

$A = S^2 \times C$), so daß für Kernabstände, die größer als R_4 sind, die Kurve des Triplett-Zustandes schwach unter der des Singulett-Zustandes verläuft (s. Abb. 1).

Das hier mit der einfachen HEITLER-LONDON-Funktion errechnete Minimum ist allerdings extrem klein ($\approx 10^{-39}$ at. E.) und deswegen physikalisch ohne Bedeutung. Da aber die berechnete Energie (2 b) eine obere Schranke für die exakte Triplettenergie ist, muß dieses Minimum auch bei Berechnungen mit besseren Ψ -Funktionen, die auch Polarisationseffekte berücksichtigen, erhalten bleiben *.

Es ist bemerkenswert, daß das Minimum in der Triplettkurve bereits mit der HEITLER-LONDON-Funktion (1) erhalten wird, für die der Energieausdruck (2) keine VAN-DER-WAALSSchen Anteile enthält. Aus diesem Grunde und wegen der oben diskutierten Überschneidung von Singulett- und Triplettkurve im Rahmen der Näherung (1) seien diese Ergebnisse als Kuriosum mitgeteilt.

* J. O. HIRSCHFELDER u. J. W. LINNETT, J. Chem. Phys. **18**, 130 [1950] erhalten bei $R = 8,45$ at. E. ein Minimum von etwa 10^{-5} at. E.

Eine Möglichkeit zur experimentellen Trennung von Para- und Diamagnetismus der Leitungselektronen

Von E. FICK und H. J. MIKESKA

Institut für Theoretische Physik der TH München
(Z. Naturforschg. **16 a**, 435–436 [1961]; eingegangen am 11. März 1961)

Das entartete Elektronengas in einem Metall besitzt bekanntlich eine magnetische Suszeptibilität, die sich aus dem PAULISchen Spinparamagnetismus und dem LANDAUSchen Diamagnetismus zusammensetzt. Für die in praktischen Fällen meist vorliegenden Magnetfelder und Temperaturen sind diese beiden Beiträge temperatur- und magnetfeldunabhängig, so daß sie einer getrennten experimentellen Bestimmung nicht zugänglich sind.

Sorgt man jedoch etwa durch eine geeignete Hochfrequenzinstrahlung dafür, daß die Spintemperatur T_s von der Bahntemperatur T_0 verschieden gehalten wird, so kann man die energetische Wechselwirkung zwischen dem Bahn- und Spinsystem der Elektronen näherungs-

weise vernachlässigen. Es ergibt sich aber vermöge der Antimetrie der Wahrscheinlichkeitsamplitude bei Elektronenvertauschung eine nichtenergetische Kopplung zwischen dem Bahn- und Spinsystem, die im Entartungsgebiet bewirkt, daß sowohl die Besetzungszahlen als auch Bahn- und Spinenergie von *beiden* Temperaturen T_0 und T_s abhängen¹. Neben einem neuartigen thermodynamischen Verhalten solcher Systeme² findet man, daß die Spinsuszeptibilität nicht mehr temperaturunabhängig bleibt, sondern proportional zu T_0/T_s wird^{1,3}. Während bisher auf die Behandlung des Einflusses des Magnetfeldes auf die Bahnbewegung verzichtet wurde, ist nunmehr eine simultane Berechnung von Spinparamagnetismus und Diamagnetismus eines freien, entarteten Gases mit verschiedener Bahn- und Spintemperatur durchgeführt worden.

Durch Verallgemeinerung der früher¹ durchgeführten quantenstatistischen Ansätze auf den nun vorliegenden Fall findet man für ein Gas des Volumens V in einem konstanten Magnetfeld H als Bahnmagnetisierung $M_0(H, V, T_s, T_0, N)$ bzw. Spinmagnetisierung $M_s(H, V, T_s, T_0, N)$

$$M_0 = - \frac{\mu_B m_{el} V}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{m=-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{2 \mu_B H(n+\frac{1}{2}) - \frac{\hbar^2 \chi^2}{m_{el}}}{\exp \left\{ -\nu + \frac{1}{k T_0} \left[2 \mu_B H(n+\frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 \chi^2}{2 m_{el}} \right] + m \frac{g_{el} \mu_B H}{k T_s} \right\} + 1} d\chi, \quad (1)$$

$$M_s = - \frac{g_{el} \mu_B^2 m_{el} V H}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{m=-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{m}{\exp \left\{ -\nu + \frac{1}{k T_0} \left[2 \mu_B H(n+\frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 \chi^2}{2 m_{el}} \right] + m \frac{g_{el} \mu_B H}{k T_s} \right\} + 1} d\chi, \quad (2)$$

wobei sich die Größe ν aus

$$1 = \frac{\mu_B m_{el} V H}{\pi^2 \hbar^2 N} \sum_{m=-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{1}{\exp \left\{ -\nu + \frac{1}{k T_0} \left[2 \mu_B H(n+\frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 \chi^2}{2 m_{el}} \right] + m \frac{g_{el} \mu_B H}{k T_s} \right\} + 1} d\chi \quad (3)$$

¹ E. FICK, Z. Phys. **157**, 407 [1960].

² E. FICK, Physica **27** [1961], im Erscheinen.

³ J. VAN VLECK, Suppl. Nuovo Cim. **6**, 1181 [1957].



berechnet (N = Anzahl der Elektronen in V , m_{el} = Masse des Elektrons, μ_{B} = BOHRsches Magneton, g_{el} = Anomaliefaktor ≈ 2).

Eine detaillierte Diskussion der Gln. (1) bis (3) zeigt, daß sich in dem dem Experiment zugänglichen Temperaturgebiet

$$\frac{T_0}{T_e} \ll 1, \quad \frac{T_0}{T_s} \ll 2 \left| \frac{k T_s}{g \mu_{\text{B}} H} \right|, \quad \left(\frac{\mu_{\text{B}} H}{k T_0} \right)^2 \left(\frac{T_e}{T_0} \right)^{1/2} \ll 1 \quad (4)$$

$$\left[T_e = \text{Entartungstemperatur} = \frac{2 \hbar^2 \pi}{m_{\text{el}} k} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \right]$$

weiterhin eine temperaturunabhängige Bahnsuszeptibilität χ_0 ergibt, während die Spinsuszeptibilität χ_s wieder proportional zu T_0/T_s wird. Die Gesamtsuszeptibilität des freien, entarteten Elektronengases ist in dieser Näherung gegeben durch

$$\chi = \chi_s + \chi_0 = \frac{m_{\text{el}} \mu_{\text{B}}^2}{\hbar^2 \pi^2} \left(3 \pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} V \left\{ \frac{T_0}{T_s} - \frac{1}{3} \right\}. \quad (5)$$

Damit hat man die Möglichkeit durch Veränderung des Verhältnisses von T_0/T_s den Spinparamagnetismus χ_s und den Diamagnetismus χ_0 der Leitungselektronen experimentell getrennt zu bestimmen: Für $T_s = T_0$ erhält man das übliche Ergebnis, für $T_s = 3 T_0$ verschwindet die Gesamtsuszeptibilität, für $|T_s| > 3 T_0$ und für negative T_s ist χ stets negativ. Bei Sättigung ($T_s = \infty$) resultiert allein der LANDAUSCHE Diamagnetismus.

Wenn auch die vorliegenden Ergebnisse auf der Näherung eines freien Elektronengases beruhen, die in einem realen Metall durch die Wechselwirkung mit dem Gitter und die Wechselwirkung zwischen den Elektronen modifiziert werden, so kann man doch erwarten, daß sich im Experiment eine entsprechende Temperaturabhängigkeit zeigt, wodurch ein weiterer Einblick in den Magnetismus der Leitungselektronen in Metallen gegeben wäre.

Effektive Zustandsdichten beim Tunneleffekt

Von WALTER FRANZ

Theoretische Abteilung des Instituts für Angewandte Physik
der Universität Hamburg

(Z. Naturforsch. 16 a, 436–438 [1961]; eingeg. am 27. Februar 1961)

Die Experimente¹ über den Tunnelstrom zwischen normal- und supraleitenden Metallen bzw. zwischen zwei Supraleitern wurden zur Bestimmung der Energiestruktur des Supraleiters herangezogen unter der Annahme, daß im Grenzfall tiefer Temperatur die Charakteristik das direkte Abbild der Zustandsdichte $\varrho(E)$ ist.

BARDEEN² hat versucht, diese Deutung theoretisch dadurch zu stützen, daß er plausibel macht, daß die Matrixelemente des Tunnelübergangs im normalleitenden und supraleitenden Zustand dieselben sind. Diese Plausibilitätsbetrachtung erscheint jedoch problematisch, da der Übergang mit dem Stromdurchgang durch Grenzflächen verbunden ist, und die hierfür maßgebliche Gruppengeschwindigkeit der Ladungsträger im Zustand der Supraleitung grundlegend geändert wird. Deshalb wird im folgenden der Übergang in der Näherung der effektiven Massen unmittelbar berechnet. — Zwei Materialien, in welchen die Energie E in verschiedener Weise vom Impuls \mathbf{p} abhängt, seien durch eine Ebene senkrecht zur x -Achse eines Koordinatensystems getrennt; für eine Einelektronen-SCHRÖDINGER-Funktion gelten dann die folgenden Grenzbedingungen:

$$\psi \text{ stetig}; \quad \frac{\partial E}{\partial (p^2)} \frac{\partial \psi}{\partial x} \text{ stetig}. \quad (1)$$

Die letzte Bedingung sorgt für die Kontinuität des Teilchenstromes senkrecht zur Grenzfläche. Wir betrachten nunmehr ein „sandwich“, bestehend aus zwei Metallen

1 und 2, getrennt durch eine planparallele isolierende Schicht der Dicke d , in welcher für die betrachtete Energie der Impuls eine rein imaginäre x -Komponente besitzt, eine Elektronenwelle also mit der Dämpfungskonstante $\varkappa_x = i p_x / \hbar$ behaftet ist. Der Reflektionskoeffizient R und Durchlaßkoeffizient D_{12} einer aus dem Material 1 anlaufenden ebenen Welle ergibt sich dann für $x, d \gg 1$ zu

$$R = 1 - \frac{16 v_{0x}^2 v_{1x} v_{2x}}{(v_{0x}^2 + v_{0z}^2)(v_{2x}^2 + v_{0z}^2)} e^{-2 \varkappa_x d}; \quad (2)$$

$$v_{2x} D_{12} = v_{1x} (1 - R).$$

Hierbei bedeutet

$$\mathbf{v}_0 \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{x}}; \quad \mathbf{v}_1 \equiv \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}_1}; \quad \mathbf{v}_2 \equiv \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}_2}. \quad (3)$$

Der gesamte Strom von Metall 1 nach 2 abzüglich des Stromes von 2 nach 1 ergibt sich dann zu

$$I = \frac{2 e}{\hbar^3} \int d^3 \mathbf{p}_1 v_{2x} D_{12} f_1 (1 - f_2) - \frac{2}{\hbar^3} \int d^3 \mathbf{p}_2 v_{1x} D_{21} f_2 (1 - f_1). \quad (4)$$

f_1, f_2 sind die FERMISCHEN Verteilungsfunktionen in Material 1 und Material 2 bei der betrachteten Energie. Die Integration über die Komponenten p_y, p_z kann näherungsweise ausgeführt werden; wegen der mit wachsendem Betrag dieser Größen rasch zunehmenden Dämpfung $\varkappa_x = \sqrt{\varkappa^2 + (p_y^2 + p_z^2) / \hbar^2}$ setzen wir in allen Gliedern außer der Exponentialfunktion von Gl. (2) $p_y = 0, p_z = 0$, führen dann noch an Stelle von p_x die Energie als Integrationsvariable ein mit dem Ergebnis:

$$I = \frac{2 \pi e}{\hbar^3} \int dE \varkappa d (1 - R) (f_1 - f_2). \quad (5)$$

¹ J. GIAEVER, Phys. Rev., Letters 5, 147, 464 [1960]. — J. NICOL, S. SHAPIRO u. H. SMITH, Phys. Rev., Letters 5, 461 [1960].

² J. BARDEEN, Phys. Rev., Letters 6, 57 [1961].