Galvanomagnetische, thermoelektrische und thermomagnetische Eigenschaften von Wismut-Tellurid für beliebige Magnetfelder

Udo Hübner

Technische Hochschule Braunschweig, Institut D für Mathematik *

(Z. Naturforschg. **22 a**, 2086—2096 [1967]; eingegangen am 25. Juli 1967)

The four matrices of the electrical and the energy current densities are derived for bismuth-Telluride in arbitrary magnetic fields on the basis of Drabble's six-ellipsoid-model. The scattering time will be taken anisotropic but not necessarily diagonal in the same system as the mass tensor. The starting point is Boltzmann's transport equation in its region of validity. These four matrices are converted to resistance, absolute thermopower, Peltier coefficient and electronic part of the heat conductivity for vanishing magnetic field and for magnetic fields parallel to the trigonal and the binary axis of the crystal. Saturation formulas for all directions of the magnetic field are deduced. Four resistance components mesured in dependence of the magnitude of the magnetic field are used to evaluate the band parameters which are different once more from data of Drabble and Testardi; but they are independent of the magnitude of the magnetic field within the limit of error.

1. Einleitung

1956 schlug Drabble für Wismut-Tellurid ein Mehrellipsoid-Bändermodell vor. Danach besitzt das Transportband auf den Spiegelebenen des reziproken Gitters (Kristallklasse von Bi_2Te_3: $R\overline{3}m$ [1,2]) mehrere Extrema, deren Anzahl und Lage durch die Symmetrie-Elemente des Kristalls bestimmt sind. In der Näherung quadratischer Abhängigkeit der Energie E vom Wellenvektor $\mathfrak{k}$ sind die Flächen konstanter Energie Sätze ähnlicher Ellipsoide mit den Mittelpunkten in den Extrema. Die Analyse galvanomagnetischer Daten, gemessen bei 77 °K, führte Drabble [3] 1958 auf ein Sechs-Ellipsoid-Modell.

Arbeiten von Landwehr [4,5] und Testardi [6] bestätigten das Modell. Allerdings bleibt noch offen, ob diese Ellipsoide auf den Spiegelebenen oder den binären Achsen liegen; beides führt zu denselben Ergebnissen.

Die deutlich differierenden Parametergruppen von Proben verschiedener Trägerkonzentrationen sowie die anomale Temperaturabhängigkeit des Hall-Koeffizienten bei p-Bi_2Te_3 fanden eine Erklärung durch die von Korenblit [7], Efimova u.a. [8] und Testardi [6] eingeführte anisotrope Streuzeit.

Damit sind die Modell-Voraussetzungen im wesentlichen geklärt, mit denen die vier Transportkoeffizienten der Strom- und Wärmeleitung berechnet werden können. Die bisher durchgeführten Analysen beschränkten sich jedoch auf die Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit für die Grenzfälle kleiner [3,6,7,8,9,10] bzw. starker [4,5,6] (bis 185 kG) Magnetfelder sowie den Seebeck-Koeffizienten. Aus diesem Grund werden hier die theoretischen Ausdrücke der Transportkoeffizienten für beliebige Magnetfelder abgeleitet; beliebig jedoch nur im Gültigkeitsbereich der Boltzmannschen Transportgleichung, die den Ausgangspunkt der Rechnungen bilden soll. Diese schließen sich an die grundlegenden Arbeiten von Drabble und Wolfe [9] 1956 an. Allerdings wird der bequemere Formalismus von Keyes [11] benutzt.

* Ergänzter Auszug aus der Diplomarbeit des Verfassers; ausgeführt im Institut A für theoretische Physik der Technischen Hochschule Braunschweig, Braunschweig 1966.

1 M. H. Francombe, Brit. J. Appl. Phys. **9**, 415 [1958].
2 P. W. Lange, Naturwiss. **27**, 133 [1939].
3 J. R. Drabble, Proc. Phys. Soc. London **72**, 380 [1958].
4 K. Auch u. G. Landwehr, Z. Naturforschg. **18a**, 424 [1963].
5 G. Landwehr u. P. Drath, Physique des Semiconducteurs, Comptes Rendus du 7' Congrès International, S. 669ff., Paris 1964.
6 L. R. Testardi, Dissertation, Univ. von Pennsylvanien, USA, Philadelphia 1963.
7 I. Korenblit, Sov. Phys. Solid State, **2**, 2738 [1961].
8 B. A. Efimova, I. Ya. Korenblum, V. I. Novikov u. A. G. Ostroumov, Sov. Phys. Solid State **3**, 2004 [1962].
9 J. R. Drabble u. R. Wolfe, Proc. Phys. Soc. London B **69/2**, 1101 [1956].
10 J. R. Drabble, R. D. Groves u. R. Wolfe, Proc. Phys. Soc. London **71**, 430 [1958].
11 R. W. Keyes, J. Electronics **2**, 279 [1956].

2. Voraussetzungen

a) Die Rechnungen werden für p-Leitung ausgeführt.

b) Die 6 Maxima des Valenzbandes liegen auf den 3 Spiegelebenen in den Punkten $\mathfrak{k}_0^{(i)}$, deren gegenseitige Lage durch die Symmetrieoperationen der Kristallklasse $\mathrm{R}\overline{3}\,\mathrm{m}$ festgelegt ist.

c) Für die Abhängigkeit der Energie vom Wellenvektor gilt in guter Näherung

$$E_0 - E_k = E = (\hbar^2/2\,m_0)\,\alpha_{ij}\,k_i\,k_j\,. \tag{2.1}$$

Darin sind E_0 die maximale Energie im Band und $(\alpha_{ij}) \cdot (1/m_0)$ der reziproke Massentensor. Über wiederkehrende Indices in Produkten ist hier wie im folgenden grundsätzlich zu summieren.

d) Streuprozesse seien nur Übergänge zwischen Zuständen, die zum selben Extremum gehören. Damit können die Extrema unabhängig voneinander behandelt werden.

e) Die Streuzeit ist anisotrop. Ihre Energieabhängigkeit wird in der Form

$$\tau_{ij} = \tau'_{ij} \cdot \varphi(x) \tag{2.2}$$

berücksichtigt. Die τ'_{ij} sind Anisotropie-Koeffizienten, die von der Temperatur und von der Trägerdichte abhängen. Im Ellipsoidsystem sind in $(\tau'_{\mathrm{e},ij})$ außer den drei Diagonalkomponenten nur $\tau'_{\mathrm{e},13}$ und $\tau'_{\mathrm{e},31}$ von Null verschieden[7]. Damit hat die Streuzeit nur 4 voneinander unabhängige Komponenten, da zur Erfüllung der ONSAGER-Relationen im Ellipsoidsystem

$$\tau'_{\mathrm{e},13}/\tau'_{\mathrm{e},31} = m_1/m_3 \tag{2.3}$$

gelten muß. (2.3) führt auf ein symmetrisches Produkt der Matrizen $(\alpha_{\mathrm{e},ij})$ und $(\tau'_{\mathrm{e},ij})$.

Der isotrope, dimensionslose Faktor $\varphi(x)$,

$$x = E/k\,T\,,$$

bildet den energieabhängigen Anteil, der meist in der Form $\varphi(x) = x^\lambda$ geschrieben wird ($\lambda = -1/2$ für Streuung durch akustische Phononen, $\lambda = 3/2$ für Streuung an ionisierten Störstellen).

3. Phänomenologische Beziehungen

Bei Anwesenheit elektrischer ($\mathfrak{E}$) und magnetischer ($\mathfrak{H}$) Felder sowie von Temperaturgradienten sind die Transportgleichungen für die i-ten Komponenten der elektrischen Stromdichte j_i bzw. der Energie-Stromdichte q_i

$$\begin{aligned} j_i &= \sigma_{ik}(\mathfrak{H})\,E_k^* + M_{ik}(\mathfrak{H})\,\partial T/\partial x_k\,,\\ q_i &= N_{ik}(\mathfrak{H})\,E_k^* + L_{ik}(\mathfrak{H})\,\partial T/\partial x_k\,. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Es ist $E_k^* = E_k - (1/e_0) \cdot \partial\zeta/\partial x_k$ die effektiv gemessene elektrische Feldstärke, E_k die k-te Komponente des elektrischen Feldes, ζ das FERMI-Niveau und e_0 die Elementarladung. Für p-Leitung gilt $e_0 > 0$. Andererseits sei

$$\begin{aligned} E_i^* &= \varrho_{ik}(\mathfrak{H})\,j_k + \alpha_{ik}(\mathfrak{H}) \cdot \partial T/\partial x_k\,,\\ q_i &= \pi_{ik}(\mathfrak{H})\,j_k - \varkappa_{ik}(\mathfrak{H}) \cdot \partial T/\partial x_k\,. \end{aligned} \tag{3.2}$$

σ_{ik}, M_{ik}, N_{ik} und L_{ik} erhält man bei der theoretischen Betrachtung des Transportproblems direkt, während ϱ_{ik}, α_{ik}, π_{ik} und $\varkappa_{ik}$ in der Regel experimentell gemessen werden.

Die Beziehung zwischen (3.1) nnd (3.2) wird durch

$$\begin{aligned} (\varrho_{ik}) &= (\sigma_{ik})^{-1}\,, & \alpha_{ik} &= -\,\varrho_{ij}\,M_{jk}\,,\\ \pi_{ik} &= N_{ij}\,\varrho_{jk}\,, & \varkappa_{ik} &= N_{ij}\,\varrho_{jl}\,M_{lk} - L_{ik} \end{aligned} \tag{3.3}$$

hergestellt. Für alle Transportmatrizen gelten außerdem die ONSAGER-Relationen, wie z. B.

$$\sigma_{ik}(\mathfrak{H}) = \sigma_{ki}(-\mathfrak{H})\,. \tag{3.4}$$

Den PELTIER-Koeffizienten berechnet man nicht direkt, sondern aus

$$\pi_{ik}(\mathfrak{H}) = T\,\alpha_{ki}(-\mathfrak{H})\,. \tag{3.5}$$

4. Lösung der Boltzmann-Gleichung für ein Ellipsoid

Die Ausgangsgleichungen sind

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{e_0}{4\,\pi^3}\iiint v_i\,f\,\mathrm{d}^3k\,,\\ q_i &= \frac{1}{4\,\pi^3}\iiint v_i\,(E-\zeta)\,f\,\mathrm{d}^3k \end{aligned} \tag{4.1}$$

($e_0 > 0$ für p-Leitung, $v_i = i$-te Komponente der Ladungsträger-Geschwindigkeit).

f ist die durch elektrische und magnetische Felder sowie Temperaturgradienten gestörte Verteilungsfunktion der Ladungsträger. Sie wird aus der BOLTZMANN-Gleichung für den stationären Fall bestimmt,

$$\frac{e_0}{\hbar}\left(E_i + \frac{1}{c_0}\,\varepsilon_{ijk}\,v_j\,H_k\right)\partial f/\partial k_i + v_i\,\partial f/\partial x_i = (\partial f/\partial T)_{\text{Streuung}} \tag{4.2}$$

(c_0 = Lichtgeschwindigkeit im Vakuum,

H_k = k-te Komponente des Magnetfeldes,

ε_{ijk} = vollständig antisymmetrischer Tensor mit

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = +1\,, \quad \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = \varepsilon_{132} = -1)\,.$$

Der Ansatz (f_0 = Verteilungsfunktion im ungestörten Fall)

$$f = f_0 - \Phi\,\partial f_0/\partial E \tag{4.3}$$

führt mit den üblichen Näherungen

$$(e_0/\hbar)\,E_i \cdot \partial f/\partial k_i \approx (e_0/\hbar)\,E_i \cdot \partial f_0/\partial k_i$$
$$v_i \cdot \partial f/\partial x_i \approx v_i \cdot (\partial f_0/\partial T) \cdot \partial T/\partial x_i$$

auf eine Differentialgleichung für Φ. In diese wird die anisotrope Streuzeit über die zeitliche Änderung der Trägergeschwindigkeit eingeführt

$$(\partial v_i/\partial t)_{\text{Streuung}} = -\,((\tau)^{-1})_{ij}\,v_j\,, \tag{4.4}$$

wie sie KORENBLIT [7] bei der Berechnung der Streuzeit-Komponenten benutzt. $(\tau)^{-1}$ ist der reziproke Streuzeittensor.

Wegen

$$(\partial\Phi/\partial t)_{\text{Streuung}} = -\,(\partial\Phi/\partial v_i)\,((\tau)^{-1})_{ij}\,v_j$$

erhält man als Lösung für Φ

$$\Phi = e_0\,v_i\,\tau_{ij}[F_j + (e_0/c_0\,m_0)\,\varepsilon_{jkl}\,(\alpha\,\tau)_{kr}\,F_r\,H_l + (e_0/c_0\,m_0)^2\,\Delta\cdot((\alpha\,\tau)^{-1})_{jr}\cdot H_r\,H_s\,F_s] \times$$
$$\times\,[1 + (e_0/c_0\,m_0)^2\,\Delta\cdot H_r\,((\alpha\,\tau)^{-1})_{rs}\,H_s]^{-1}\,, \tag{4.5}$$

$$(\Delta = \operatorname{Det}(\alpha\,\tau)\,,\quad F_j = E_j^* - (k/e_0)\,(x-\eta)\,\partial T/\partial x_j\,,\quad \eta = \zeta/k\,T\,,\quad k = \text{BOLTZMANN-Konstante})\,. \tag{4.6}$$

(4.5) gilt ganz allgemein für ein Ellipsoid mit parabolischer $E(\mathfrak{k})$-Abhängigkeit und anisotroper Streuung bei Anwesenheit elektrischer und magnetischet Felder sowie Temperaturgradienten. Lediglich die Symmetrie des Matrixproduktes $(\alpha\,\tau)$ wurde hineingesteckt.

Für die folgenden Rechnungen werden einige Abkürzungen eingeführt:

$$p_{\mathrm{e},ik} = (\alpha_{\mathrm{e}}\,\tau_{\mathrm{e}}')_{ik} \quad \text{mit} \quad (\tau_{\mathrm{e}}') \text{ aus (2.2)},$$
$$\Delta' = \operatorname{Det}((\alpha_{\mathrm{e}}\,\tau_{\mathrm{e}}')_{ik}) = p_{\mathrm{e},22}\,(p_{\mathrm{e},11}\,p_{\mathrm{e},33} - p^2{}_{\mathrm{e},13})\,,\quad D = \operatorname{Det}(\alpha_{ik})\,, \tag{4.7}$$

$$I^{\mathrm{e}}_{mn} = -\,(e_0/c_0\,m_0)^n\,\frac{e_0^2\,p}{9\,m_0\,F_{1/2}(\eta)}\int\limits_0^\infty \frac{(x-\eta)^m\cdot\varphi^{n+1}\cdot x^{3/2}\cdot(\partial f_0/\partial x)\,\mathrm{d}x}{1 + (e_0/c_0\,m_0)^2\,\Delta'\varphi^2\cdot((p_{\mathrm{e}})^{-1})_{rs}\,H_r\,H_s}\,, \tag{4.8}$$

$$p = (3/\pi^2)\,(2\,m_0\,k\,T/\hbar^2\,D^{1/3})^{3/2}\,F_{1/2}(\eta) = \text{Trägerdichte}\,, \tag{4.9}$$

$$F_r(\eta) = \int\limits_0^\infty x^r\,f_0\,\mathrm{d}x = -\,\frac{1}{r+1}\int\limits_0^\infty x^{r+1}\,(\partial f_0/\partial x)\,\mathrm{d}x\,, \tag{4.10}$$

$$t^{\mathrm{e}}_{m0,ik} = I^{\mathrm{e}}_{m0}\,p_{\mathrm{e},ik}\,,\quad t^{\mathrm{e}}_{m1,ik} = \Delta'\,I^{\mathrm{e}}_{m1}\,\varepsilon_{ikj}\,((p_{\mathrm{e}})^{-1})_{jl}\,H_l\,,\quad t^{\mathrm{e}}_{m2,ik} = \Delta'\,I^{\mathrm{e}}_{m2}\,H_i\,H_k\,;(m = 0,1,2). \tag{4.11}$$

Mit den Abkürzungen (4.7) bis (4.11) lassen sich die vier Transportmatrizen für ein Ellipsoid bequem als Summen aus den 9 Matrizen ($t^{\mathrm{e}}_{mn,ik}$ schreiben:

$$\begin{aligned}
\sigma^{\mathrm{e}}_{ik} &= \;(t^{\mathrm{e}}_{00,ik} + t^{\mathrm{e}}_{01,ik} + t^{\mathrm{e}}_{02,ik})\,,\\
M^{\mathrm{e}}_{ik} &= -\,(k/e_0)\;(t^{\mathrm{e}}_{10,ik} + t^{\mathrm{e}}_{11,ik} + t^{\mathrm{e}}_{12,ik}) = -\,(1/T)\,N^{\mathrm{e}}_{ik}\,,\\
L^{\mathrm{e}}_{ik} &= -\,(k/e_0)^2\,T\,(t^{\mathrm{e}}_{20,ik} + t^{\mathrm{e}}_{21,ik} + t^{\mathrm{e}}_{22,ik})\,.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Die in den Lösungen enthaltenen I_{mn}^{e} entsprechen für $m=0$ und $\mathfrak{H}=0$ den ξ_n bei KEYES[11] bzw. DRABBLES[3] I_n oder TESTARDIS[6] I_n, nur daß KEYES und TESTARDI den Faktor $D^{-1/2}$ offensichtlich irrtümlich weggelassen haben. Dieser Faktor gelangt über die Zustandsdichte in die I_{mn}^{e} und damit in die Transportkoeffizienten. Da HERRING und VOGT[12] die Trägerdichte (4.9) verwenden, die diesen Faktor enthält, widerspricht das nicht ihrer Bedingung, wonach (α) und (τ) nur als Produkt auftreten.

5. Transformation auf Kristallachsen

Die Lösungen (4.12) gelten für ein Ellipsoid einer beliebigen Substanz im Ellipsoid-Hauptachsensystem. Sie sind für Bi_2Te_3 auf Hauptkristallachsen zu transformieren. Diese seien die x_1-, x_2- und x_3-Achse, wobei die x_3-Achse parallel zur trigonalen und die x_2-Achse parallel zu einer der binären Achsen des Kristalls liegen sollen. Die $(x_1 - x_3)$-Ebene bildet dann die zur binären Achse senkrechte Spiegelebene. In dieser liegt das Ellipsoid. Θ sei der Drehwinkel um die x_2-Achse, der die Hauptachsen des Ellipsoids in die Kristallachsen überführt. Dann lautet die Transformationsmatrix[9]

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} c & 0 & -s \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & c \end{pmatrix}; \quad \begin{matrix} c = \cos\Theta, \\ s = \sin\Theta. \end{matrix} \tag{5.1}$$

Da $\mathfrak{H}$ gleichzeitig der reziproken Transformation zu unterwerfen ist, werden auch die I_{mn} geändert. Im Kristallsystem gelte der Index c an Stelle von e.

Mit den transformierten Größen

$$\alpha_{\mathrm{c},ik} = a_{ij}\, a_{kl}\, \alpha_{\mathrm{e},jl}, \quad \tau'_{\mathrm{c},ik} = a_{ij}\, a_{kl}\, \tau'_{\mathrm{e},jl}, \tag{5.2}$$

wobei $\alpha_{\mathrm{e},jl} = \alpha_j \delta_{jl}$ ist (m_0/α_j = Ellipsoid-Hauptmassen; $j = 1, 2, 3$), folgt

$$p_{\mathrm{c},ik} = a_{ij}\, a_{kl}\, p_{\mathrm{e},jl} = \alpha_{\mathrm{c},ij}\, \tau'_{\mathrm{c},jk}. \tag{5.3}$$

Transformiert erhalten also (4.8), (4.11) und (4.12) lediglich statt des Index e den Index c.

6. Summation der Transportmatrizen aller Ellipsoide

In Bi_2Te_3 sind die 6 Ellipsoide durch folgende Symmetrie-Operationen zu erreichen[9]:

$$\begin{aligned}
&(\delta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; && (I) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \\
&(D_+) = \begin{pmatrix} c' & -s' & 0 \\ s' & c' & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; && (S_+) = \begin{pmatrix} -c' & s' & 0 \\ -s' & -c' & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (I)\,(D_+); \\
&(D_-) = \begin{pmatrix} c' & s' & 0 \\ -s' & c' & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; && (S_-) = \begin{pmatrix} -c' & -s' & 0 \\ s' & -c' & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (I)\,(D_-);
\end{aligned} \tag{6.1}$$

$$s' = \sin 120° = \sqrt{3}/2; \qquad c' = \cos 120° = -1/2.$$

(δ), (I) und die Inversionen in (S_+) und (S_-) geben nichts Neues. Die Gesamttransportmatrizen sind daher gleich dem Doppelten der Summe der durch (δ), (D_+) und (D_-) transformierten Transportmatrizen für ein Ellipsoid im Kristallsystem. Die durch (D_+) und (D_-) transformierten Matrizen erhalten statt des Index c jetzt + bzw. –, d. h. es gilt insgesamt

$$\begin{aligned}
\sigma_{ik} &= (t_{00,ik}) + t_{01,ik} + t_{02,ik}), \\
M_{ik} &= -(k/e_0)\,(t_{10,ik} + t_{11,ik} + t_{12,ik}) = -(1/T)\,N_{ik}, \\
L_{ik} &= -(k/e_0)^2\, T\,(t_{20,ik} + t_{21,ik} + t_{22,ik})
\end{aligned} \tag{6.2}$$

mit

$$t_{mn,ik} = 2\,[t_{mn,ik}^{\mathrm{c}} + t_{mn,ik}^{+} + t_{mn,ik}^{-}]; \quad (m, n = 0, 1, 2). \tag{6.3}$$

Um die $t_{mn,ik}$ bis auf die Auswertung der $I_{mn}^{\mathrm{c},+,-}$ angeben zu können, werden die Tensoren $(p_{\mathrm{c},+,-})^{-1}$ benötigt, die außerdem im Integranden der $I_{mn}^{\mathrm{c},+,-}$ enthalten sind. Verwendet man ähnlich wie im Fall

[12] C. HERRING u. E. VOGT, Phys. Rev. **101**, 944 [1956].

isotroper Streuzeit[3], hier allerdings für anisotrope Streuzeit, die bequemeren Parameter

$$u = \frac{p_{c,22}}{p_{c,11}} = \frac{(\alpha_c \tau_c')_{22}}{(\alpha_c \tau_c')_{11}}\,; \quad v = \frac{p_{c,33}}{p_{c,11}} = \frac{(\alpha_c \tau'_c)_{33}}{(\alpha_c \tau'_c)_{11}}\,,$$
$$w = \frac{p_{c,11}\, p_{c,33} - p_{c,13}^2}{p_{c,11}^2} = \frac{(\alpha_c \tau_c')_{11}\,(\alpha_c \tau_c')_{33} - (\alpha_c \tau_c')^2_{13}}{(\alpha_c \tau_c')^2_{11}}\,, \tag{6.4}$$

so wird

$$(p_{c,ij}) = p_{c,11} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{v-w} \\ 0 & u & 0 \\ \sqrt{v-w} & 0 & v \end{pmatrix},$$

$$(p_{\pm,ij}) = \frac{p_{c,11}}{4} \begin{pmatrix} 1+3u & \mp\sqrt{3}(1-u) & -2\sqrt{v-w} \\ \mp\sqrt{3}(1-u) & 3+u & \pm 2\sqrt{3(v-w)} \\ -2\sqrt{v-w} & \pm 2\sqrt{3(v-w)} & 4v \end{pmatrix},$$

$$([(p_c)^{-1}]_{ij}) = \frac{p^2{}_{c,11}}{\Delta'} \begin{pmatrix} uv & 0 & -u\sqrt{v-w} \\ 0 & w & 0 \\ -u\sqrt{v-w} & 0 & u \end{pmatrix}, \tag{6.5}$$

$$([(p_\pm)^{-1}]_{ij}) = \frac{p^2{}_{c,11}}{4\Delta'} \begin{pmatrix} uv+3w & \mp\sqrt{3}(uv-w) & 2u\sqrt{v-w} \\ \mp\sqrt{3}(uv-w) & 3uv+w & \mp 2u\sqrt{3(v-w)} \\ 2u\sqrt{v-w} & \mp 2u\sqrt{3(v-w)} & 4u \end{pmatrix}.$$

Dabei gehören die oberen Vorzeichen zum oberen Index $+$, die unteren zum Index $-$. Die Komponenten der Transportmatrizen kann man sich nun leicht mit (6.2) aus den folgenden Komponenten der Matrizen (t_{mn}) zusammenstellen:

$$\begin{aligned}
t_{m0,11} &= 2\,p_{c,11}[I^c_{m0} + \tfrac{1}{4}(1+3u)(I^+_{m0} + I^-_{m0})],\\
t_{m0,22} &= 2\,p_{c,11}[u\,I^c_{m0} + \tfrac{1}{4}(3+u)(I^+_{m0} + I^-_{m0})],\\
t_{m0,33} &= 2\,p_{c,11}\,v(I^c_{m0} + I^+_{m0} + I^-_{m0}),\\
t_{m0,12} &= 2\,p_{c,11}(\sqrt{3}/4)(u-1)(I^+_{m0} - I^-_{m0}) = t_{m0,21},\\
t_{m0,13} &= 2\,p_{c,11}\sqrt{v-w}\,(I^c_{m0} - \tfrac{1}{2}I^+_{m0} - \tfrac{1}{2}I^-_{m0}) = t_{m0,31},\\
t_{m0,23} &= 2\,p_{c,11}(1/2)\sqrt{3(v-w)}\,(I^+_{m0} - I^-_{m0}) \;= t_{m0,32},
\end{aligned} \tag{6.6}$$

$$\begin{aligned}
t_{m1,11} &= t_{m1,22} = t_{m1,33} = 0,\\
t_{m1,12} &= 2\,p^2_{c,11}\Big\{-u\sqrt{v-w}\,(I^c_{m1} - \tfrac{1}{2}I^+_{m1} - \tfrac{1}{2}I^-_{m1})H_1 - \frac{u}{2}\sqrt{3(v-w)}\,(I^+_{m1} - I^-_{m1})H_2\\
&\qquad + u(I^c_{m1} + I^+_{m1} + I^-_{m1})H_3\Big\},\\
t_{m1,13} &= 2\,p^2_{c,11}\Big\{\tfrac{1}{4}\sqrt{3}(uv-w)(I^+_{m1} - I^-_{m1})H_1 - [w\,I^c_{m1} + \tfrac{1}{4}(w+3uv)(I^+_{m1}\\
&\qquad + I^-_{m1})]H_2 + \frac{u}{2}\sqrt{3(v-w)}\,(I^+_{m1} - I^-_{m1})H_3\Big\},\\
t_{m1,23} &= 2\,p^2_{c,11}\{[uv\,I^c_{m1} + \tfrac{1}{4}(uv+3w)(I^+_{m1} + I^-_{m1})]H_1\\
&\qquad - \tfrac{1}{4}\sqrt{3}(uv-w)(I^+_{m1} - I^-_{m1})H_2 - u\sqrt{v-w}\,(I^c_{m1} - \tfrac{1}{2}I^+_{m1} - \tfrac{1}{2}I^-_{m1})H_3\},\\
t_{m1,ji}(\mathfrak{H}) &= -\,t_{m1,ij}(\mathfrak{H}),
\end{aligned} \tag{6.7}$$

$$t_{m2,ij} = 2\,\Delta'(I^c_{m2} + I^+_{m2} + I^-_{m2})H_i H_j. \tag{6.8}$$

Die $I^{c,+,-}_{mn}$ sind die Integrale (4.8), in denen e durch c bzw. $+$ oder $-$ ersetzt ist.

Der Übergang zur isotropen Streuzeit kann ohne wesentliche Schwierigkeiten durchgeführt werden. Man ersetzt

$$p_{ij} \text{ durch } \alpha_{ij}, \quad \varphi(x) \text{ durch } \tau(x), \quad \Delta' = \mathrm{Det}(p_{ij}) \text{ durch } D = \mathrm{Det}(\alpha_{ij}).$$

Weitere Änderungen sind nicht notwendig.

Die Gln. (6.2) sowie (6.6) bis (6.8) stellen die Transportmatrizen für beliebige Beträge und Richtungen des Magnetfeldes dar. Sie sind jedoch nicht direkt mit den meßbaren Größen vergleichbar, d.h. sie sind auf Widerstand, absolute Thermokraft, PELTIER-Koeffizient und Wärmeleitfähigkeit umzurechnen.

$(\varrho_{ik}(\mathfrak{H}))=(\sigma_{ik}(\mathfrak{H}))^{-1}$, allgemein berechnet, gibt zu unhandliche Ausdrücke. Im folgenden werden daher vereinfachende Sonderfälle, einschließlich des Grenzfalles $|\mathfrak{H}|\to\infty$, behandelt.

Der Fall $|\mathfrak{H}|=0$ führt wieder auf bereits bekannte Ergebnisse[13], wenn man berücksichtigt, daß $I^{c}_{mn}(0)=I^{+}_{mn}(0)=I^{-}_{mn}(0)$ und $t_{mn,ik}=0$ für $n\geqq 1$ sowie für $i\neq k$ ist. Allerdings sind die Parameter u, v und w hier nicht mehr Verhältnisse der Komponenten von (α) sondern, wegen (6.4), von $(\alpha\,\tau)$.

7. Magnetfeld parallel zur trigonalen Achse

Für $\mathfrak{H}=(0,0,H_3)$ ergeben sich ähnlich starke Vereinfachungen wie für $|\mathfrak{H}|=0$. Es gilt $I^{c}_{mn}(H_3)=I^{+}_{mn}(H_3)=I^{-}_{mn}(H_3)=I_{mn}(H_3)$. Damit bleiben nur folgende von Null verschiedene Komponenten der Transportmatrizen aufzuführen:

Widerstand

$$\begin{aligned}
\varrho_{11}(H_3)&=\varrho_{22}(H_3)=\frac{1}{3(1+u)\,p_{c,11}\,I_{00}}\left[1+p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\left(\frac{I_{01}}{I_{00}}\right)^2H_3^2\right]^{-1},\\
\varrho_{33}(H_3)&=\frac{1}{6v\,p_{c,11}\,I_{00}}\left[1+p_{c,11}\frac{u\,w}{v}\frac{I_{02}}{I_{00}}H_3^2\right]^{-1},\\
\varrho_{21}(H_3)&=-\varrho_{12}(H_3)=\frac{1}{3(1+u)\,p_{c,11}\,I_{00}}\,p_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)\frac{I_{01}}{I_{00}}H_3\left[1+p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\left(\frac{I_{01}}{I_{00}}\right)^2H_3^2\right]^{-1}.
\end{aligned}\tag{7.1}$$

Absolute Thermokraft und Peltier-Koeffizient

$$\begin{aligned}
\alpha_{11}(H_3)&=\alpha_{22}(H_3)=\frac{k}{e_0}\frac{I_{10}}{I_{00}}\left[1+p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\frac{I_{01}I_{11}}{I_{00}I_{10}}H_3^2\right]\left[1+p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\left(\frac{I_{01}}{I_{00}}\right)^2H_3^2\right]^{-1},\\
\alpha_{33}(H_3)&=\frac{k}{e_0}\frac{I_{10}}{I_{00}}\left[1+p^2_{c,11}\frac{uw}{v}\frac{I_{12}}{I_{10}}H_3^2\right]\left[1+p^2_{c,11}\frac{uw}{v}\frac{I_{02}}{I_{00}}H_3^2\right]^{-1},\\
\alpha_{12}(H_3)&=-\alpha_{21}(H_3)=\frac{k}{e_0}\,p_{c,11}\frac{2u}{1+u}\frac{I_{11}}{I_{00}}\left(1-\frac{I_{01}I_{10}}{I_{00}I_{11}}\right)H_3\cdot\left[1+p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\left(\frac{I_{01}}{I_{00}}\right)^2H_3^2\right]^{-1}.
\end{aligned}\tag{7.2}$$

Beitrag der Ladungsträger zur Wärmeleitfähigkeit

$$\begin{aligned}
\varkappa_{11}(H_3)&=\varkappa_{22}(H_3)=(k/e_0)^2\,T\cdot 3(1+u)\,p_{c,11}\,I_{00}\left[\frac{I_{20}}{I_{00}}-\left(\frac{I_{10}}{I_{00}}\right)^2\right.\\
&\quad\left.+\,p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\left(\frac{I_{11}^2}{I_{00}^2}-2\,\frac{I_{10}I_{01}I_{11}}{I_{00}^3}+\frac{I_{01}^2I_{20}}{I_{00}^3}\right)H_3^2\right]\left[1+p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\left(\frac{I_{01}}{I_{00}}\right)^2H_3^2\right]^{-1},\\
\varkappa_{33}(H_3)&=(k/e_0)^2\,T\cdot 6v\,p_{c,11}\,I_{00}\left[\frac{I_{20}}{I_{00}}\left(1+p^2_{c,11}\frac{uw}{v}\frac{I_{22}}{I_{20}}H_3^2\right)\right.\\
&\quad\left.-\left(\frac{I_{10}}{I_{00}}\right)^2\left(1+p^2_{c,11}\frac{uw}{v}\frac{I_{12}}{I_{10}}H_3^2\right)^2\left(1+p^2_{c,11}\frac{uw}{v}\frac{I_{02}}{I_{00}}H_3^2\right)^{-1}\right],\\
\varkappa_{12}(H_3)&=-\varkappa_{21}(H_3)=(k/e_0)^2\,T\cdot 6u\,p^2_{c,11}I_{01}\left\{\frac{I_{21}}{I_{01}}-\frac{I_{10}I_{11}}{I_{00}I_{01}}\left[2-\frac{I_{01}I_{10}}{I_{00}I_{11}}+p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\frac{I_{01}I_{11}}{I_{00}I_{10}}H_3^2\right]\right.\\
&\quad\left.\times\left[1+p^2_{c,11}\left(\frac{2u}{1+u}\right)^2\left(\frac{I_{01}}{I_{00}}\right)^2H_3^2\right]^{-1}\right\}H_3.
\end{aligned}\tag{7.3}$$

8. Magnetfeld parallel zur binären Achse

Die Rechnungen werden für $\mathfrak{H}=(0,H_2,0)$ lediglich durch $I^{+}_{mn}(H_2)=I^{-}_{mn}(H_2)$ vereinfacht. Als Abkürzungen werden verwendet:

$$S_{m1}=2w\,I^{c}_{m1}+(w+3uv)\,I^{+}_{m1},\qquad T_{m0}=2\,I^{c}_{m0}+(1+3u)\,I^{+}_{m0},\qquad(m=0,1).\tag{8.1}$$

[13] J. R. DRABBLE, Progress in Semiconductors, Bd. 7,45, Ed. A. F. Gibson and R. E. Burgess, Heywood & Co, Ltd. London 1963.

Widerstand

$$\begin{aligned}
\varrho_{11}(H_2) &= \frac{1}{p_{c,11}}\, 2\,v(I_{00}^{c} + 2\,I_{00}^{+})\,\{4\,w(I_{00}^{c} - I_{00}^{+})^2 + 6\,v(3+u)\,I_{00}^{c}\,I_{00}^{+} + 12\,u\,v\,I_{00}^{+2} + p_{c,11}^2\,S_{01}^2\,H_2^2\}^{-1}, \\
\varrho_{22}(H_2) &= \frac{1}{p_{c,11}}\,\{2\,u\,I_{00}^{c} + (3+u)\,I_{00}^{+} + 2\,p_{c,11}^2\,u\,w(I_{02}^{c} + 2\,I_{02}^{+})\,H_2^2\}^{-1}, \\
\varrho_{33}(H_2) &= \frac{1}{p_{c,11}}\,[2\,I_{00}^{c} + (1+3\,u)\,I_{00}^{+}]\,\{4\,w(I_{00}^{c} - I_{00}^{+})^2 + 6\,v(3+u)\,I_{00}^{c}\,I_{00}^{+} \\
&\qquad + 12\,u\,v\,I_{00}^{+2} + p_{c,11}^2\,S_{01}^2\,H_2^2\}^{-1}, \\
\varrho_{13}(H_2) &= \varrho_{31}(-H_2) = \frac{1}{p_{c,11}}\,[-2\sqrt{v-w}\,(I_{00}^{c} - I_{00}^{+}) + p_{c,11}\,S_{01}\,H_2] \\
&\qquad \times \{4\,w(I_{00}^{c} - I_{00}^{+})^2 + 6\,v(3+u)\,I_{00}^{c}\,I_{00}^{+} + 12\,u\,v\,I_{00}^{+2} + p_{c,11}^2\,S_{01}^2\,H_2^2\}^{-1}.
\end{aligned} \tag{8.2}$$

Absolute Thermokraft und Peltier-Koeffizient

Die $\alpha_{ik}(H_2)$ werden in Zähler O_{ik} und Nenner U_{ik} aufgeteilt.

$$\begin{aligned}
&\alpha_{11}(H_2): \\
&\quad O_{11} = (k/e_0)\,\{2\,v(I_{00}^{c} + 2\,I_{00}^{+})\,T_{10} - 4(v-w)\,(I_{00}^{c} - I_{00}^{+})\,(I_{10}^{c} - I_{10}^{+}) - \\
&\qquad - 2\,p_{c,11}\sqrt{v-w}\,[(I_{00}^{c} - I_{00}^{+})\,S_{11} - (I_{10}^{c} - I_{10}^{+})\,S_{01}]\,H_2 + p_{c,11}^2\,S_{01}\,S_{11}\,H_2^2\}, \\
&\quad U_{11} = 4\,w(I_{00}^{c} - I_{00}^{+})^2 + 6\,v(3+u)\,I_{00}^{c}\,I_{00}^{+} + 12\,u\,v\,I_{00}^{+2} + p_{c,11}^2\,S_{01}^2\,H_2^2; \\
&\alpha_{22}(H_2): \\
&\quad O_{22} = (k/e_0)\,\{2\,u\,I_{10}^{c} + (3+u)\,I_{10}^{+} + 2\,p_{c,11}^2\,u\,w(I_{12}^{c} + 2\,I_{12}^{+})\,H_2^2\}, \\
&\quad U_{22} = 2\,u\,I_{00}^{c} + (3+u)\,I_{00}^{+} + 2\,p_{c,11}^2\,u\,w(I_{02}^{c} + 2\,I_{02}^{+})\,H_2^2; \\
&\alpha_{33}(H_2): \\
&\quad O_{33} = (k/e_0)\,\{2\,v(I_{10}^{c} + 2\,I_{10}^{+})\,T_{00} - 4(v-w)\,(I_{00}^{c} - I_{00}^{+})\,(I_{10}^{c} - I_{10}^{+}) + \\
&\qquad + 2\,p_{c,11}\sqrt{v-w}\,[(I_{00}^{c} - I_{00}^{+})\,S_{11} - (I_{10}^{c} - I_{10}^{+})\,S_{01}]\,H_2 + p_{c,11}^2\,S_{01}\,S_{11}\,H_2^2\}, \\
&\quad U_{33} = U_{11}; \\
&\alpha_{13}(H_2) = \alpha_{31}(-H_2): \\
&\quad O_{13} = (k/e_0)\,\{12\,v\sqrt{v-w}\,(I_{00}^{+}\,I_{10}^{c} - I_{00}^{c}\,I_{10}^{+}) + 2\,v\,p_{c,11}[(I_{10}^{c} + 2\,I_{10}^{+})\,S_{01} - (I_{00}^{c} + 2\,I_{00}^{+})\,S_{11}]H_2\}, \\
&\quad U_{13} = U_{11}.
\end{aligned} \tag{8.3}$$

Da die Komponenten von $\varkappa_{ik}(H_2)$ recht komplizierte, lange Ausdrücke sind, wird — sollten sie benötigt werden — auf die Diplomarbeit des Verfassers verwiesen.

9. Sättigungsformeln

Wesentliche Vereinfachungen ergeben sich bei der Betrachtung des asymptotischen Verhaltens der Transportmatrizen, d.h. für Bereiche, in denen $\omega\tau \gg 1$ (ω = Zyklotronkreisfrequenz) ist. Es lassen sich allgemeine Ausdrücke für beliebige Richtungen des elektrischen und des magnetischen Feldes sowie des Stromes angeben. Wegen ihrer einfachen Struktur sind Sättigungsformeln einer Analyse leicht zugänglich und können zur Prüfung der Parameter der Bandstruktur sowie der Streuzeit dienen.

9.1. Widerstand

Nach Gl. (3.3) hat man zur Bestimmung der Widerstandsmatrix

$$(\varrho_{ik}) = (\sigma_{ik})^{-1} = [(t_{00,ik}) + (t_{01,ik}) + (t_{02,ik})]^{-1} \tag{9.1.1}$$

zu bilden. Die ϱ_{ik} sind dann bis auf Vorzeichen Quotienten aus der zu σ_{ki} gehörigen Unterdeterminante der Matrix (σ_{ik}) und ihrer Determinante selbst. Damit treten im Zähler Summen aus doppelten, im Nenner solche aus dreifachen Produkten der $t_{0n,rs}$ auf. Diese Produktsummen werden für ϱ_{ik} je nach den Indexkombinationen von n mit $(n_1, n_2)_{ik}$ im Zähler und (n_1, n_2, n_3) im Nenner abgekürzt. Da die

I_{0n} für starke Magnetfelder proportional $|\mathfrak{H}|^{-2}$ sind, werden die $t_{0n,rs}$ proportional zu $|\mathfrak{H}|^{n-2}$ und damit die einzelnen Klammern (Index „$\gg$" für „starkes Magnetfeld")

$$(n_1, n_2)_{\gg,ik} \sim |\mathfrak{H}|^{n_1+n_2-4}, \quad (n_1, n_2, n_3) \sim |\mathfrak{H}|^{n_1+n_2+n_3-6}. \tag{9.1.2}$$

Die folgenden Klammern verschwinden identisch

$$(2,2)_{ik} = 0, \quad (1,2,2) = 0, \quad (2,2,2) = 0, \quad (0,2,2) = 0. \tag{9.1.3}$$

Also bleibt für ϱ_{ik} im Grenzfall hoher Magnetfelder

$$\varrho_{\gg,ik} = \frac{(1,1)_{\gg,ik} + (0,2)_{\gg,ik} + (1,2)_{\gg,ik}}{(1,1,2)_{\gg}}. \tag{9.1.4}$$

Wegen der Gl. (3.2) erhält man für die Komponente des elektrischen Feldes in Richtung $\mathfrak{s}$ bei beliebiger Stromrichtung $\mathfrak{t}$ und beliebiger Magnetfeldrichtung $\mathfrak{h}$, ($|\mathfrak{s}| = |\mathfrak{t}| = |\mathfrak{h}| = 1$) nach einigen Umformungen den folgenden allgemeinen Ausdruck, der Übersichtlichkeit halber als Matrixgleichung ohne Indize

$$\mathfrak{s}\cdot(\varrho)\cdot\mathfrak{t} = \frac{1}{18\,I'_{02}}\left\{\frac{1}{Q}\,[\mathfrak{s}\cdot(R)\cdot\mathfrak{h}][\mathfrak{h}\cdot(R)\cdot\mathfrak{t}] + \frac{f(\lambda,\eta)}{\Delta'}\,(\mathfrak{h}\times\mathfrak{s})\cdot(K)\cdot(\mathfrak{h}\times\mathfrak{t})\right\} + \frac{H}{e_0\,p\,c_0}\,\mathfrak{s}\cdot(\mathfrak{h}\times\mathfrak{t}). \tag{9.1.5}$$

Dabei bedeutet $H = |\mathfrak{H}|$

$$Q = q_c + q_+ + q_-, \quad (K_{ik}) = q_c(p_{c,ik}) + q_+(p_{+,ik}) + q_-(p_{-,ik}), \quad (R_{ik}) = q_c((p_c^{-1})_{ik}) + \\ + q_+((p_+^{-1})_{ik}) + q_-((p_-^{-1})_{ik}), \tag{9.1.6}$$

$$q_{c,+,-} = \frac{1}{\mathfrak{h}\cdot(p_{c,+,-})^{-1}\cdot\mathfrak{h}} = \frac{\Delta'}{p^2_{c,11}}\,p'_{c,+,-}; \quad \mathfrak{h} = (h_1, h_2, h_3),$$
$$q'_c = [u\,v\,h_1^2 + w\,h_2^2 + u\,h_3^2 - 2\,u\sqrt{v-w}\,h_1 h_3]^{-1}, \tag{9.1.7}$$
$$q'_\pm = 4/[(u\,v + 3\,w)\,h_1^2 + (3\,u\,v + w)\,h_2^2 + 4\,u\,h_3^2 \mp 2\sqrt{3}\,(u\,v - w)\,h_1 h_2 + 4\,u\sqrt{v-w}\,h_1 h_3 \\ \mp 4\,u\sqrt{3\,(v-w)}\,h_2 h_3],$$

$$I'_{mn} = -\left(\frac{e_0}{c_0\,m_0}\right)^{n-2} \frac{e_0^2\,p}{9\,m_0\,F_{1/2}(\eta)} \int\limits_0^\infty (x-\eta)^m\,\varphi^{n-1}(x)\,x^{3/2}\,\frac{\partial f_0}{\partial x}\,\mathrm{d}x, \tag{9.1.8}$$

$$f(\lambda,\eta) = \frac{I'_{00}\,I'_{02}}{I'^2_{01}} = \frac{9-4\,\lambda^2}{9}\;\frac{F_{\lambda+1/2}(\eta)\cdot F_{-\lambda+1/2}(\eta)}{F^2_{1/2}(\eta)}. \tag{9.1.9}$$

Eine Tabelle der numerischen Werte von $f(\lambda,\eta)$ für die wichtigsten Werte von λ und η wird am Schluß im Anhang gegeben. Aus (9.1.5) bis (9.1.9) lassen sich alle $\varrho_{\gg,ik}$ bestimmen. In der Praxis ist es günstig, sie jeweils auf ihren Nullfeldwert $\varrho_{kk}(|\mathfrak{H}| = 0) = \varrho_{0,kk}$ zu beziehen.

Während die Diagonalkomponenten $\varrho_{\gg,ii}$ unabhängig vom Betrag des Magnetfeldes sind, werden die Nichtdiagonalkomponenten ($\mathfrak{s} \neq \mathfrak{t}$) proportional zu H, falls $\mathfrak{s}$, $\mathfrak{t}$ und $\mathfrak{h}$ linear unabhängig sind. Insbesondere gilt

$$\varrho_{\gg,ij} = C_{\gg,ij} - \frac{H_k}{e_0\,p\,c_0}; \quad C_{\gg,ij} = C_{\gg,ji}, \quad i \neq j \neq k \neq i;\; i,j,k \text{ zyklisch.} \tag{9.1.10}$$

Die $C_{\gg,ji}$ sind Konstanten entsprechend den Sättigungswerten der Diagonalkomponenten. Das negative Vorzeichen vor dem HALL-Term ist eine Folge der für p-Leitung durchgeführten Rechnung ($e_0 > 0$).

Sonderfälle

I. Longitudinale Sättigung ($\mathfrak{s} \parallel \mathfrak{t} \parallel \mathfrak{h}$)

Wegen $\mathfrak{h}\cdot(R)\cdot\mathfrak{h} = 3$ bleibt

$$\frac{\varrho_{\gg,hh}}{\varrho_{0,hh}} = [\mathfrak{h}\cdot((p_c) + (p_+) + (p_-))^{-1}\cdot\mathfrak{h}]^{-1}\,[q_c + q_+ + q_-]^{-1}. \tag{9.1.11}$$

TESTARDI[6] gibt den entsprechenden Ausdruck für ein Ellipsoid an. Liegt $\mathfrak{h}$ parallel zu einer der Kristallachsen, so folgt

$$\frac{\varrho_{\gg,11}}{\varrho_{0,11}} = \frac{v(1+u)(3+u\,v/w)}{2\,w(1+3\,u\,v/w)}\,, \quad \frac{\varrho_{\gg,22}}{\varrho_{0,22}} = \frac{(1+u)(1+3\,u\,v/w)}{2\,u(3+u\,v/w)}\,, \quad \frac{\varrho_{\gg,33}}{\varrho_{0,33}} = \frac{v}{w}\,. \tag{9.1.12}$$

Der erste und der dritte Ausdruck in (9.1.12) wurden ebenfalls bereits von TESTARDI angegeben.

II. Transversale Sättigung ($\mathfrak{s}\,\|\,\mathfrak{t}\perp\mathfrak{h}$)

Für Achsenlagen der Vektoren $\mathfrak{s}$, $\mathfrak{t}$ und $\mathfrak{h}$ ergibt sich

$$\begin{aligned}
&\mathfrak{h} = (1,0,0):\\
&\quad \frac{\varrho_{22}(H_1\to\infty)}{\varrho_{0,22}} = \frac{(1+u)(1+3\,u\,v/w)}{2\,u(3+u\,v/w)}\cdot f(\lambda,\eta)\,,\\
&\quad \frac{\varrho_{33}(H_1\to\infty)}{\varrho_{0,33}} = -\frac{(1-v/w)(1-u\,v/w)^2}{(3+uv/w)(1+3\,uv/w)} + \frac{1+(u\,v/w)+2\,v/w}{3+u\,v/w}\cdot f(\lambda,\eta)\,;\\
&\mathfrak{h} = (0,1,0):\\
&\quad \frac{\varrho_{11}(H_2\to\infty)}{\varrho_{0,11}} = \frac{v(1+u)(3+u\,v/w)}{2\,w(1+3\,u\,v/w)}\cdot f(\lambda,\eta)\,, \qquad \frac{\varrho_{33}(H_2\to\infty)}{\varrho_{0,33}} = \frac{v(1+2\,u+u\,v/w)}{w(1+3\,u\,v/w)}\cdot f(\lambda,\eta)\,;\\
&\mathfrak{h} = (0,0,1):\\
&\quad \frac{\varrho_{11}(H_3\to\infty)}{\varrho_{0,11}} = \frac{\varrho_{22}(H_3\to\infty)}{\varrho_{0,11}} = \frac{(1+u)^2}{4\,u}\cdot f(\lambda,\eta)\,.
\end{aligned} \tag{9.1.13}$$

III. Gemischte Komponenten für Achsenlagen von $\mathfrak{s}$, $\mathfrak{t}$ *und* $\mathfrak{h}$

$C_{\gg,12}$ und $C_{\gg,23}$ verschwinden für Achsenlagen des Magnetfeldes. Eine Ausnahme bildet $C_{\gg,13}$ für $\mathfrak{h} = (1,0,0)$ und $\mathfrak{h} = (0,1,0)$.

$$\begin{aligned}
\mathfrak{h} = (1,0,0):\ \frac{C_{13}(H_1\to\infty)}{\varrho_{0,33}} &= -\frac{v(1-u\,v/w)}{w(1+3\,u\,v/w)}\sqrt{v-w}\,,\\
\mathfrak{h} = (0,1,0):\ \frac{C_{13}(H_2\to\infty)}{\varrho_{0,33}} &= \frac{v(1-u\,v/w)}{w(1+3\,u\,v/w)}\sqrt{v-w}\cdot f(\lambda,\eta)\,.
\end{aligned} \tag{9.1.14}$$

Interessant ist, daß die longitudinalen wie auch die transversalen Sättigungsformeln ausschließlich Funktionen von u, v/w und f sind, d.h. von v und w nicht getrennt abhängen. Hier dagegen können v und w aus (9.1.14) auch einzeln bestimmt werden. Will man die Winkelabhängigkeit von Sättigungswerten (transversal) messen, so ist die einzige Komponente mit ausreichender Vereinfachung diejenige parallel zur binären Achse. $\mathfrak{h}$ liegt dann in der dazu senkrechten Spiegelebene, also der 1—3-Ebene.

9.2. Thermokraft

Die allgemeine Sättigungsformel ist

$$\alpha_{\gg,ij} = \frac{k}{e_0}\frac{6\,I'_{11}}{e_0\,p\,c_0}\left[\delta_{ij} + \frac{1}{3}\left(\frac{e_0\,p\,c_0}{6}\frac{I'_{12}}{I_{11}'\,I'_{02}} - 1\right)R_{ik}\,h_k\,h_j\right]. \tag{9.2.1}$$

Die Sonderfälle $\mathfrak{s}\,\|\,\mathfrak{t}\,\|\,\mathfrak{h}$ (longitudinal) und $\mathfrak{s}\,\|\,\mathfrak{t}\perp\mathfrak{h}$ (transversal) liefern hier sehr einfache Ausdrücke. Im Longitudinalfall wird grundsätzlich

$$\alpha_{\gg,hh} = \alpha_{0,hh}\,, \tag{9.2.2}$$

wobei $\alpha_{0,hh}$ den Gln. (7.2) für $H_3 = 0$ entnommen werden kann. Die transversalen Größen werden ebenfalls konstant, jedoch bei einem anderen Wert:

$$\alpha_{\gg,tt}(\mathfrak{s}\,\|\,\mathfrak{t}\perp\mathfrak{h}) = \frac{k}{e_0}\left(\frac{5}{3}\frac{F_{3/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} - \eta\right). \tag{9.2.3}$$

Es ist bemerkenswert, daß (9.2.3) auch vom Streumechanismus völlig unabhängig ist. Läßt sich der Sättigungswert messen, so kann η bestimmt werden und damit auch recht bequem die Temperaturabhängigkeit des FERMI-Niveaus ζ.

9.3. Sättigung des Ladungsträgeranteils zur Wärmeleitfähigkeit

$$\varkappa_{\gg,ij} = (k/e_0)^2\, T \cdot 2 (q_c + q_+ + q_-)\, I'_{02} \left(\frac{I'_{22}}{I'_{02}} - \frac{I'^2_{12}}{I'^2_{02}} \right) h_i h_j . \tag{9.3.1}$$

Im Longitudinalfall kann man hier die konstante LORENTZ-Zahl

$$L_{\gg} = \frac{\varkappa_{\gg,hh}}{T\sigma_{\gg,hh}} = (k/e_0)^2 \left(\frac{I'_{22}}{I'_{02}} - \frac{I'^2_{12}}{I'^2_{02}} \right) \tag{9.3.2}$$

definieren, oder man bezieht $\varkappa_{\gg,hh}$ auf den Wert für $|\mathfrak{H}| = 0$:

$$\frac{\varkappa_{\gg,hh}}{\varkappa_{0,hh}} = [\mathfrak{h} \cdot ((p_c) + (p_+) + (p_-)) \cdot \mathfrak{h}]^{-1} [q_c + q_+ + q_-] . \tag{9.3.3}$$

Dabei ist (9.3.2) ausschließlich eine Funktion der Parameter λ und η, während (9.3.3) nur von den $p_{c,ij} = (\alpha_c \tau_c')_{ij}$ abhängt. Der transversale Anteil der Wärmeleitfähigkeit ist proportional zu negativen Potenzen von $|\mathfrak{H}|$ und verschwindet daher für $|\mathfrak{H}| \to \infty$.

10. Numerische Bestimmung der $p_{c,ik}$

Zur Untersuchung der Bandstruktur von p-Bi_2Te_3 lagen vier Magnetwiderstandskurven für verschiedene Magnetfeld- und Meßrichtungen vor, von denen zwei deutlich Sättigung zeigten[14].

Die vier magnetfeldabhängig gemessenen Widerstandskomponenten sind

I) $\dfrac{\varrho_{22}(H_2)}{\varrho_{0,22}}$: Longitudinalfall; H parallel binäre Achse ,

II) $\dfrac{\varrho_{22}(H_1)}{\varrho_{0,22}}$: Transversalfall; H parallel x-Achse; Messung parallel binäre Achse,

III) $\dfrac{\varrho_{11}(H_3)}{\varrho_{0,11}}$: Transversalfall; H parallel trigonale Achse; Messung parallel x-Achse,

IV) $\dfrac{\varrho_{11}(H_1)}{\varrho_{0,11}}$: Longitudinalfall; H parallel x-Achse.

Da die maximale Feldstärke etwa 180 kG betrug, wurde nur in den Fällen I und II Sättigung erreicht. Die Werte sind

$$\frac{\varrho_{\gg,22}}{\varrho_{0,22}} = \frac{(1+u)(1+3uv/w)}{2u(3+uv/w)} = 1{,}45 , \qquad \frac{\varrho_{22}(H_1 \to \infty)}{\varrho_{0,22}} = \frac{(1+u)(1+3uv/w)}{2u(3+uv/w)} \cdot f(\lambda, \eta) = 1{,}95 . \tag{10.1}$$

Daraus erhält man mit $\eta = 3{,}7$ aus Tab. 1 des Anhanges den Wert $\lambda = 1{,}4$. Die zweite Lösung $\lambda = -1{,}4$ wird hier ausgeschlossen, da EFIMOVA u.a.[8] zeigten, daß in Proben dieser Trägerdichte bei Temperaturen um 100 °K Streuung durch ionisierte Störstellen dominiert. Also sollte λ nahe $+1{,}5$ liegen.

Die erste der beiden Gln. (10.1) wird noch als Beziehung zwischen u und v/w bei der Auswertung der Meßkurve III verwendet.

[14] Die Messungen wurden von den Herren Dr. G. LANDWEHR und P. DRATH in der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt Braunschweig ausgeführt und freundlicherweise zur Verfügung gestellt. Die untersuchte Probe XXII wurde bereits zur Bestimmung der Feinstruktur beim SCHUBNIKOV-DE HAAS-Effekt[14a] verwendet.

[14a] G. LANDWEHR u. P. DRATH, Z. angew. Phys. **20**/5, 392 [1966]). Die Defektelektronendichte beträgt $p = 6{,}6 \cdot 10^{18}\ \mathrm{cm}^{-3}$ und das reduzierte FERMI-Niveau bei 77°K: $\eta = \zeta/kT = 3{,}7$.

Unter der Annahme magnetfeldunabhängiger $p_{c,ik}$ wird u so bestimmt, daß die aus III gewonnenen $p_{c,11}$-Werte über den gesamten Magnetfeldbereich konstant bleiben. Die hier explizit in die Rechnungen hineingesteckte Annahme wurde bei der Bestimmung von v aus IV bestätigt. Die Werte zeigten innerhalb der Fehlergrenzen keine Abhängigkeit von der Feldstärke, was der Fall sein sollte, wenn die $(\alpha_c \tau_c')_{ik} = p_{c,ik}$ magnetfeldabhängig sind. Die Bestätigung dieser Annahme, die in jeder derartigen Behandlung des Transportproblems steckt, konnte aus Kleinfeld-Daten nicht gewonnen werden.

Tab. 2 im Anhang enthält alle bei der Auswertung ermittelten Parameter. Außerdem wurden Daten von DRABBLE[3] und TESTARDI[6] hinzugefügt. Mit den von DRABBLE angegebenen Daten

$$\beta(\lambda, \eta) = 0{,}8813,$$
$$u = 8{,}416,$$
$$\varrho_{11} = 1{,}395 \cdot 10^{-6}\,\Omega\text{m},$$
$$\varrho_{123} = \frac{4\,u}{(1+u)^2}\,\frac{r_0}{e_0\,p\,c_0} = 0{,}24 \cdot 10^{-6}\,\Omega\text{m}\,(\text{Wb/m}^2)^{-1},$$
$$r_0 = r_0(\lambda, \eta) = \text{Entartungsparameter},$$

sowie dem von TESTARDI angegebenen Massentensor wurde für DRABBLES Probe 23 λ und η bestimmt und damit aus ϱ_{11} der Wert für $p_{c,11}$. Aus u, v und w folgen dann alle übrigen $p_{c,ik}$ für diese Probe.

Die Daten von TESTARDIS Probe sind alle bis auf λ seiner Arbeit zu entnehmen. λ wurde aus

$$\varrho_{11}(78\,°\text{K}) = 2{,}3 \cdot 10^{-6}\,\Omega\text{m}, \quad \eta = 3{,}65$$

sowie den von ihm angegebenen $p_{c,ik} = (\alpha_c \tau_c')_{ik}$ berechnet. Der ungewöhnliche Wert $\lambda = -0{,}023$, verbunden mit seinen um einen Faktor 10 höheren $\tau'_{c,ik}$ läßt einen Vergleich mit XXII und Probe 23 (wegen der etwa gleichen Trägerdichte) nicht zu. XXII und Probe 23 liefern dagegen sehr ähnliche Werte. DRABBLES Probe 19 weicht jedoch naturgemäß stärker von diesen beiden wegen der erheblich geringeren Trägerdichte ab, was zu geänderten $\tau'_{c,ij}$ führt.

Herrn Professor Dr. M. KOHLER möchte ich für die Anregung sowie für die verständnisvolle Förderung meiner Arbeit herzlich danken. Mein Dank gilt ebenfalls Herrn Dr. G. LANDWEHR und Herrn Dipl.-Ing. P. DRATH für die mir zur Auswertung überlassenen Widerstandsmeßkurven, für wertvolle Anregungen und Diskussionen.

Anhang

η	$f_{\lambda=\pm 0,5}$	$f_{\lambda=\pm 1}$	$f_{\lambda=\pm 1,5}$
$\to -\infty$	1,1318	1,6667	3,3955
− 1	1,1176	1,5811	2,9956
0	1,1022	1,4934	2,6144
1	1,0817	1,3805	2,1637
2	1,0609	1,2749	1,7839
3	1,0444	1,1948	1,5232
4	1,0325	1,1394	1,3576
5	1,0242	1,1020	1,2529
6	1,0185	1,0768	1,1858

Tab. 1. Entartungsparameter der transversalen Sättigung. Es gilt: $f(\lambda=0) = \lim_{\eta \to +\infty} f(\lambda, \eta) = 1$,

$$\lim_{\eta \to -\infty} f(\lambda, \eta) = \frac{\Gamma(\frac{5}{2} - \lambda) \cdot \Gamma(\frac{5}{2} + \lambda)}{\Gamma^2(\frac{5}{2})},$$

$\Gamma(a)$ = Gamma-Funktion für das Argument a.

	XXII	Probe 23 von DRABBLE[3]	Probe 19 von DRABBLE[3]	Probe von TESTARDI[6]
η	3,7	5,1	1,8	3,65
λ	1,4	1,3	− 0,5	− 0,023
u	9,81	8,416	6,254	6,8
v	1,56	1,492	1,252	1,6
w	0,82	0,962	1,134	0,497
$p_{c,11}$	$4{,}44 \cdot 10^{-14}$ s	$4{,}52 \cdot 10^{-14}$ s	$127 \cdot 10^{-14}$ s	$62 \cdot 10^{-14}$ s
$p_{c,22}$	$43{,}6 \cdot 10^{-14}$ s	$38{,}0 \cdot 10^{-14}$ s	$794 \cdot 10^{-14}$ s	$422 \cdot 10^{-14}$ s
$p_{c,33}$	$6{,}93 \cdot 10^{-14}$ s	$6{,}74 \cdot 10^{-14}$ s	$159 \cdot 10^{-14}$ s	$99 \cdot 10^{-14}$ s
$p_{c,13}$	$3{,}63 \cdot 10^{-14}$ s	$3{,}36 \cdot 10^{-14}$ s	$43{,}6 \cdot 10^{-14}$ s	$65 \cdot 10^{-14}$ s

Tab. 2. Probendaten.