

Zur Lösung der Boltzmann-Gleichung bei Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes

Von HELMUT GABRIEL und RUDOLF KLEIN

Institut für Theoretische Physik der Technischen Hochschule Braunschweig

(Z. Naturforschg. **19 a**, 524—532 [1964]; eingegangen am 23. Dezember 1963)

Herrn Professor Dr. E. JUSTI zum 60. Geburtstag gewidmet

A new method for the solution of the BOLTZMANN transport equation in the presence of an external magnetic field is proposed. Applying this procedure to the conduction electrons in a solid a general expression for the conductivity tensor is derived, which can be simplified by using the symmetry properties of the crystal. Conductivity tensor and magnetoresistance are given for the case of cubic solids and are compared with experiments on tungsten. Our results disagree with the theoretical expressions given by GARCIA-MOLINER. The method does not rest upon a power series expansion in the magnetic field and is therefore applicable to the intermediate field region.

Exakte Lösungen der BOLTZMANNschen Fundamentalgleichung für die durch äußere Felder gestörte Verteilung der Ladungsträger in einem Festkörper sind nicht bekannt. Besondere Schwierigkeiten ergeben sich bei Anwesenheit eines Magnetfeldes. Viele Autoren haben Näherungslösungen angegeben, die unter gewissen einschränkenden Bedingungen die vorliegenden physikalischen Prozesse richtig beschreiben.

Ersetzt man etwa das Stoßintegral in der BOLTZMANN-Gleichung durch eine Relaxationszeit τ , so kann man unter der weiteren Annahme, daß τ nur eine Funktion der Energie der Teilchen ist, eine exakte Lösung finden. Hat τ nicht diese einfache Form, so kann man nach JONES und ZENER¹ mit Hilfe einer Entwicklung nach steigenden Potenzen des Magnetfeldes \mathbf{H} die BOLTZMANN-Gleichung iterativ lösen. Die Annahme kleiner Felder, also die Entwickelbarkeit der Verteilungsfunktion nach steigenden Potenzen von \mathbf{H} ermöglicht auch die Behandlung der allgemeineren Gleichung, in der das Stoßintegral nicht durch eine Relaxationszeit angenähert werden kann².

Bei fehlendem Magnetfeld kann man die aus der BOLTZMANN-Gleichung zu bestimmenden Transportgrößen bekanntlich mit Hilfe des KOHLERSchen Variationsprinzips³ berechnen. Dieses Verfahren ist auch auf den Fall des vorhandenen äußeren Magnetfeldes ausgedehnt worden⁴, wobei jedoch gewisse

Schwierigkeiten auftreten, die hier nicht näher diskutiert werden sollen.

Schließlich hat LANGBEIN⁵ ein von MÜNTZ für Integralgleichungen angegebenes Näherungsverfahren auf die Integrodifferentialgleichung für die Verteilungsfunktion übertragen.

Hier soll nun eine Lösungsmethode der statistischen Fundamentalgleichung mit äußerem Magnetfeld beschrieben werden, die auf einfache Weise eine korrekte Berechnung etwa des Leitfähigkeitstensors gestattet und als konstruktives Verfahren zur Lösung von Integralgleichungen von ENSKOG⁶ entwickelt wurde.

Zunächst soll dieses Verfahren skizziert werden: Gegeben sei die lineare Integralgleichung

$$J(\varphi) \equiv k(s) \varphi(s) - \int_a^b K(s, t) \varphi(t) dt = f(s), \quad (1)$$

deren Kern $K(s, t)$ nichtsymmetrisch sein darf. Zur Lösung von (1) bilde man aus einem vollständigen System linear unabhängiger Funktionen $\{h_i(s)\}$ Linearkombinationen

$$u_\alpha = \sum_{i=1}^n t_{\alpha i} h_i(s), \quad (2)$$

die gemäß

$$\int T(u_\alpha) T(u_\beta) ds = \delta_{\alpha\beta}; (\alpha, \beta = 1, 2, \dots) \quad (3)$$

orthonormiert sind, wobei T der zu J transportierte Operator ist. Die durch $T(u_\alpha) = v_\alpha$ definierten Funk-

¹ H. JONES u. C. ZENER, Proc. Roy. Soc., Lond. A **145**, 268 [1934].

² P. L. TAYLOR, Proc. Roy. Soc., Lond. A **275**, 200 [1963]. — B. FOGARASSY, phys. stat. sol. **3**, 1646 [1963].

³ M. KOHLER, Z. Phys. **124**, 772 [1948]; **125**, 679 [1949].

⁴ F. GARCIA-MOLINER, Proc. Roy. Soc., Lond. A **249**, 73 [1957]. — M. TSUJI, J. Phys. Soc., Japan **13**, 979 [1958]. — H. BROSS, Z. Naturforschg. **14 a**, 560 [1959]. — G. TAUBER, J. Franklin Inst. **268**, 175 [1959].

⁵ D. LANGBEIN, Z. Phys. **162**, 542 [1961]; **167**, 83 [1962].

⁶ D. ENSKOG, Math. Z. **23/24**, 670 [1925/26].



tionen bilden ein Orthonormalsystem. Unter Benutzung der Identität

$$\int \psi J(\chi) ds = \int \chi T(\psi) ds \quad (4)$$

für beliebige ψ und χ findet man die FOURIER-Koeffizienten a_a bezüglich der Basis $\{v_a\}$:

$$a_a = \int \varphi(s) v_a(s) ds = \int u_a(s) f(s) ds, \quad (5)$$

und die Lösung von (1) ist

$$\varphi(s) = \sum_{a=1}^{\infty} a_a v_a(s) = \sum_{a=1}^{\infty} a_a T(u_a). \quad (6)$$

Für eine ausführliche Diskussion der Voraussetzungen und vor allem für den Nachweis der Konvergenz von (6) gegen eine Lösung von (1) sei auf die Arbeit von ENSKOG verwiesen.

Dieses Verfahren soll im nächsten Abschnitt auf die BOLTZMANN-Gleichung, also eine Integrodifferentialgleichung übertragen und erweitert werden. Mit Hilfe der so gefundenen Verteilungsfunktion wird als Beispiel der Leitfähigkeitstensor in Abhängigkeit vom Magnetfeld berechnet und auf den Fall kubischer Kristalle spezialisiert; wir bemerken jedoch, daß die hier verwendete Methode nicht auf Leitungsvorgänge in Festkörpern beschränkt ist, sondern auch auf Transportphänomene in Systemen anwendbar ist, die durch ähnliche Gleichungen beschrieben werden.

Für den Leitfähigkeitstensor wird ein solcher Ausdruck gebildet, der das ONSAGER-Prinzip erfüllt und damit thermodynamisch konsistent ist.

Zur Auswertung dieser Näherungsformel werden gruppentheoretische Methoden verwendet, die die im physikalischen System vorhandenen Symmetrien auszuschöpfen gestatten.

Auf diese Weise gelingt es, in den Tensorkomponenten der Leitfähigkeit die Magnetfeldabhängigkeit so abzuspalten, daß alle Informationen über die Form der Energieflächen und die Wechselwirkung der Ladungsträger in magnetfeldunabhängigen Koeffizienten enthalten sind. Wir erhalten für die Komponenten des Leitfähigkeitstensors eine Verallgemeinerung der für kleine Felder hergeleiteten Formel von KOHLER⁷ und SEITZ⁸. Die von uns gefundenen Ergebnisse enthalten keine einschränkenden Voraussetzungen über die Größe des Magnetfeldes.

I. Herleitung eines formalen Ausdrucks für den Leitfähigkeitstensor

Die kinetische Fundamentalgleichung für die Verteilungsfunktion der Elektronen in einem isothermen Festkörper lautet bei Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes

$$\begin{aligned} & \frac{e k T}{\hbar} (\mathbf{F} \cdot \text{grad}_k E) \frac{\partial f_0}{\partial E} \\ & - \frac{e k T}{\hbar^2 c} (\text{grad}_k E \times \mathbf{H}) \cdot \text{grad}_k \Phi \frac{\partial f_0}{\partial E} \\ & = \int V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \{ \Phi(\mathbf{k}) - \Phi(\mathbf{k}') \} d\tau'. \end{aligned} \quad (7)$$

Hierin ist Φ der durch den irreversiblen Charakter des Transportvorganges bedingte Zusatz zur Verteilungsfunktion f_0 des Gleichgewichts:

$$f(\mathbf{k}) = f_0 - \Phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (8)$$

Ferner bedeutet \mathbf{F} das elektrische und \mathbf{H} das magnetische Feld, $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ist eine Funktion, die die Wechselwirkung der Elektronen untereinander und mit dem Gitter beschreibt; $d\tau$ ist das Volumenelement des \mathbf{k} -Raumes.

Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \frac{e k T}{\hbar^2 c} \frac{\partial f_0}{\partial E} (\text{grad}_k E \times \mathbf{H}), \\ X &= \frac{e k T}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial E} (\mathbf{F} \cdot \text{grad}_k E) \equiv \sum_{r=1}^3 X_r F_r, \end{aligned}$$

$$L(\Phi(\mathbf{k})) = \int V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \{ \Phi(\mathbf{k}) - \Phi(\mathbf{k}') \} d\tau' \quad (9)$$

lautet die Integro-Differentialgleichung (7):

$$J(\Phi) \equiv L(\Phi) + M(\Phi) = X, \quad (10)$$

wobei $M = \mathbf{m} \cdot \text{grad}_k$ der Magnetfeldoperator ist.

Für den zu J transponierten Operator T gilt

$$\begin{aligned} T(\psi) &= \int V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \{ \psi(\mathbf{k}) - \psi(\mathbf{k}') \} d\tau' \\ &- \text{div}_k (\mathbf{m} \psi(\mathbf{k})) \equiv L(\psi) - M(\psi). \end{aligned} \quad (11)$$

Mit Hilfe dieser Definition leitet man eine zu (4) analoge Relation her:

$$\int u(\mathbf{k}) J(v(\mathbf{k})) d\tau = \int v(\mathbf{k}) T(u(\mathbf{k})) d\tau. \quad (12)$$

Dazu benötigt man $\text{div } \mathbf{m} = 0$ und

$$\int \text{div}_k (u v \mathbf{m}) d\tau = \int u v (\mathbf{m} \cdot d\mathbf{S}) = 0.$$

Damit können wir das in der Einleitung angegebene Verfahren von ENSKOG formal ungeändert auf die Integrodifferentialgleichung (10) übertragen, wobei

⁷ M. KOHLER, Ann. Phys., Lpz. **20**, 878, 891 [1934].

⁸ F. SEITZ, Phys. Rev. **79**, 372 [1950].

die Operatoren J und T aus (10) und (11) sowie die Inhomogenität X aus (9) zu entnehmen sind. Also erhält man eine Lösung von (10) gemäß

$$\Phi(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} a_{\alpha} v_{\alpha}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} a_{\alpha} T(u_{\alpha}), \quad (13)$$

worin die Entwicklungskoeffizienten durch

$$a_{\alpha} = \int u_{\alpha}(\mathbf{k}) X(\mathbf{k}) d\tau \quad (14)$$

definiert sind.

Die im Ansatz (2) auftretenden Koeffizienten werden nun mit Hilfe der Orthogonalisierungsvorschrift (3) bestimmt:

$$\delta_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{\alpha} \sum_{l=1}^{\beta} t_{ai} t_{\beta l} c_{il}, \quad (15)$$

wo

$$c_{il} = l_{il} - a_{il} + b_{il} \quad (16)$$

$$\left. \begin{aligned} l_{il} &= \int L(h_i) L(h_l) d\tau, \\ a_{il} &= \int \{L(h_i) M(h_l) + L(h_l) M(h_i)\} d\tau, \\ b_{il} &= \int M(h_i) M(h_l) d\tau. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Nun ist es möglich, die Komponenten des Leitfähigkeitstensors zu berechnen. Zunächst folgt für Φ aus (13) und (2)

$$\Phi = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\alpha} a_{\alpha} t_{ai} T(h_i), \quad (18)$$

wobei für a_{α} wegen (14) und (2)

$$a_{\alpha} = \sum_{l=1}^{\alpha} t_{al} \int X h_l d\tau \quad (19)$$

gilt oder mit der Definition (9) für X_r :

$$a_{\alpha} = \sum_{r=1}^3 \sum_{l=1}^{\alpha} t_{al} F^r \int \bar{X}_r h_l d\tau \equiv \sum_{l=1}^{\alpha} t_{al} X_{rl} F^r, \quad (20)$$

$$X_{rl} = \int \bar{X}_r h_l d\tau. \quad (21)$$

Damit erhalten wir aus (18) und (20) für die Verteilungsfunktion

$$\Phi(\mathbf{k}) = \sum_{r=1}^3 \sum_{\alpha=1}^{\infty} \sum_{i,l=1}^{\alpha} t_{ai} t_{al} X_{rl} T(h_i) F^r. \quad (22)$$

Den Tensor der elektrischen Leitfähigkeit erhält man aus dem Ausdruck für die elektrische Stromdichte und dem OHMSchen Gesetz:

$$j_s = -\frac{e}{4\pi^3} \int v_s \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi(\mathbf{k}) d\tau = \sum_{r=1}^3 \sigma_{sr} F^r. \quad (23)$$

Nach Gl. (22) ist die Verteilungsfunktion proportio-

nal zum elektrischen Feld: $\Phi = \sum_{r=1}^3 \Phi_r F^r$, also

$$\sigma_{sr}(\mathbf{H}) = -\frac{e}{4\pi^3} \int v_s \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi_r^+(\mathbf{H}) d\tau, \quad (24)$$

wobei $\Phi_r^+(\mathbf{H})$ die Lösung der BOLTZMANN-Gleichung

$$J \Phi_r^+(\mathbf{H}) \equiv (L+M) \Phi_r^+(\mathbf{H}) = \bar{X}_r \quad (25)$$

ist. Ersetzt man hierin \mathbf{H} durch $-\mathbf{H}$, so entsteht

$$(L-M) \Phi_r^+(-\mathbf{H}) = \bar{X}_r. \quad (26)$$

Andererseits lautet die zu (25) transponierte Gleichung

$$T \Phi_r^-(\mathbf{H}) \equiv (L-M) \Phi_r^-(\mathbf{H}) = \bar{X}_r. \quad (27)$$

Aus den beiden letzten Gleichungen folgt

$$\Phi_r^+(-\mathbf{H}) = \Phi_r^-(\mathbf{H}) \quad \text{oder} \quad \Phi_r^+(\mathbf{H}) = \Phi_r^-(-\mathbf{H}). \quad (28)$$

Verwendet man dies in Gl. (24), so entsteht für den Leitfähigkeitstensor

$$\sigma_{sr}(\mathbf{H}) = -\frac{e}{8\pi^3} \left\{ \int v_s \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi_r^+(\mathbf{H}) d\tau + \int v_s \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi_r^-(-\mathbf{H}) d\tau \right\}.$$

Nach KOHLER⁹ können wir das zweite Integral in folgender Weise umformen:

$$\begin{aligned} \int v_s \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi_r^-(-\mathbf{H}) d\tau &= \frac{\hbar}{e k T} \int \Phi_r^-(-\mathbf{H}) T[\Phi_s^-(\mathbf{H})] d\tau \\ &= \frac{\hbar}{e k T} \int \Phi_s^-(\mathbf{H}) J[\Phi_r^-(-\mathbf{H})] d\tau, \end{aligned}$$

wobei die Identität (12) verwendet wurde. Nun ist aber nach Gl. (28) $\Phi_r^-(\mathbf{H}) = \Phi_r^+(\mathbf{H})$ und mit (25) schließlich

$$\begin{aligned} -\frac{e}{4\pi^3} \int v_s \Phi_r^-(-\mathbf{H}) d\tau &= \\ -\frac{e}{4\pi^3} \int v_r \frac{\partial f_0}{\partial E} \Phi_s^+(-\mathbf{H}) d\tau &= \sigma_{rs}(-\mathbf{H}). \end{aligned}$$

Damit erhalten wir – lediglich unter Ausnutzung einer Eigenschaft der BOLTZMANN-Gleichung –

$$\sigma_{sr}(\mathbf{H}) = \frac{1}{2} (\sigma_{sr}(\mathbf{H}) + \sigma_{rs}(-\mathbf{H})). \quad (29)$$

Diese Form erfüllt das ONSAGER-Prinzip ganz offensichtlich. Für jeden exakten Leitfähigkeitstensor ist (29) wegen der Gültigkeit des ONSAGER-Prinzips

⁹ M. KOHLER, Ann. Phys., Lpz. **40**, 601 [1941].

eine identische Umschreibung. Es läßt sich nämlich beweisen, daß schon (24) die ONSAGER-Relationen $\sigma_{sr}(\mathbf{H}) = \sigma_{rs}(-\mathbf{H})$ erfüllt, wenn die Verteilungsfunktion (22) gegen die wahre Lösung der BOLTZMANN-Gleichung konvergiert. (Der Beweis verläuft analog dem von KOHLER⁹ gegebenen.) Wegen (28) läßt sich ein exakter Ausdruck für den Leitfähigkeitstensor ebenso durch die Lösung der transponierten Gl. (27), in der man \mathbf{H} durch $-\mathbf{H}$ ersetzt, hinschreiben, der natürlich ebenfalls das ONSAGER-Prinzip erfüllt.

Da man sich bei praktischen Rechnungen immer auf eine endliche Anzahl von Näherungsschritten beschränken muß, bilden wir ausgehend von der Umschreibung (29) Linearkombinationen der beiden Näherungsfolgen, wodurch die Erfüllung des ONSAGER-Prinzips gewährleistet wird. Mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} T_{si} &= \int v_s \frac{\partial f_0}{\partial E} \{L(h_i) - M(h_i)\} d\tau \equiv L_{si} - M_{si}, \\ J_{si} &= L_{si} + M_{si} \end{aligned} \quad (30)$$

läßt sich für den Leitfähigkeitstensor in N -ter Näherung

$$\sigma_{sr}^{(N)} = -\frac{e}{8\pi^3} \sum_{a=1}^N \sum_{i,l=1}^a \{t_{ai}(\mathbf{H}) t_{al}(\mathbf{H}) X_{rl} T_{si} + t_{ai}(-\mathbf{H}) t_{al}(-\mathbf{H}) X_{sl} J_{ri}\} \quad (31)$$

schreiben. Dieser zunächst noch recht umständliche Ausdruck läßt sich erheblich vereinfachen, da sich die Koeffizienten t_{ai} , die aus dem Gleichungssystem (15) zu berechnen sind, eliminieren lassen. Um eine bequeme Matrix-Schreibweise einführen zu können, erweitern wir die Zahl der Entwicklungskoeffizienten t_{ai} , die bisher nur für $i \leq \alpha$ definiert sind, durch Hinzufügen von Nullen, nämlich $t_{ai} = 0$ für $i > \alpha$. Dann können wir auch die Summationsindizes i und l bis N laufen lassen.

Die Orthogonalisierungsvorschrift (15)

$$\delta_{a\beta} = \sum_{i,l=1}^N t_{ai}(\mathbf{H}) c_{il}(\mathbf{H}) t_{\beta l}(\mathbf{H})$$

lautet in Matrixform

$$I = \tilde{T} C T,$$

worin \tilde{T} die zu T transponierte Matrix und I die Einheitsmatrix ist. Hieraus findet man mit $c^{-1} = \tilde{T} T$ oder

$$(c^{-1}(\mathbf{H}))_{il} = \sum_{a=1}^N t_{ai}(\mathbf{H}) t_{al}(\mathbf{H})$$

gerade die in (31) benötigte Summe der Entwicklungskoeffizienten $t_{ai} t_{al}$ über α , von der die übrigen Koeffizienten nicht betroffen sind. Durch Einsetzen in (31) erhalten wir schließlich für den genäherten Leitfähigkeitstensor

$$\sigma_{sr}^{(N)} = -\frac{e}{8\pi^3} \sum_{i,l=1}^N \{ (c^{-1}(\mathbf{H}))_{il} X_{rl} T_{si} + (c^{-1}(-\mathbf{H}))_{il} X_{sl} J_{ri} \}, \quad (32)$$

den man auch in eine bequeme Determinantenform umschreiben kann. Ersetzt man in (32) die Elemente der inversen Matrix $(c^{-1})_{il} = \Delta_{il}/D^{(N)}$ [$\Delta_{il} = \Delta_{il}$, der zum Element c_{il} der Matrix c gehörige Kofaktor; $D^{(N)}$ die Determinante der $(N \times N)$ -Matrix c], die wegen der Symmetrie von c ebenfalls symmetrisch sind, dann ist

$$\begin{aligned} \sigma_{sr}^{(N)} &= -\frac{e}{8\pi^3} \sum_{i,l=1}^N \left\{ T_{si} \frac{\Delta_{il}(\mathbf{H})}{D^{(N)}(\mathbf{H})} X_{rl} + J_{ri} \frac{\Delta_{il}(-\mathbf{H})}{D^{(N)}(-\mathbf{H})} X_{sl} \right\} \\ &= \frac{e}{8\pi^3} \left\{ \frac{D_{sr}^{(N)}(X_r, T_s)}{D^{(N)}(\mathbf{H})} + \frac{D_{rs}^{(N)}(X_s, J_r)}{D^{(N)}(-\mathbf{H})} \right\}. \end{aligned} \quad (33)$$

Dabei ist $D_{sr}^{(N)}(X_r, T_s)$ die $(N+1)$ -reihige Determinante, die man aus $D^{(N)}$ erhält, indem man mit der Spalte T_{si} und der Zeile X_{rl} rändert und das letzte Element unten rechts Null setzt; z. B. ist für $N=3$:

$$D_{sr}^{(3)}(X_r, T_s) = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & T_{s1} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & T_{s2} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & T_{s3} \\ X_{r1} & X_{r2} & X_{r3} & 0 \end{vmatrix}.$$

II. Ausnutzung der Kristallsymmetrien am Beispiel des kubischen Gitters

Die explizite Auswertung der Formel (32) oder (33) für den Leitfähigkeitstensor läßt sich mit Hilfe gruppentheoretischer Überlegungen außerordentlich vereinfachen.

Als Ausgangspunkt dient der aus der Gruppentheorie bekannte Satz, daß zu dem Raumintegral über eine beliebige Funktion ψ nur derjenige Anteil ψ_1 beiträgt, der zur identischen Darstellung der betrachteten Symmetriegruppe gehört. In fast allen praktisch auftretenden Fällen ist der Integrand als Produkt verschiedener Funktionen gegeben, die sich in ihrem Transformationsverhalten gegenüber Operationen innerhalb der Symmetriegruppe unterscheiden. Auch in solchen Fällen lassen sich ganz allgemeine Kriterien angeben, wann gewisse Integrale

verschwinden oder nicht¹⁰. Die Orthogonalitätsrelationen

$$\int \psi_i^{(\mu)*} \Phi_j^{(\nu)} d\tau = \delta_{ij} \delta_{\mu\nu}, \quad (34)$$

worin $\psi_i^{(\mu)}$ Basisfunktion zur i -ten Zeile der μ -ten Darstellung (entsprechendes für $\Phi_j^{(\nu)}$) ist, stellen besonders einfache Fälle der eben angedeuteten „Auswahlregeln“ dar.

Im folgenden beschränken wir uns auf kubische Kristalle, bemerken aber, daß sich alle Überlegungen in analoger Weise auf Kristalle anderer Symmetrie übertragen lassen.

Die Energie $E(\mathbf{k})$ und damit jede Funktion von E ist eine Invariante gegenüber den Decktransformationen der kubischen Gruppe. Die Komponenten der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \hbar^{-1} \cdot \text{grad}_k E(\mathbf{k})$, bezogen auf das Hauptachsensystem des kubischen Kristalls, gehören zu den 3 Zeilen der Vektordarstellung. Nun soll das System der Entwicklungsfunktionen $\{h_i\}$, von dem bisher nur Vollständigkeit verlangt war, gewählt werden: Für alle j soll das Funktionstriplet $\{h_1^{(j)}, h_2^{(j)}, h_3^{(j)}\}$ eine Familie von Basisfunktionen zur irreduziblen Vektordarstellung bilden. Damit sind die Entwicklungsfunktionen bezüglich ihrer Symmetrie bestmöglich an das vorliegende Problem angepaßt. Es sei noch etwas zu der gerade benutzten Bezeichnungsweise gesagt. In der ursprünglichen, kürzeren Schreibweise sollen nacheinander $\{h_1, h_2, h_3\}$, $\{h_4, h_5, h_6\}$, $\{h_7, h_8, h_9\}$, ... die je 3 zusammengehörigen Basisfunktionen der Vektordarstellung sein, was in der neuen Schreibweise $\{h_1^{(1)}, h_2^{(1)}, h_3^{(1)}\}$, $\{h_1^{(2)}, h_2^{(2)}, h_3^{(2)}\}$, $\{h_1^{(3)}, h_2^{(3)}, h_3^{(3)}\}$, ... bedeutet, wobei immer $h_s^{(j)}$ zur s -ten Zeile der Vektordarstellung gehört¹¹.

Benutzt man diese Wahl des Systems der Entwicklungsfunktionen, dann sind wegen (34) nur diejenigen Koeffizienten $X_{rl} \neq 0$, in denen h_l zur r -ten Zeile der Vektordarstellung gehört.

Die gleiche Schlußweise läßt sich auf das erste Integral in (30) anwenden. Wie im Anhang A bewiesen wird, gehört mit $h_t^{(j)}$ auch $L(h_t^{(j)})$ zur t -ten Zeile der Vektordarstellung. Also ist

$$L_{st}^j = \int v_s \frac{\partial f_0}{\partial E} L(h_t^{(j)}) d\tau = L_j \delta_{st}, \quad (35)$$

und L_{si} ist nur für diejenigen Funktionen h_i von Null verschieden, die zur s -ten Zeile der Vektordarstellung gehören. Analog behandelt man den in (17) definierten Anteil l_{il} in der Matrix c_{il} , der in der ausführlichen Schreibweise

$$l_{st}^{jj'} = \int L(h_s^{(j)}) L(h_t^{(j')}) d\tau$$

lautet. Hier gehört $L(h_s^{(j)})$ zur s -ten und $L(h_t^{(j')})$ zur t -ten Zeile der Vektordarstellung. Ein von Null verschiedenes Ergebnis erhält man erst, wenn beide Faktoren zur gleichen Zeile gehören; sie dürfen natürlich aus verschiedenen „Familien“ j und j' stammen:

$$l_{st}^{jj'} = \delta_{st} l^{jj'}. \quad (36)$$

Bei den noch nicht untersuchten Größen M_{si} aus (30) und a_{il} , b_{il} aus (17) tritt durch den in ihnen enthaltenen Magnetfeldoperator M eine Komplikation auf. Sind R die Symmetrieelemente der zugrunde liegenden Symmetriegruppe (hier der kubischen Gruppe), so ist der Operator O_R , dessen Wirkung für alle R auf eine Funktion $\psi(\mathbf{k})$ durch

$$O_R \psi(\mathbf{k}) = \psi(R^{-1} \mathbf{k})$$

definiert wird, nicht mit dem Magnetfeldoperator vertauschbar. Gehört h_i zur i -ten Zeile der Vektordarstellung, so gehörte $L(h_i)$ ebenso dazu. Dagegen hat die Wirkung des Operators M zur Folge, daß $M(h_i)$ keinen Anteil enthält, der zur i -ten Zeile gehört. Trotz dieser Schwierigkeit ist es möglich, durch Anwendung geeigneter Decktransformationen das Verschwinden mancher Koeffizienten bzw. deren zahlenmäßige Gleichheit mit anderen zu zeigen, denn wir müssen fordern, daß ein Integral bei Ausführung einer orthogonalen Transformation, die wir als Variablentransformation mit gleichbleibenden Volumenelementen deuten können, invariant ist.

Mit der Definition

$$\mathbf{g}_l^{(i)} = \frac{e k T}{\hbar^2 c} \frac{\partial f_0}{\partial E} (\text{grad}_k h_l^{(i)} \times \text{grad}_k E) \quad (37)$$

findet man

$$\begin{aligned} M_{12}^{(i)}(\mathbf{H}) &= \int \frac{\partial f_0}{\partial E} v_1 M(h_2^{(i)}) d\tau \\ &= H_3 \int \frac{\partial f_0}{\partial E} v_1 g_{23}^{(i)} d\tau \\ &\equiv H_3 G^{(i)} = -M_{21}^{(i)}(\mathbf{H}) \end{aligned} \quad (38)$$

¹⁰ Siehe z. B.: M. HAMERMESH, Group Theory, Addison-Wesley Publ. Comp., London 1962, S. 166 ff.

¹¹ Benutzt man etwa die der Symmetrie angepaßte Entwicklung nach homogenen Polynomen (F. C. VON DER LAGE, H. A. BETHE, Phys. Rev. 71, 612 [1947]), so hätte man zu setzen: $h_1^{(1)} \sim x$; $h_2^{(1)} \sim y$; $h_3^{(1)} \sim z$; $h_1^{(2)} \sim x^3 - \frac{3}{5} x r^2$; usw.

und

$$\begin{aligned} M_{13}^{(i)} &= -H_2 G^{(i)} = -M_{31}^{(i)}, \\ M_{23}^{(i)} &= H_1 G^{(i)} = -M_{32}^{(i)}. \end{aligned} \quad (39)$$

(Zur Herleitung dieser Ergebnisse verweisen wir auf Anhang B.) Ferner sind noch die in der Matrix c_{il} enthaltenen b_{il} zu untersuchen. Mit der Definition (37) gilt

$$b_{il} = \sum_{\alpha, \beta=1}^3 H_\alpha H_\beta \int g_{i\alpha} g_{l\beta} d\tau, \quad (40)$$

oder in der ausführlichen Schreibweise:

$$b_{sr}^{jj'} = \sum_{\alpha, \beta=1}^3 H_\alpha H_\beta \int g_{s\alpha}^{(j)} g_{r\beta}^{(j')} d\tau \left(j, j' = 1, \dots, N \right). \quad (40)$$

Beschränkt man sich auf kubische Symmetrie, so erhalten die Matrixelemente folgende Form

$$\begin{aligned} b_{11}^{jj'} &= \alpha_{jj'} H_1^2 + \beta_{jj'} (H_2^2 + H_3^2), \\ b_{12}^{jj'} &= \gamma_{jj'} H_1 H_2. \end{aligned} \quad (41)$$

Die übrigen Matrixelemente erhält man durch zyklische Vertauschung der Indizes s und r . Die Größen α, β, γ stehen für

$$\begin{aligned} \alpha_{jj'} &= \int g_{11}^{(j)} g_{11}^{(j')} d\tau, \\ \beta_{jj'} &= \int g_{12}^{(j)} g_{12}^{(j')} d\tau, \\ \gamma_{jj'} &= \int \{g_{11}^{(j)} g_{22}^{(j')} + g_{12}^{(j)} g_{21}^{(j')}\} d\tau. \end{aligned} \quad (42)$$

Im Anhang B werden die Eigenschaften der a_{il} untersucht, und insbesondere wird gezeigt, daß sie in der niedrigsten Näherung verschwinden.

In der niedrigsten Näherung des Verfahrens zur Berechnung des Leitfähigkeitstensors beschränkt man sich auf das niedrigste Funktionstripel: In der alten Schreibweise $\{h_1, h_2, h_3\}$, in der neuen Schreibweise $\{h_1^{(1)}, h_2^{(1)}, h_3^{(1)}\}$. Man kann also den oberen Index weglassen. Der Übersichtlichkeit wegen seien die in dieser Näherung enthaltenen Größen zusammengestellt:

$$\begin{aligned} X_1 &= -\frac{e}{4\pi^3} \int \bar{X}_s h_s d\tau; \\ L &= \int \frac{\partial f_0}{\partial E} v_s L(h_s) d\tau; \\ G &= \int \frac{\partial f_0}{\partial E} v_1 g_{23} d\tau; \end{aligned}$$

Die Ausrechnung ergibt unter Verwendung von (43):

$$\begin{aligned} \frac{D}{X_1} \cdot \sigma_{11} &= l^2 L + L l \alpha (H_2^2 + H_3^2) + L l \beta (H^2 + H_1^2) + L \alpha^2 H_2^2 H_3^2 + L \alpha \beta (H_2^4 + H_3^4 + H_1^2 [H_2^2 + H_3^2]) \\ &\quad + L \beta^2 (H_1^2 H^2 + H_2^2 H_3^2) - \gamma^2 L H_2^2 H_3^2. \end{aligned} \quad (45)$$

Für die Determinante findet man

$$\begin{aligned} D &= l^3 + l^2 (\alpha + 2\beta) H^2 + l \beta (\beta + \alpha) H^4 + l \alpha \beta (H_1^4 + H_2^4 + H_3^4) + l (\alpha^2 + \beta^2 - \gamma^2) (H_1^2 H_2^2 + H_1^2 H_3^2 \\ &\quad + H_2^2 H_3^2) + \alpha \beta^2 (H_1^6 + H_2^6 + H_3^6) + \beta (\alpha \beta + \beta^2 + \alpha^2 - \gamma^2) [H_1^4 (H_2^2 + H_3^2) + H_2^4 (H_1^2 + H_3^2) \\ &\quad + H_3^4 (H_1^2 + H_2^2)] + (3\alpha \beta^2 + 2\beta^3 + \alpha^3 - 3\alpha \gamma^2 + 2\gamma^3) H_1^2 H_2^2 H_3^2. \end{aligned} \quad (46)$$

$$l = \int L(h_s) L(h_s) d\tau$$

$$(s = 1, 2, 3)$$

$$\alpha = \int (g_{11})^2 d\tau; \quad \beta = \int (g_{12})^2 d\tau,$$

$$\gamma = \int \{g_{11} g_{22} + g_{12} g_{21}\} d\tau,$$

$$\begin{aligned} c_{11} &= l + \alpha H_1^2 + \beta (H_2^2 + H_3^2), \\ c_{12} &= \gamma H_1 H_2. \end{aligned} \quad (43)$$

Die übrigen c_{il} erhält man durch zyklische Vertauschung.

III. Berechnung des Leitfähigkeitstensors in erster Näherung

Mit den Ergebnissen des letzten Abschnitts wird nun die Berechnung der Integrale, die im Ausdruck (31) für den Leitfähigkeitstensor enthalten sind, ganz wesentlich vereinfacht.

Für die erste Näherung hat man $N=3$ zu setzen, denn wie wir sahen, gehört immer ein Tripel von Funktionen h_i zusammen. Würde man nur $N=1$ betrachten, so wäre damit eine der unabhängigen Variablen (k_x, k_y, k_z) in unphysikalischer Weise ausgezeichnet.

Wir betrachten also

$$\sigma_{sr} = -\frac{e}{8\pi^3} \sum_{i,l=1}^3 (c^{-1})_{il} \{X_{rl} T_{si} + X_{sl} J_{ri}\}. \quad (44)$$

Es wurde gezeigt, daß $X_{rl}=0$ für $l \neq r$. Ferner zerfallen T_{si} und J_{si} in $L_{si} - M_{si}$ bzw. $L_{si} + M_{si}$, von denen wir wissen, daß $L_{si}=0$ für $i \neq s$ und $M_{si}=0$ für $i=s$. Außerdem ist in dieser Näherung wegen $a_{il}=0$ die inverse Matrix c^{-1} eine gerade Funktion des Magnetfeldes: $(c^{-1}(\mathbf{H}))_{il} = (c^{-1}(-\mathbf{H}))_{il}$.

Damit erhält man für σ_{11}

$$\sigma_{11} = -\frac{e}{4\pi^3} X_{11} (c^{-1})_{11} L_{11},$$

oder nach (43):

$$\sigma_{11} = X_1 L \frac{c_{22} c_{33} - c_{23}^2}{D},$$

wo D die 3-reihige Determinante aus den c_{il} ist.

Ferner liefert Gl. (44)

$$\begin{aligned} \frac{D}{X_1} \cdot \sigma_{12} = & -L \gamma H_1 H_2 [l + \beta (H_1^2 + H_2^2) + (\alpha - \gamma) H_3^2] \\ & - H_3 G \{ l^2 + \beta l H^2 + l [\frac{1}{2} (\alpha + \beta + \gamma) (H_1^2 + H_2^2) + \alpha H_3^2] \\ & + \frac{\beta}{2} (\alpha + \beta + \gamma) (H_1^4 + H_2^4) + \alpha \beta H_3^4 + (\alpha \beta + \beta^2 - \gamma^2 + \alpha \gamma) H_1^2 H_2^2 \\ & + \frac{1}{2} (\alpha^2 + 2 \beta^2 - \gamma^2 + \alpha \beta + \beta \gamma) (H_1^2 H_3^2 + H_2^2 H_3^2) \} . \end{aligned} \quad (47)$$

$\sigma_{23}(\mathbf{H})$ und $\sigma_{13}(\mathbf{H})$ erhält man aus σ_{12} durch die Ersetzungen:

$$\sigma_{23}(\mathbf{H}) = \sigma_{12}(H_1 \rightarrow H_2, H_2 \rightarrow H_3, H_3 \rightarrow H_1), \quad \sigma_{13}(\mathbf{H}) = \sigma_{12}(H_1, H_2 \rightarrow H_3, H_3 \rightarrow -H_2);$$

$\sigma_{22}(\mathbf{H})$ und $\sigma_{33}(\mathbf{H})$ gehen aus $\sigma_{11}(\mathbf{H})$ durch zyklische Vertauschung hervor.

Aus den angegebenen Formeln lassen sich alle galvanomagnetischen Effekte berechnen. Versteht man unter $\sigma(\mathbf{H})$ den Leitwert in der Stromrichtung, so ist die magnetische Widerstandsänderung gegeben durch

$$\frac{\Delta \varrho}{\varrho_0} = \frac{\varrho(\mathbf{H}) - \varrho_0}{\varrho_0} = \frac{\sigma_0 - \sigma(\mathbf{H})}{\sigma(\mathbf{H})}.$$

Liegt der Strom in der [100]-Richtung, so ist $\sigma(\mathbf{H}) = \Delta(\mathbf{H}) / \Delta_{11}(\mathbf{H})$, wobei $\Delta(\mathbf{H})$ die Determinante des Leitfähigkeitstensors und $\Delta_{11}(\mathbf{H})$ die zu σ_{11} gehörige Unterdeterminante bedeuten. Beschränkt man sich bei der Berechnung dieser Größen auf vierte Potenzen im Magnetfeld, so wird

$$\frac{\Delta \varrho}{\varrho_0} = \frac{\alpha' H_1^2 + (\beta' - \delta^2) (H_2^2 + H_3^2) + 2 \{ [\alpha' \beta' - \delta^2 (\alpha' + 2 \beta')] H^2 + 2 \beta'^2 (H_2^2 + H_3^2) + [\delta^2 (\alpha' + 2 \beta') + \alpha' (\alpha' + \beta')] H_1^2 \} H^2 + [\alpha' \delta^2 H_1^2 + \delta^2 (\beta' + \gamma') (H_2^2 + H_3^2)] H_1^2}{1 + [2 (\alpha' + 2 \beta') + \delta^2] H^2 + [\alpha'^2 + 6 \beta'^2 + 6 \alpha' \beta' + 2 \delta^2 (\alpha' + 2 \beta')] H^4 + 2 [(\alpha'^2 + \beta'^2 - \gamma'^2) (H_1^2 H_2^2 + H_1^2 H_3^2 + H_2^2 H_3^2) + \alpha' \beta' (H_1^4 + H_2^4 + H_3^4)]} \quad (48)$$

Dabei ist $\alpha' = \alpha/l$, $\beta' = \beta/l$, $\gamma' = \gamma/l$ und $\delta = G/L$.

Hieraus ergibt sich für die Winkelabhängigkeit der transversalen magnetischen Widerstandsänderung ($H_1 = 0$; φ Winkel zwischen \mathbf{H} und z -Achse \triangleq [001]-Richtung)

$$\left. \frac{\Delta \varrho}{\varrho_0} \right|_{\text{trans}} = \frac{(\beta' - \delta^2) H^2 + 2 (2 \beta' + \alpha') (\beta' - \delta^2) H^4}{1 + [2 (\alpha' + 2 \beta') + \delta^2] H^2 + [\alpha'^2 + 6 \beta'^2 + 8 \alpha' \beta' + 2 \delta^2 (\alpha' + 2 \beta')] H^4 + 2 (\alpha'^2 + \beta'^2 - \gamma'^2 - 2 \alpha' \beta') H^4 \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi} \quad (49)$$

bzw. bei Drehung des Magnetfeldes in der (010)-Ebene ($H_2 = 0$; ψ Winkel zwischen \mathbf{H} und [001]-Richtung)

$$\left. \frac{\Delta \varrho}{\varrho_0} \right|_{\text{(long)}} = \frac{(\alpha' \sin^2 \psi + (\beta' - \delta^2) \cos^2 \psi) H^2 + \{ [\delta^2 (3 \alpha' + 4 \beta') + 2 \alpha' (\alpha' + \beta')] \sin^2 \psi + 2 (\alpha' \beta' - \delta^2 (\alpha' + 2 \beta')) + 4 \beta'^2 \cos^2 \psi + \delta^2 (\beta' + \gamma' - \alpha') \sin^2 \psi \cos^2 \psi \} H^4}{1 + [2 (\alpha' + 2 \beta') + \delta^2] H^2 + [\alpha'^2 + 6 \beta'^2 + 8 \alpha' \beta' + 2 \delta^2 (\alpha' + 2 \beta')] H^4 + 2 (\alpha'^2 + \beta'^2 - \gamma'^2 - 2 \alpha' \beta') H^4 \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi} \quad (50)$$

Dem Wert $\psi = \pi/2$ entspricht dann der reine Längseffekt. Ein in unserer Näherung magnetfeldabhängiger Ausdruck für den HALL-Koeffizienten läßt sich in ähnlicher Weise berechnen.

Die Formel (49) für die transversale Widerstandsänderung wird mit Messungen von JUSTI und SCHEFFERS¹² an Wolfram verglichen. Bei einem Magnetfeld von 18,6 kG und 4,2 °K ist $\Delta \varrho = \varrho(H) - \varrho_0$ in sehr guter Näherung durch die gemessenen Werte

von $\varrho(H)$ in Abhängigkeit vom Winkel φ zu ersetzen. Die Anpassung wird so vorgenommen, daß man in der Funktion $\Delta \varrho(\varphi) = (a + b \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi)^{-1}$ die Konstanten a und b bestimmt. Diese einfache Winkelabhängigkeit entspricht recht gut dem beobachteten Verlauf des Widerstandes, reicht allerdings zur Beschreibung der ausgeprägten Minima nicht aus, die auftreten, wenn die Magnetfeldrichtung mit den Kristallachsen zusammenfällt. Die Abweichungen bleiben jedoch unterhalb 10% (Abb. 1). An die Stelle eines vierzähligen Drehdiagramms nach (49) tritt bei Drehung des Magnetfeldes in der (010)-

¹² E. JUSTI u. H. SCHEFFERS, Phys. Z. **37**, 700 [1936]; **38**, 891 [1937].

Ebene ein Diagramm zweizähliger Symmetrie, wie es den Messungen von JUSTI und SCHEFFERS entspricht. Der verschwindende Längseffekt ($\psi = \pi/2$) ist ein Hinweis darauf, daß der Koeffizient α' für Wolfram klein gegenüber den anderen Koeffizienten ist.

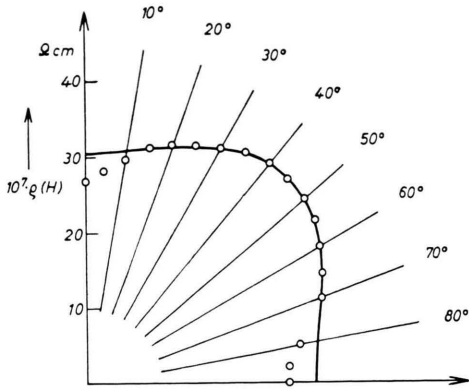


Abb. 1. Widerstandsdiagramm für Wolfram bei 4,2 °K und 18,6 kG. Kreise: Meßpunkte nach JUSTI und SCHEFFERS. Ausgezogene Kurve berechnet nach Gl. (49), angepaßt bei den Winkeln $\varphi = 15^\circ$ und 35° .

IV. Diskussion

Die Integrodifferentialgleichung für die Verteilungsfunktion der Ladungsträger wurde bei Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes nach einem Verfahren von ENSKOG näherungsweise gelöst. Die gesuchte Verteilungsfunktion ist dabei nach solchen Funktionen entwickelt worden, die in bestimmter Weise mit Hilfe des Operators der vollen BOLTZMANN-Gleichung orthogonalisiert wurden. Dies ist eine Verallgemeinerung eines schon früher bei der magnetfeldfreien BOLTZMANN-Gleichung verwendeten Verfahrens¹³.

Während die Konvergenz der Näherungslösung im Falle der reinen Integralgleichung von ENSKOG nachgewiesen wurde, können wir für die Integrodifferentialgleichung keine allgemeinen Aussagen machen. Da jedoch zur Bestimmung der Transportkoeffizienten nicht die Lösung selbst, sondern nur Integrale über die Lösung interessieren, genügt eine Konvergenz der Reihe (18) im Quadratmittel. Eine nähere Untersuchung dieses Fragenkomplexes ist nicht Ziel dieser Arbeit.

Zur expliziten Berechnung der Koeffizienten α , β , γ usw. braucht man einerseits zusätzlich Annahmen

über die Form der Energieflächen und ein Modell für die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Gitter, andererseits wird die Güte jeder Näherungslösung von einer geschickten Wahl der Entwicklungsfunktion h_i abhängen. Ähnlich wie bei Verwendung des Variationsverfahrens zur Berechnung von Transportgrößen gibt es dazu kein feststehendes Auswahlprinzip.

KOHLER⁷ und SEITZ⁸ haben die allgemeine Form des Widerstands- bzw. Leitfähigkeitstensors bei Anwesenheit eines Magnetfeldes in einem kubischen Kristall hergeleitet unter der Annahme, daß man sich auf quadratische Glieder in \mathbf{H} beschränken kann. Der von uns berechnete Leitfähigkeitstensor stellt eine Verallgemeinerung dieser Ergebnisse dar und reduziert sich bei Vernachlässigung höherer als quadratischer Glieder auf die bekannte Form. Die Bedeutung der von uns eingeführten Koeffizienten und ihr Zusammenhang mit den von KOHLER und SEITZ verwendeten wird in der quadratischen Näherung besonders durchsichtig. Zunächst ist die magnetfeldfreie Leitfähigkeit gegeben durch $\sigma_0 = X_1 L/l$, wobei alle drei Größen temperaturabhängig sind. Für den Widerstandstensor findet man die Komponenten

$$\varrho_{11} = \varrho_0 \left\{ 1 + \frac{\alpha}{l} H_1^2 + \left(\frac{\beta}{l} - \frac{G^2}{L^2} \right) (H_2^2 + H_3^2) \right\},$$

$$\varrho_{12} = \varrho_0 \left\{ \frac{G}{L} H_3 + \left(\frac{G}{L} \right)^2 H_1 H_2 + \frac{\gamma}{l} H_1 H_2 \right\}.$$

Hierbei sind α , β , γ , G temperaturunabhängig und werden durch die Form der Energieflächen $E(\mathbf{k})$ bestimmt. Für den HALL-Koeffizienten ergibt sich bei schwachen Magnetfeldern $A_H = -G/L \sigma_0$ und für die transversale und longitudinale Widerstandsänderung

$$\left. \frac{\Delta \varrho}{\varrho_0} \right|_{\text{trans}} = (\beta' - \delta^2) H^2,$$

$$\left. \frac{\Delta \varrho}{\varrho_0} \right|_{\text{(long)}} = \alpha' H_1^2 + (\beta' - \delta^2) H_3^2.$$

Eine Vorschrift zur experimentellen Bestimmung der Zahlen α' , β' , γ' , δ hat bereits KOHLER⁷ angegeben. Bei isotropen Körpern gilt zwischen den Koeffizienten die Relation $\gamma = \alpha - \beta$. (In der Bezeichnungsweise von SEITZ⁸ verschwindet das dort verwendete δ .)

Beim Vergleich unseres Ergebnisses (49) mit der Gl. (5.3) für die transversale Widerstandsänderung von GARCIA-MOLINER⁴ (bei Beschränkung auf Glieder von höchstens 4. Potenz in \mathbf{H}) treten Diskrepan-

¹³ R. KLEIN, Z. Naturforsch. **16a**, 116 [1961].

zen auf. In die Formel (49) geht die Winkelabhängigkeit im Unterschied zu Gl. (5.3) der genannten Arbeit nur im Nenner ein. Alle winkelabhängigen Terme sind bei GARCIA-MOLINER mit einem Faktor $(\mu - \nu - \Theta)$ multipliziert, der bei Einsetzen aller in der Arbeit angegebenen Abkürzungen jedoch exakt verschwindet. In der Näherung schwacher Magnetfelder fehlt dann z. B. in σ_{11} das zu H_1^2 proportionale Glied, woraus sich auch das Verschwinden der longitudinalen Widerstandsänderung erklärt. Die von GARCIA-MOLINER angegebene Formel (4.8) reduziert sich also bei Entwicklung nach steigenden Potenzen von H bis zu quadratischen Gliedern einschließlich nicht auf die von SEITZ⁸ bzw. KOHLER⁷ angegebene Form.

Wir danken den Herren Professoren M. KOHLER und H. G. REIK für ihr Interesse an dieser Arbeit und Herrn Dipl.-Math. H. BECKER für viele klärende Diskussionen.

Anhang A

$\psi_i^{(\nu)}$ gehöre zur i -ten Zeile der ν -ten Darstellung der Symmetriegruppe des Kristalls. Da der die Wechselwirkung beschreibende Integralkern $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ eine Invariante bei gleichzeitiger Anwendung einer Decktransformation R bezüglich \mathbf{k} und \mathbf{k}' ist, gilt für das Stoßglied:

$$\begin{aligned} O_R \{L \psi_i^{(\nu)}\} &= O_R \int V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \{ \psi_i^{(\nu)}(\mathbf{k}) - \psi_i^{(\nu)}(\mathbf{k}') \} d\tau' \\ &= \int V(R^{-1}\mathbf{k}, R^{-1}\mathbf{k}') \{ \psi_i^{(\nu)}(R^{-1}\mathbf{k}) - \psi_i^{(\nu)}(R^{-1}\mathbf{k}') \} d\tau' \\ &= \int V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \{ O_R \psi_i^{(\nu)}(\mathbf{k}) - O_R \psi_i^{(\nu)}(\mathbf{k}') \} d\tau' \\ &= L \{ O_R \psi_i^{(\nu)} \}, \end{aligned}$$

d. h. der Stoßoperator ist mit dem Operator O_R vertauschbar. Man weiß damit aber auch, daß die Funktion $L \psi_i^{(\nu)}$ ebenfalls zur i -ten Zeile der ν -ten Darstellung gehört¹⁴.

Anhang B

Die Struktur der Koeffizienten a_{il} läßt sich am besten erkennen, wenn man in der Definitionsgleichung (in der ausführlichen Schreibweise)

$$a_{st}^{ik} = \int L(h_s^{(i)}) M(h_t^{(k)}) d\tau + \int L(h_t^{(k)}) M(h_s^{(i)}) d\tau$$

unter Verwendung des Ergebnisses aus Anhang A $L(h_s^{(i)}) \equiv \psi_s^{(i)}$ setzt und den Magnetfeldoperator mit Hilfe des in Gl. (37) definierten Vektors $\mathbf{g}_t^{(k)}$ durch $M(h_t^{(k)}) = \mathbf{H} \cdot \mathbf{g}_t^{(k)}$ ausdrückt:

$$a_{st}^{ik} = \mathbf{H} \cdot \int \psi_s^{(i)} \mathbf{g}_t^{(k)} d\tau + \mathbf{H} \cdot \int \psi_t^{(k)} \mathbf{g}_s^{(i)} d\tau.$$

Wir behandeln zunächst den einfachsten Fall $i=k$, d. h. $\psi_s^{(i)}$ und $\mathbf{g}_t^{(k)}$ werden mit Funktionen $h_s^{(i)}$ gebildet, die für $s=1, 2, 3$ ein zusammengehöriges Funktionentripel der Vektordarstellung bilden.

Speziell für $s=1, t=2$ ist der erste Summand \bar{a}_{st}^{ii} im Ausdruck für a_{st}^{ii} :

$$\bar{a}_{12}^{ii} = H_1(\psi_1^{(i)}, g_{21}^{(i)}) + H_2(\psi_1^{(i)}, g_{22}^{(i)}) + H_3(\psi_1^{(i)}, g_{23}^{(i)}).$$

Durch eine Drehung des Koordinatensystems mit π um die z -Achse gehen die zu H_1 und H_2 gehörigen Integrale in ihr Negatives über, müssen also verschwinden. Dies gilt auch für die entsprechenden Glieder in \bar{a}_{21}^{ii} . Vom verbleibenden dritten Integral $(\psi_1^{(i)}, g_{23}^{(i)})$ zeigt man sofort, daß es z. B. bei einer Drehung mit dem Winkel $-\pi/2$ um die z -Achse in $-(\psi_2^{(i)}, g_{13}^{(i)})$ übergeht. Folglich ist

$$a_{12}^{ii} = H_3 \{ (\psi_1^{(i)}, g_{23}^{(i)}) + (\psi_2^{(i)}, g_{12}^{(i)}) \} = 0$$

für alle i , ein Resultat, welches für alle möglichen Kombinationen von s und t gilt, solange $i=k$ ist. Für $s=t$ verschwinden die beiden Anteile zu a_{st}^{ii} identisch.

Sobald jedoch $i \neq k$ wird, kann man auf dem gleichen Wege wie eben nur noch

$$a_{st}^{ik} = 0$$

beweisen. Gehören nämlich die Funktionen $h_s^{(i)}$ und $h_t^{(k)}$ zu verschiedenen Zeilen und verschiedenen Funktionentripeln, so kann es nicht gelingen, durch Wahl einer geeigneten Symmetrioperation aus einer zu einer bestimmten Zeile gehörigen Funktion $h_s^{(i)}$ ein zu einer anderen Funktionenfamilie gehöriges $h_t^{(k)}$ zu erzeugen. Damit ist es im allgemeinen unmöglich, durch eine geeignet gewählte Decktransformation zu zeigen, daß die beiden Integrale $\bar{a}_{st}^{ik} + \bar{a}_{ts}^{ki}$ sich gerade kompensieren, wie dies für den Fall $i=k$ gerade angegeben wurde. Selbstverständlich kann man durch gruppentheoretische Überlegungen die Zahl der voneinander verschiedenen Koeffizienten a_{st}^{ik} ermitteln. Da wir bei den Anwendungen nur die erste Näherung ($i=k=1$) betrachten, können wir auf eine nähere Untersuchung gemischter Größen a_{st}^{ik} ($i \neq k$) verzichten.

Auf dem in diesem Anhang skizzierten Wege erhält man auch die in (38), (39) und (41) angegebenen Beziehungen für $M_{st}^{(i)}$ und b_{st}^{ik} .

¹⁴ E. WIGNER, Gruppentheorie, Vieweg, Braunschweig 1931, S. 125.