ , so ergibt Integration über  $df$

$$\begin{aligned} - \int k_z \varphi_2 \frac{df_0}{dE} df &= (\varphi_2, \varphi_1), \\ - \int k_z(E - \zeta) \varphi_1 \frac{df_0}{dE} df &= (\varphi_1, \varphi_2). \end{aligned}$$

Die linken Seiten dieser Gleichungen sind aber nach (15) bis auf eine Konstante gerade  $L_{12}$  und  $L_{21}$ .

Um die Integralgleichungen (10) und (11) zu lösen, benutzt man ein zuerst von KOHLER<sup>1, 2</sup> eingeführtes Variationsprinzip. Im Hinblick auf (10) besagt das Verfahren, daß von allen Funktionen der Menge, die

$$\int \psi \left( \mathfrak{L}(\psi) + k_z \frac{df_0}{dE} \right) df = 0 \quad (21)$$

erfüllen, diejenige, die  $(\psi, \psi)$  zu einem Maximum macht, die Lösung von (10) ist.

Um das Prinzip anzuwenden, machen wir für die Variationsfunktionen folgenden Ansatz

$$\psi_1 = k_z \sum_{r=0}^n a_r h_r(\eta). \quad (22)$$

Dabei sind die  $h_r$  vorläufig noch unbestimmte Polynome in

$$\eta = (E - \zeta)/kT \quad (23)$$

vom Grad  $r$ :  $h_r(\eta) = \sum_{s=0}^r c_s^{(r)} \eta^s$ . (24)

Die Koeffizienten  $c_s^{(r)}$  werden gleich geeignet gewählt. Die  $n+1$  Koeffizienten  $a_r$  sind die Parameter des Variationsproblems.

Setzt man (22) in (21) ein, erhält man

$$\sum_{r,s=0}^n a_r a_s d_{rs} = \sum_{r=0}^n a_r \alpha_r \quad (25)$$

mit den Abkürzungen

$$\alpha_r = - \int k_z^2 h_r(\eta) \frac{df_0}{dE} df, \quad (26)$$

$$d_{rs} = \int k_z h_r \mathfrak{L}(k_z h_s) df. \quad (27)$$

Nun seien die Polynome von der Art, daß sie gemäß (27) orthogonal sind, d. h. die Koeffizienten  $c_s^{(r)}$  in Gl. (24) sollen so beschaffen sein, daß

$$d_{rs} = \delta_{rs}. \quad (28)$$

Dann lautet die Nebenbedingung (21)

$$\sum_{r=0}^n \alpha_r^2 = \sum_{r=0}^n \alpha_r \alpha_r. \quad (29)$$

Jetzt sind die Parameter  $\alpha_r$  zu finden, die  $\Sigma \alpha_r^2$  zum Extremum machen. Dazu bildet man

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha_r} y(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) &= \frac{\partial}{\partial \alpha_r} \left\{ \sum_{r=0}^n \alpha_r^2 + \lambda \sum_{r=0}^n \alpha_r \alpha_r \right\} \\ &= 2 \alpha_r + \lambda \alpha_r = 0. \end{aligned}$$

Multiplikation mit  $\alpha_r$  und Summation über  $r$  ergibt

$$2 \sum \alpha_r^2 + \lambda \sum \alpha_r \alpha_r = 0. \quad (30)$$

Vergleich mit (29) liefert  $\lambda = -2$ , also ist

$$\alpha_r = \alpha_r. \quad (31)$$

Zur Lösung der Integralgleichung (11) verfährt man analog:

$$\psi_2 = k_z \sum_{r=0}^n b_r h_r(\eta). \quad (32)$$

Definiert man

$$\beta_r = - \int k_z^2 h_r(\eta) (E - \zeta) \frac{df_0}{dE} d\mathbf{f}, \quad (33)$$

so folgt wie oben  $\beta_r = b_r$ . (34)

## 2. Die Transportgrößen

Die Gln. (17), (18), (19) stellen die Transportgrößen als Funktionen der kinetischen Koeffizienten dar. Letztere sind aber sofort durch die Integrale  $\alpha_r, \beta_r$  darstellbar:

$$\begin{aligned} L_{11} &= \frac{T \hbar^2}{4 \pi^3 m^2} \sum_{r=0}^n \alpha_r^2, \\ L_{12} = L_{21} &= \frac{T \hbar^2}{4 \pi^3 m^2} \sum_{r=0}^n \alpha_r \beta_r, \\ L_{22} &= \frac{T \hbar^2}{4 \pi^3 m^2} \sum_{r=0}^n \beta_r^2. \end{aligned}$$

Damit sind die  $n$ -ten Näherungen der Transportgrößen

$$\sigma^{(n)} = \frac{\hbar^2 e^2}{4 \pi^3 m^2} \sum_{r=0}^n \alpha_r^2, \quad (35)$$

$$\chi^{(n)} = \frac{\hbar^2}{4 \pi^3 m^2 T} \left\{ \sum_{r=0}^n \beta_r^2 - \frac{\left( \sum_{r=0}^n \alpha_r \beta_r \right)^2}{\sum_{r=0}^n \alpha_r^2} \right\}, \quad (36)$$

$$S^{(n)} = \frac{1}{e T} \frac{\sum_{r=0}^n \alpha_r \beta_r}{\sum_{r=0}^n \alpha_r^2}. \quad (37)$$

Damit sind die Leitfähigkeiten und die Thermokraft in formal einfacher Form hergeleitet. Die Integrale  $\alpha_r, \beta_r$  enthalten als Unbekannte, die ihre Auswertung noch verhindern, lediglich die Koeffizienten  $c_s^{(r)}$  in den angesetzten Entwicklungen für die Polynome  $h_r$ . Man könnte also die Transportgrößen direkt auf diese erst durch ein Wechselwirkungsmodell zu berechnenden Größen zurückführen.

## 3. Anwendung auf den Fall tiefer Temperaturen

Um das Variationsprinzip in der obigen Form auf einen einfachen Fall anzuwenden, legt man ein Elektron – Phonon-Wechselwirkungsmodell zu grunde. Man berechnet die Übergangswahrscheinlichkeiten  $P(f, f')$ , die den Stoßmechanismus festlegen und damit den Operator  $\mathfrak{L}$  bestimmen. Dann kann man mit Hilfe der Orthogonalisierungsbedingung (28) die Koeffizienten in den Polynomen  $h_r(\eta)$  berechnen und dann die Integrale  $\alpha_r, \beta_r$  auswerten, um die Transportgrößen zu erhalten.

Als Modell wird hier eine Methode der Berechnung der Streuung von Elektronen durch thermische Bewegung des Gitters zugrunde gelegt, die für sehr tiefe Temperaturen, wo nur langwellige Gitterwellen angeregt sind, zufriedenstellend ist.

a) Das Deformationspotential: Diese Methode zur Berechnung der Elektronenstreuung wurde zur Bestimmung der Beweglichkeit in Halbleitern von BARDEEN und SHOCKLEY<sup>6</sup> eingeführt. Benutzt und weiter ausgebaut wurde dieses Modell von HUNTER und NABARRO<sup>7</sup> zum Studium der Fortpflanzung von Elektronen in einem verzerrten metallischen Medium mit Hilfe einer Störungsrechnung, in der das Störpotential zur elastischen Verzerrung und nicht zu den Verschiebungen proportional ist. Für langsam sich verändernde Verzerrungen wird das Störpotential ein Deformationspotential nach BARDEEN und SHOCKLEY. JONES<sup>5</sup> berechnete damit die Transportgrößen in Metallen bei tiefen Temperaturen. Die dort erhaltenen Ergebnisse werden hier in der nullten Näherung erhalten.

<sup>6</sup> J. BARDEEN u. W. SHOCKLEY, Phys. Rev. **80**, 72 [1950].

<sup>7</sup> S. C. HUNTER u. F. R. N. NABARRO, Proc. Roy. Soc., Lond. A **220**, 542 [1953].

Versteht man unter  $\Theta(r)$  die Volumendilatation im Punkte  $r$ , so ergibt sich das Streupotential<sup>5,6</sup>

$$U(r) = \frac{2}{3} \zeta \Theta(r). \quad (38)$$

Für die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten  $P(f, f')$  benötigt man die Matrixelemente von  $U(r)$  entsprechend den stationären Zuständen der Elektronen und denen der Gitterwellen. Aus ihnen berechnet man mit Hilfe der DIRACschen Störungstheorie die Übergangswahrscheinlichkeiten. Unter der Annahme thermischen Gleichgewichts der Gitterwellen erhält man in gewohnter Weise<sup>5</sup>

$$P(f, f') dE_f = \frac{\pi}{\hbar c_1^2 \varrho N \Omega} \left( \frac{2}{3} \zeta \right)^2 k T x \cdot \left\{ \frac{\delta(\eta' - \eta - x)}{e^x - 1} + \frac{\delta(\eta' - \eta + x)}{1 - e^{-x}} \right\} d\eta', \quad x = \frac{\hbar \omega_q}{k T}.$$

Darin ist  $\varrho$  die Dichte des Festkörpers,  $c_1$  die Geschwindigkeit der longitudinalen Wellen langer Wellenlänge und  $c_1 \cdot q = \omega_q$  die Kreisfrequenz der Wellen, wobei  $q$  der Betrag des Gitterwellenvektors  $q$  ist.

Um die in den Transportgrößen auftretenden Integrale  $\alpha_r, \beta_r$  berechnen zu können, müssen die im Variationsansatz enthaltenen Polynome  $h_r(\eta)$  bekannt sein, d. h. es sind gemäß der Orthogonalisierungsbedingung (28) nach Gl. (27) die Koeffizienten  $c_s^{(r)}$  der Potenzen  $\eta^s$  in den Polynomen  $h_r(\eta)$  zu berechnen. Dies ist jetzt möglich, weil die  $P(f, f')$  bekannt sind, die maßgebend den Stoßoperator  $\mathfrak{L}$  bestimmen. Die Integrale sind alle vom Typ

$$A_{rs} = \int k_z \eta^r \mathfrak{L}(k_z \eta^s) df. \quad (39)$$

Mit Gl. (8) ist

$$A_{rs} = \frac{N \Omega}{8 \pi^3 k T} \int k_z \eta^r df \int P(f, f') f_0(1 - f_0') \cdot [k_z \eta^s - k_z' \eta'^s] df'.$$

Diese Integrale werden mit einem in der Metalltheorie üblichen Verfahren gelöst<sup>8</sup>, indem sie auf

$$J_p \left( \frac{\Theta}{T} \right) = \int_0^{\Theta/T} \frac{x^p dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})};$$

$$\Theta = \frac{\hbar \omega_{\max}}{k} = \frac{\hbar c_1}{k} \left( \frac{6 \pi^2}{\Omega} \right)^{1/3}$$

zurückgeführt werden.

Es ergibt sich<sup>5</sup>

$$A_{00} = \gamma^2 B J_5; \quad A_{01} = \frac{1}{2} \alpha B J_5; \quad A_{11} = B J_5, \quad (40)$$

<sup>8</sup> H. A. BETHE u. A. SOMMERFELD, Handbuch der Physik, Bd. 24/2, 333 [1933].

wobei  $\alpha = k T / \zeta$  der Entartungsparameter ist, sowie

$$\gamma^2 = \frac{(k T)^2}{2 m c_1^2 \zeta} = \left( \sqrt[3]{\frac{2}{3}} \frac{T}{\Theta} \right)^2$$

bedeutet und  $B = \frac{\pi^4 n^2 k^3 T^3}{3 \hbar^3 c_1^4 \varrho}$ .

b) Durchführung der Normierung und Bestimmung der  $\alpha_r, \beta_r$ : Beim Einsetzen der Polynome  $h_r(\eta)$  in (26) entstehen Integrale vom Typ

$$H_r = - \int k_z^2 \eta^r \frac{df_0}{dE} \Phi df$$

oder als Integrale über  $\eta$ :

$$H_r = - \frac{16 \pi}{3} \frac{m^3}{\hbar^6} \left( \frac{\hbar^2}{2 m} \right)^{1/2} \int (k T \eta + \zeta)^{1/2} \eta^r \frac{df_0}{d\eta} d\eta.$$

Entwickelt man die Klammer im Integranden nach dem binomischen Satz, benutzt

$$\frac{df_0}{d\eta} = - [ (e^\eta + 1) (1 + e^{-\eta}) ]^{-1}$$

und ersetzt  $\zeta$  durch die Anzahl  $n$  von Elektronen pro Volumeneinheit gemäß

$$\zeta^{1/2} = \left( \frac{\hbar^2}{2 m} \right)^{3/2} 3 \pi^2 n,$$

erhält man

$$H_r = a \{ I_r + \frac{3}{2} I_{r+1} + \frac{3}{8} \alpha^2 I_{r+2} + \dots \};$$

$$a = \frac{4 \pi^3 m n}{\hbar^2},$$

$$\text{wobei die } I_r = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta^r d\eta}{(1 + e^\eta)(1 + e^{-\eta})}$$

bekannte Integrale sind<sup>8</sup>, nämlich

$$I_0 = 1; \quad I_2 = \frac{\pi^2}{3}; \quad I_4 = \frac{7 \pi^4}{15}; \quad I_6 = \frac{31 \pi^6}{21}.$$

Ähnlich behandelt man die Integrale  $\beta_r$ ; es entsteht

$$H_r' = - \int k_z^2 \eta^r (E - \zeta) \frac{df_0}{dE} df = k T H_{r+1}.$$

Vernachlässigt man Glieder, die höhere als die erste Potenz des Entartungsparameters  $\alpha$  enthalten, so erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= c_0^{(0)} a; \quad \alpha_1 = c_0^{(1)} a + c_1^{(1)} a \frac{\alpha}{2} \pi^2; \\ \alpha_2 &= c_0^{(2)} a + c_1^{(2)} a \frac{\alpha}{2} \pi^2 + c_2^{(2)} a \frac{\pi^2}{3}; \\ \beta_0 &= k T c_0^{(0)} a \frac{\alpha}{2} \pi^2; \\ \beta_1 &= k T \left[ c_0^{(1)} a \frac{\alpha}{2} \pi^2 + c_1^{(1)} a \frac{\pi^2}{3} \right]. \end{aligned} \quad (41)$$

Jetzt kann man orthogonalisieren und die Koeffizienten  $c_s^{(r)}$  bestimmen. Man geht aus von  $h_0 = c_0^{(0)}$ . Die Konstante wird berechnet nach

$$\int k_z c_0^{(0)} \mathcal{L}(k_z c_0^{(0)}) dk = 1.$$

Das ist aber wegen (39), (40)

$$c_0^{(0)2} \cdot B J_5 \gamma^2 = 1. \quad (42)$$

Das folgende Polynom ist  $h_1 = c_0^{(1)} + c_1^{(1)} \eta$ . Die beiden Konstanten werden bestimmt aus der Normierung für  $h_1$ :

$$c_0^{(1)2} A_{00} + 2 c_0^{(1)} c_1^{(1)} A_{01} + c_1^{(1)2} A_{11} = 1$$

und der Orthogonalität zu  $h_0$ :

$$c_0^{(1)} c_0^{(0)} A_{00} + c_1^{(1)} c_0^{(0)} A_{01} = 0.$$

Mit Hilfe von (40) ist dann

$$c_1^{(1)2} = \frac{1}{B J_5 \left( 1 - \frac{\alpha^2}{4 \gamma^2} \right)} \approx \frac{1}{B J_5}; \quad (43)$$

$$c_0^{(1)2} = \frac{1}{B J_5 \left( \frac{4 \gamma^4}{\alpha^2} - \gamma^2 \right)} \approx \frac{\alpha^2}{4 \gamma^4 B J_5}. \quad (44)$$

c) Die Transportgrößen: Nach Gl. (35) erhält man für die elektrische Leitfähigkeit in erster Nähe-

rung:

$$\sigma^{(1)} = \frac{\hbar^2 e^2}{4 \pi^3 m^2} (\alpha_0^2 + \alpha_1^2),$$

oder mit Hilfe von (41), (42) bis zu Größenordnungen von  $10^{-4}$

$$\sigma^{(1)} = \sigma^{(0)} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2/4 \gamma^2}{1 + \alpha^2/4 \gamma^2} \right\}.$$

$$\text{Dabei ist } \sigma^{(0)} = \frac{12 \sqrt[3]{9 \pi e^2 n^{2/3} \hbar^3 c l^6 \varrho}}{(k T)^5 J_5}.$$

Ebenso erhält man

$$\kappa^{(1)} = \kappa_0 \frac{1 - 3 \pi^2 \alpha^2/2}{1 + \alpha^2/4 \gamma^2}; \quad \kappa_0 = \frac{4 \pi^3 \hbar c l^4 \varrho}{3 k T^2 J_5}$$

und

$$S^{(1)} = S^{(0)} \frac{1 + \pi^2 \gamma^2/4 + 3 \alpha^2/16 \gamma^2}{1 + \alpha^2/4 \gamma^2}; \quad S^{(0)} = \frac{\pi^2 k^2}{2 e \zeta} T.$$

Die Zweckmäßigkeit des vorliegenden Verfahrens wird besonders offenbar bei der Berechnung höherer Näherungen, auf deren Durchführung bei dem zugrunde gelegten speziellen einfachen Modell verzichtet werden soll.

Für die Anregung zu dieser Arbeit sowie für wertvolle Diskussionen möchte ich Herrn Prof. Dr. M. KOHLER danken.

## Über Untersuchungen an linearen Stoßentladungen

Von W. FRIE, H. MAECKER, A. MICHEL, H. MOTSCHMANN und H. SCHINDLER

Aus dem Forschungslaboratorium der Siemens-Schuckertwerke, Erlangen  
(Z. Naturforsch. 16 a, 121—126 [1961]; eingegangen am 2. November 1960)

Mit einer Stoßstrombatterie von  $1030 \mu\text{F}$ ,  $15 \text{ kV}$  Ladespannung und  $4 \cdot 10^{-9} \text{ H}$  Eigeninduktivität wurden bei Entladungen durch ein Gefäß von  $38 \text{ cm}$   $\varnothing$  und  $45 \text{ cm}$  Höhe Stromanstiegsgeschwindigkeiten bis zu  $1,5 \cdot 10^{12} \text{ A/sec}$  sowie Maximalströme von  $1,2 \cdot 10^6 \text{ A}$  erreicht. Von Entladungen dieser Anlage sowie einer kleinen  $28,6 \mu\text{F}$ -Versuchsbatterie wurden zeitaufgelöste Aufnahmen eines Entladungsquerschnittes und zeitaufgelöste Spektren hergestellt. Die Querschnittsaufnahmen zeigen während des Zündvorganges ein Aufleuchten des ganzen Volumens, auf das nach einer Dunkelpause die Kontraktionsphase folgt. Die nach der Zündung über den ganzen Querschnitt verteilte Entladung wird nämlich durch den Skineffekt zur Wand verlagert und dann durch die LORENTZ-Kräfte zur Achse getrieben. Dementsprechend sinkt die Selbstinduktion nach der Zündung auf ein Minimum, um danach wieder anzusteigen. — Die Entladungsspektren zeigen insbesondere bei hohen Drucken intensive Kontraktion während der Kontraktionen, an die sich später die Linienemission des Wandmaterials anschließt. Sondenmessungen erlaubten, die Erhaltungsdauer der Achsensymmetrie zu bestimmen und ergaben die Existenz von Wirbelströmen in Axialebenen innerhalb der Entladung. Messungen des magnetischen Flusses zeigen, daß bis zum Beginn der Wandablösung der größte Teil der Entladungsenergie zum Aufbau des Magnetfeldes verbraucht wird. Unterhalb  $6 \cdot 10^{-2}$  Torr tritt RÖNTGEN- und Neutronenstrahlung auf. RÖNTGEN-Emission von  $100 \text{ kV}$  mittlerer äquivalenter Spannung wird während jeder Kontraktion neben einem Impuls beim Zünden der Entladung registriert. Ein Neutronenimpuls von mehr als  $10^7$  Neutronen wird nach der zweiten Kontraktion gleichzeitig mit der Schraubeninstabilität beobachtet.

### Die Anlagen

Zur Untersuchung stromstarker Stoßentladungen wurde eine Kondensatorbatterie von  $1030 \mu\text{F}$  für  $15 \text{ kV}$  Ladespannung aufgebaut, über deren Konstruktion an

anderer Stelle berichtet werden soll. Infolge der kleinen Eigeninduktivität der Anlage von  $4 \cdot 10^{-9} \text{ H}$  werden im Kurzschluß eine Stromanstiegsgeschwindigkeit von  $3,8 \cdot 10^{12} \text{ A/sec}$  und ein Maximalstrom von  $7,6 \cdot 10^6 \text{ A}$  erreicht. Mit einem zylindrischen Entladungsgefäß aus