

Rand- und Grenzbedingungen in der Theorie stark verunreinigter Supraleiter *

KLAUS-DIETER USADEL

Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen

(Z. Naturforschg. **23 a**, 655—670 [1968]; eingegangen am 19. Januar 1968)

The kernel of the linearized integral equation for the order parameter $\Delta(\mathbf{r})$ was shown by DE GENNES to be the solution of a diffusion equation in the case of a very impure superconductor. On the basis of the method of the correlation function originating from DE GENNES and further developed by LÜDERS, boundary conditions to the diffusion equation are derived for surfaces and for interfaces between different conductors. In the case of good electrical contact, our results are identical with those given by DE GENNES.

1. Einleitung

Bei einem Übergang zweiter Ordnung zwischen supraleitendem und normalleitendem Zustand kann die Sprungtemperatur T des Übergangs nach GORKOV¹ aus einer linearen Integralgleichung für das Paarpotential $\Delta(\mathbf{r})$

$$\Delta(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) T \sum_{\omega} \int d^3\mathbf{r}_0 K_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \Delta(\mathbf{r}_0) \quad (1)$$

bestimmt werden. Hierbei ist $g(\mathbf{r})$ die unter Umständen ortsabhängige Kopplungskonstante der BCS-Theorie, ω durchläuft alle positiven und negativen ungeradzahigen Vielfachen von πT . Der Kern $K_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ ist bestimmt durch die Eigenschaften des normalleitenden Zustands. Er kann nach der Methode der Korrelationsfunktion, die von LÜDERS² im Anschluß an DE GENNES^{3, 4, 5} entwickelt wurde, aus einer Verteilungsfunktion im Phasenraum berechnet werden, die einer Art Boltzmann-Gleichung (bzw. deren Laplace-Transformierter) gehorcht. Im Rahmen dieser Theorie wird die Formulierung halbphänomenologischer Bedingungen für das Verhalten der Elektronen an einer Leiteroberfläche und an Grenzflächen zwischen verschiedenen Leitern möglich. Damit wird ein Verfahren bereitgestellt, bei dem die spezielle Art und Weise, wie die Elektronen an Oberflächen und Grenzflächen gestreut werden, in Betracht gezogen werden kann. Dies ist von Bedeutung bei der theoretischen Behandlung von Oberflächeneffekten (etwa des kritischen Feldes $H_{c3}(T)$ der Oberflächensupraleitung) oder von Grenzflächeneffekten (etwa des Proximity-Effektes für Schichtpakete).

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Leitern, in denen die Elektronen eine gegen $v/2|\omega|$ (v ist die Fermi-Geschwindigkeit) kleine freie Weglänge l haben (sogenannter schmutziger Grenzfall). In diesem Fall ist es möglich, eine für alle Temperaturen näherungsweise gültige Differentialgleichung für K_{ω} anzugeben, die Diffusionsgleichung von DE GENNES^{3, 4} (vgl. auch II und IV)

$$\left(2|\omega| - \frac{v l}{3} \tilde{\partial}^2\right) K_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = 2\pi N(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (2)$$

In Gl. (2) — die in dieser Form nur gültig ist für Leiter mit unmagnetischen Zusätzen — bedeutet N die lokale Zustandsdichte an der Fermikante, $\tilde{\partial}$ stellt den eichinvarianten Gradienten zur doppelten Elektronenladung $-2e$ dar

$$\tilde{\partial} = \partial + 2ie\mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

und $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ bedeutet ein Vektorpotential des im Leiter vorhandenen Magnetfeldes \mathbf{H} . Im Phasenübergang ist \mathbf{H} gleich dem von außen angelegten Feld. Die Differentialgleichung (2) ist nur gültig in homogenen Bereichen, d. h. Bereichen, in denen Größen wie Fermi-Geschwindigkeit, Störstellenkonzentration usw. räumlich konstant sind. Außerdem müssen die Punkte \mathbf{r} und \mathbf{r}_0 einen hinreichend großen Abstand von Unstetigkeitsflächen (Grenzflächen oder Oberflächen) haben. In Abschnitt 3 werden wir zeigen, daß dieser Abstand durch die freie Weglänge l [und nicht etwa durch die dagegen große Reichweite von $K_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$] gegeben ist. Daher ist es sinnvoll, den Integralkern im gesamten Leiter durch diejenige

¹ L. P. GORKOV, Soviet Phys. JETP **9**, 1364 [1959].

² G. LÜDERS, Z. Naturforsch. **21 a**, 680 (I), 1415 (II), 1425 (III), 1842 (IV) [1966]; **22 a**, 845 (V) [1967]; **23 a**, 1 (VI) [1968]. Diese Arbeiten werden im folgenden als I usw. zitiert.

* D 7.

** Wir benutzen Gaußsche Einheiten mit $c = K_B = \hbar = 1$.

³ P. G. DE GENNES, Rev. Mod. Phys. **36**, 225 [1964].

⁴ P. G. DE GENNES, Phys. kond. Materie **3**, 79 [1964].

⁵ P. G. DE GENNES u. M. TINKHAM, Physics **1**, 107 [1964].



Lösung der Diffusionsgleichung zu ersetzen, die im Innern von homogenen Bereichen mit $K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ übereinstimmt. Diese Lösung befriedigt gewisse Rand- und Grenzbedingungen an Unstetigkeitsflächen und umgekehrt läßt sich daraus zusammen mit der Differentialgleichung (2) der Integralkern der Diffusionsnäherung berechnen. Im Sinne dieser Bemerkungen kann nach den Rand- und Grenzbedingungen für die Diffusionsgleichung gefragt werden. DE GENNES^{3,4} gibt sowohl Rand- wie Grenzbedingungen für die Diffusionsgleichung an. Seine Ableitung berücksichtigt aber nicht die spezielle Struktur der Oberflächen und Grenzflächen. ZAITSEV⁶ erhält Grenzbedingungen, die aber nur für spiegelnde Grenzflächen mit den Ergebnissen von DE GENNES übereinstimmen. Daher soll das Problem der Rand- und Grenzbedingungen für die Diffusionsgleichung erneut aufgegriffen werden.

In Abschnitt 3 wird unter Berücksichtigung der Elektronenreflexion an Unstetigkeitsflächen eine Integralgleichung für K_ω gewonnen. Bei der Ableitung dieser Gleichung machen wir die vereinfachende Annahme, daß die Elektronen mit Fermi-Geschwindigkeit an den Störstellen isotrop gestreut werden. Die Integralgleichung für K_ω wird in den Abschnitten 4 und 5 in physikalisch interessanten Fällen ausgewertet. Wir verwenden dazu ein Variationsverfahren, auf das im einzelnen in Abschnitt 3 eingegangen wird. In Abschnitt 4 wird ein homogener Leiter be-

trachtet, dessen Lineardimensionen groß sind gegen die freie Weglänge l . In diesem Fall bestätigt sich die von DE GENNES angegebene Randbedingung, welche besagt, daß die Normalkomponente der eichinvarianten Ableitung von K_ω an der Oberfläche des Leiters verschwindet. Als eine unmittelbare Folge hiervon ist das kritische Feld $H_{c3}(T)$ der Oberflächensupraleitung für alle Temperaturen im schmutzigen Grenzfall gegeben durch $H_{c3} = 1,695 H_{c2}$, unabhängig von den speziellen Reflexionseigenschaften der Oberfläche. Wir betonen, daß dieses einfache Ergebnis nur im schmutzigen Grenzfall richtig ist. Zwar ergibt sich im Gültigkeitsbereich der gewöhnlichen linearisierten Ginzburg-Landau-Gleichung als Folge der von den Reflexionseigenschaften der Oberfläche unabhängigen Randbedingung⁷ $\mathbf{n} \cdot \tilde{\partial} \Delta = 0$ auch $H_{c3} = 1,695 \cdot H_{c2}$. Betrachtet man aber im sauberen Grenzfall linearisierte Ginzburg-Landau-Gleichungen höherer Ordnung, so findet man eine Abhängigkeit des kritischen Feldes H_{c3} von der Art der Elektronenreflexion^{7,8}. In Abschnitt 5 wird eine Doppelschicht aus zwei verschiedenen Leitern betrachtet; ein etwa vorhandenes Magnetfeld sei parallel zur Grenzfläche. Wir erhalten Grenzbedingungen, die im allgemeinen Fall von der Stärke der Elektronenreflexion an der Grenzfläche abhängen. Bei gutem elektrischen Kontakt der Leiter gehen sie unabhängig von der Art der Elektronenreflexion an der Grenzfläche über in die Grenzbedingungen von DE GENNES.

2. Grundgleichungen

Der Integralkern $K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ kann nach der Methode der Korrelationsfunktion² aus einer Verteilungsfunktion $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0)$ im Phasenraum (\mathbf{r}, \mathbf{v}) berechnet werden gemäß

$$K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = (2\pi)^3 N(\mathbf{r}) \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0). \quad (4)$$

$g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0)$ ist nur für $|\mathbf{v}| = v$ definiert; in Gl. (4) wird über alle Richtungen von \mathbf{v} integriert. Die Verteilungsfunktion gehorcht der Laplace-transformierten Boltzmann-Gleichung

$$(2|\omega| + \mathbf{v} \cdot \tilde{\partial} + n v \sigma) g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0) - n v \oint d\Omega' \frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}'; \mathbf{r}_0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (5)$$

n ist die Konzentration der Fremdatome, $d\sigma/d\Omega$ bzw. σ stellen den differentiellen bzw. integrierten Wirkungsquerschnitt für die Streuung von Elektronen mit Fermi-Geschwindigkeit an diesen Störstellen dar. $d\sigma/d\Omega$ ist nur eine Funktion von $v^2 \cos \vartheta = \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}'$. Sind paramagnetische Fremdatome im Leiter

verteilt, so ist der integrierte Streuquerschnitt in Gl. (5) zu ersetzen durch einen Streuquerschnitt σ_1 , $d\sigma/d\Omega$ durch $d\sigma_2/d\Omega$. $\sigma_s = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) \geq 0$ ist ein Maß für die Stärke des spinabhängigen Anteils der Wechselwirkung der Elektronen mit den magnetischen Fremdatomen (vgl. im übrigen IV).

⁶ R. O. ZAITSEV, Soviet Phys. JETP **23**, 702 [1966].

⁷ E. SCHÖLER, Göttinger Dissertation 1966.

⁸ G. LÜDERS, Z. Physik **202**, 8 [1967].

Der Leiter möge sich zusammensetzen aus makroskopischen homogenen Bereichen. Die im Innern eines homogenen Bereichs gültige Boltzmann-Gleichung (5) ist zu ergänzen durch Grenzbedingungen an der Grenze zwischen zwei verschiedenen Leitern und durch Randbedingungen an der Leiteroberfläche. Diese Bedingungen werden in I und VI angegeben.

Es sei \mathbf{s} ein Oberflächenpunkt, \mathbf{v}_1 ein in den Leiter weisender Vektor (entsprechend einem von der Oberfläche wegfliegenden Elektron), \mathbf{v}_0 ein auf die Oberfläche weisender Vektor (entsprechend einem heranfliegenden Elektron). Dann gilt für die Verteilungsfunktion

$$g_\omega(\mathbf{s}, \mathbf{v}_1; \mathbf{r}_0) = \int d\Omega_0 w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) g_\omega(\mathbf{s}, \mathbf{v}_0; \mathbf{r}_0). \quad (6)$$

In Gl. (6) wird über alle einfallenden Richtungen von \mathbf{v}_0 integriert.

Der Reflexionskern w muß einigen allgemeinen Relationen genügen.

$$w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) \geq 0, \quad (7)$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_1 w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) = -(\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{n}) w(-\mathbf{v}_0, -\mathbf{v}_1), \quad (8)$$

$$\int d\Omega_0 w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) = 1. \quad (9)$$

\mathbf{n} ist ein Normalenvektor im Punkte \mathbf{s} . Diese Gleichungen werden in I diskutiert. In Analogie hierzu werden Grenzflächen beschrieben. Die Verteilungsfunktion für von der Grenzfläche wegfliegende Elektronen (in den Leiter „1“ oder den Leiter „2“, vgl. Abb. 1) wird als lineares Funktional der Verteilungsfunktionen für zur Grenzfläche hinfliegende Elektronen angesetzt:

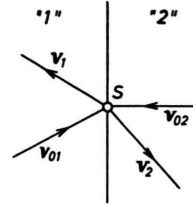


Abb. 1.

$$g_{\omega 1}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_1; \mathbf{r}_0) = \int d\Omega_{01} R^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_{01}) g_{\omega 1}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_{01}; \mathbf{r}_0) + \int d\Omega_{02} D^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_{02}) g_{\omega 2}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_{02}; \mathbf{r}_0) \quad (10)$$

für die Verteilungsfunktion auf der linken Seite der Grenzfläche und

$$g_{\omega 2}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_2; \mathbf{r}_0) = \int d\Omega_{02} R^{(2)}(\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_{02}) g_{\omega 2}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_{02}; \mathbf{r}_0) + \int d\Omega_{01} D^{(2)}(\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_{01}) g_{\omega 1}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_{01}; \mathbf{r}_0) \quad (11)$$

für die Verteilungsfunktion auf der rechten Seite der Grenzfläche. In Gl. (10) wird im ersten Integral über alle aus dem Leiter „1“ auf die Grenzfläche weisende Richtungen von \mathbf{v}_{01} integriert, im zweiten Integral über alle aus dem Leiter „2“ auf die Grenzfläche weisende Richtungen von \mathbf{v}_{02} . Entsprechendes gilt für Gl. (11). Für die Durchlässigkeitskerne und die Reflexionskerne sind wieder eine Reihe allgemeiner Relationen zu fordern

$$D^{(j)} \geq 0, \quad R^{(j)} \geq 0 \quad (j=1, 2) \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_1 R^{(j)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) &= -\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_0 R^{(j)}(-\mathbf{v}_0, -\mathbf{v}_1) \quad (j=1, 2), \\ N_1 \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_1 D^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) &= N_2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_2 D^{(2)}(-\mathbf{v}_0, -\mathbf{v}_1), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \int d\Omega_{01} R^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_{01}) + \int d\Omega_{02} D^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_{02}) &= 1, \\ \int d\Omega_{02} R^{(2)}(\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_{02}) + \int d\Omega_{01} D^{(2)}(\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_{01}) &= 1. \end{aligned} \quad (14)$$

\mathbf{n} ist ein Normalenvektor auf der Grenzfläche. Zusätzlich zu diesen Beziehungen, die in VI begründet werden, fordern wir Drehinvarianz der Kerne: eine gemeinsame Drehung von \mathbf{v}_1 und \mathbf{v}_2 um die Normale soll $R^{(j)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ bzw. $D^{(j)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ ungeändert lassen. Aus der quantenmechanischen Definition von K_ω mittels Greenscher Funktionen lassen sich leicht die Symmetrierelation

$$K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = K_\omega^*(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) \quad (15)$$

und für magnetfeldfreie Leiter mit unmagnetischen Zusätzen die Summenregel von DE GENNES

$$\int d^3\mathbf{r} K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \frac{2\pi N(\mathbf{r}_0)}{2|\omega|} \quad (16)$$

ableiten. Obige Rand- und Grenzbedingungen gewährleisten, daß der mit der Methode der Korrelationsfunktion berechnete Kern auch diese Eigenschaften hat.

3. Integralgleichung und Variationsprinzip

Wir führen zunächst die Green-Funktion $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ des Differentialoperators der Boltzmann-Gleichung (5) ein. Sie ist definiert als diejenige Lösung der Gleichung

$$(\zeta_\omega^{-1}(\mathbf{r}) + \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial}) e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\delta}(\mathbf{v}, \mathbf{v}') \quad (17)$$

($\hat{\mathbf{v}}$ = Einheitsvektor parallel \mathbf{v}), welche die Oberflächenbedingung (6) und die Grenzbedingungen (10), (11) befriedigt. In Gl. (17) ist

$$\frac{1}{\zeta_\omega(\mathbf{r})} = \frac{1}{l(\mathbf{r})} + \frac{2|\omega|}{v(\mathbf{r})}$$

und $l(\mathbf{r}) = (n v)^{-1}$ bedeutet die (lokale, bereichsweise konstante) freie Weglänge der Elektronen. $\hat{\delta}(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ stellt die Deltafunktion der Richtungen von \mathbf{v} und \mathbf{v}' dar. Weiter benötigen wir die Funktion

$$e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega \oint d\Omega' e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'). \quad (18)$$

Aus den Gln. (5) und (17) ergibt sich sofort eine Integralgleichung für $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0)$:

$$g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0) = \int d^3\mathbf{r}' \oint d\Omega' e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') \left\{ \frac{1}{4\pi l(\mathbf{r}')} \oint d\Omega'' \left(\frac{4\pi}{\sigma} \frac{d\sigma(\mathbf{v}' \cdot \mathbf{v}'')}{d\Omega} \right)_{\mathbf{r}'} \cdot g_\omega(\mathbf{r}', \mathbf{v}''; \mathbf{r}_0) + \frac{1}{(2\pi)^2 v(\mathbf{r}')} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0) \right\}. \quad (21)$$

Wir definieren noch die zur Teilchendichte proportionale Größe

$$g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0). \quad (22)$$

Nach Gl. (4) ist $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ bis auf einen Faktor der gesuchte Integralkern K_ω

$$K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = (2\pi)^3 N(\mathbf{r}) g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0).$$

Die Berechnung von $K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ (bzw. von $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$) läßt sich jetzt erheblich vereinfachen durch die Annahme, daß die Elektronen mit Fermi-Geschwindigkeit an den Störstellen isotrop gestreut werden ($d\sigma/d\Omega = \sigma/4\pi$). In diesem Fall erscheint auf der rechten Seite der Gl. (21) nur die Funktion $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$. Also kann durch Integration von Gl. (21) über alle Geschwindigkeitsrichtungen sofort eine Integral-

Gl. (17) läßt sich unter Berücksichtigung der Bedingungen (6), (10) und (11) entlang klassischer Bahnen (gerader Linien) leicht integrieren. Die Integration zeigt, daß $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ entlang dieser Bahnen exponentiell abfällt auf der Länge ζ_ω . Daher sind die Funktionen $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ und $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ nur für $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \lesssim \zeta_\omega$ nennenswert von Null verschieden. Wenn die Punkte \mathbf{r} und \mathbf{r}' in einem gegen ζ_ω großen Abstand von Unstetigkeitsflächen liegen, findet man

$$e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\exp(-\zeta_\omega^{-1}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + 2i\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \quad (19)$$

$$\text{mit} \quad \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = e \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}} d\mathbf{s} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{s}). \quad (20)$$

In Gl. (20) wird geradlinig von \mathbf{r} nach \mathbf{r}' integriert. In der Nähe von Unstetigkeitsflächen ist die rechte Seite der Gl. (19) durch Oberflächen- und Grenzflächenterme zu ergänzen. Diese Terme sowie der allgemeine explizite Ausdruck für $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ ließen sich im Prinzip angeben. Wir verwenden jedoch später ein Rechenverfahren, bei dem diese Größen nicht benötigt werden.

gleichung für $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ gewonnen werden

$$g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \frac{1}{(2\pi)^2 v(\mathbf{r}_0)} e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) + \int d^3\mathbf{r}' e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{1}{l(\mathbf{r}')} g_\omega(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0). \quad (23)$$

Im allgemeinen Fall läßt sich für $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ keine Integralgleichung von der Art der Gl. (23) angeben. Man kann aber leicht plausibel machen, daß Gl. (23) für stark verunreinigte Leiter näherungsweise gültig bleibt, wenn die freie Weglänge überall ersetzt wird durch die Transportweglänge l_{tr} , die definiert ist als

$$l_{tr}^{-1} = n \oint d\Omega \frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} (1 - \cos \vartheta). \quad (24)$$

Dies begründen wir in Anhang 1.

Weiter bemerken wir, daß Gl. (23) richtig bleibt, wenn paramagnetische Zusätze im Leiter verteilt

sind. In diesem Fall ist ζ_ω gebildet mit der freien Weglänge $l(1) = (n\sigma(1))^{-1}$; die in Gl. (21) explizit auftretende freie Weglänge ist zu ersetzen durch $l(2) = (n\sigma(2))^{-1}$. Wir rechnen im folgenden immer mit den beiden Größen ζ_ω und l , obwohl in manchen Gleichungen die Näherung $\zeta_\omega \sim l$ zulässig wäre. Aus diesem Grunde bereitet die spätere Übertragung der Ergebnisse auf Leiter mit paramagnetischen Zuständen keine Schwierigkeiten.

Die in Hinblick auf Gl. (1) eigentlich interessierende Größe ist die Funktion

$$\begin{aligned} \Delta_\omega(\mathbf{r}) &= \int d^3\mathbf{r}_0 g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \Delta(\mathbf{r}_0) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3 N(\mathbf{r})} \int d^3\mathbf{r}_0 K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \Delta(\mathbf{r}_0). \end{aligned} \quad (25)$$

Damit erhält man für die Selbstkonsistenzgleichung

$$\Delta(\mathbf{r}) = (2\pi)^3 g(\mathbf{r}) N(\mathbf{r}) T \sum_\omega \Delta_\omega(\mathbf{r}). \quad (26)$$

Mit der Definition (25) ergibt sich aus Gl. (23) sofort eine im folgenden wichtige Integralgleichung für $\Delta_\omega(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned} \Delta_\omega(\mathbf{r}) &= \int d^3\mathbf{r}_0 \frac{1}{(2\pi)^3 v(\mathbf{r}_0)} e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \Delta(\mathbf{r}_0) \\ &+ \int d^3\mathbf{r}' e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{1}{l(\mathbf{r}')} \Delta_\omega(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (27)$$

Wir betrachten nur noch den schmutzigen Grenzfall, definiert durch

$$l \ll v/2|\omega|.$$

In diesem Grenzfall ist $K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ im Innern von homogenen Bereichen Lösung der Diffusionsgleichung (2) und daher ist nach Gl. (25) $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ Lösung von

$$\left(2|\omega| - \frac{v}{3} \tilde{\partial}^2\right) \Delta_\omega(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \Delta(\mathbf{r}). \quad (28)$$

Die Diffusionsgleichung (28) kann auch direkt aus Gl. (27) gewonnen werden. Dazu läßt sich irgendeine der Rechenmethoden verwenden, mit denen man aus Gl. (1) linearisierte Ginzburg-Landau-Gleichungen (für saubere Supraleiter) ableitet. Bei dieser Rechnung, auf die wir hier im einzelnen nicht näher eingehen wollen, macht man die Annahme, daß $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ und $\Delta(\mathbf{r})$ auf der Reichweite des Kerns $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ räumlich schwach veränderlich sind. Diese Annahme ist mit Gl. (28) und daher auch mit Gl. (26) verträglich, denn wenn $\Delta(\mathbf{r})$ schwach ver-

änderlich ist auf der Länge $\zeta_\omega \sim l$, ändert sich $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ als Lösung der Gl. (28) ebenfalls wenig auf dieser Länge. In der Umgebung von Unstetigkeitsflächen jedoch werden $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ und $\Delta(\mathbf{r})$ schnell veränderlich⁹. Daher verliert hier auch die Differentialgleichung für $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ ihren Sinn. Der Abstand von Unstetigkeitsflächen, bis zu dem Gl. (28) noch richtig bleibt, ist gegeben durch die Reichweite der Funktion $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$, also durch die freie Weglänge l . (Es wird natürlich vorausgesetzt, daß alle Lineardimensionen der Leiter groß gegen l sind.) Wir interessieren uns jetzt nicht für den genauen räumlichen Verlauf von $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ und $\Delta(\mathbf{r})$ in der Umgebung von Unstetigkeitsflächen, sondern nur für die glatten Anteile dieser Funktionen, präziser ausgedrückt: wir extrapolieren $\Delta(\mathbf{r})$ als glatte Funktion bis heran an Unstetigkeitsflächen; $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ wird dann als Lösung der Differentialgleichung (28) ebenfalls bis heran an Unstetigkeitsflächen extrapoliert. Hierzu äquivalent ist offenbar, daß man den Integralkern $K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ im gesamten Leiter durch diejenige Lösung der Diffusionsgleichung (2) ersetzt, die im Innern von homogenen Bereichen mit $K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ übereinstimmt.

Zur Ableitung der Rand- und Grenzbedingungen für den glatten Anteil von $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ gehen wir aus von der Integralgleichung (27). Wir bemerken zunächst, daß in der Inhomogenität dieser Gleichung $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ durch eine δ -Funktion angenähert werden kann, denn $\Delta(\mathbf{r})$ ist schwach veränderlich auf der freien Weglänge l . Die Normierung der δ -Funktion gewinnt man leicht aus Gl. (19). Dabei hat man zu beachten, daß der Phasenfaktor $\exp(2i\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))$ durch 1 ersetzt werden kann, denn die Phase $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ist für alle praktisch vorkommenden Magnetfelder klein gegen 1 (für $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \leq l$). Es ergibt sich also

$$\begin{aligned} \Delta_\omega(\mathbf{r}) &= \frac{\zeta_\omega(\mathbf{r})}{(2\pi)^2 v(\mathbf{r})} \Delta(\mathbf{r}) \\ &+ \int d^3\mathbf{r}' e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{1}{l(\mathbf{r}')} \Delta_\omega(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (29)$$

Diese Ersetzung von $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ durch eine δ -Funktion ist (im schmutzigen Grenzfall) ganz unproblematisch im Innern der Leiter. In der Nähe einer Grenzfläche jedoch wird die Inhomogenität der Gl. (27) selbst dann schnell veränderlich, wenn man $\Delta(\mathbf{r})$ durch eine glatte Funktion approximiert. Da wir uns aber nur für den glatten Anteil von $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ interessieren, darf auch die Inhomogenität der Integralgleichungen bis heran an Unstetigkeitsflächen durch ihren lang-

⁹ W. SILVERT u. L. COOPER, Phys. Rev. **141**, 336 [1966].

sam veränderlichen Anteil, d. h. durch

$$\frac{\zeta_\omega(\mathbf{r})}{(2\pi)^2 v(\mathbf{r})} \Delta(\mathbf{r})$$

ersetzt werden.

Zu Gl. (29) läßt sich ein Variationsprinzip formulieren. Wir definieren die Funktionen

$$I_\omega(\mathbf{r}) = \frac{N(\mathbf{r}) \zeta_\omega(\mathbf{r})}{(2\pi)^2 l(\mathbf{r})} \Delta(\mathbf{r}) \quad (30)$$

und

$$P_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r})}{l(\mathbf{r})} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r})}{l(\mathbf{r}) l(\mathbf{r}')} e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (31)$$

Damit schreibt sich Gl. (29) in der Form

$$\int d^3\mathbf{r}' P_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta_\omega(\mathbf{r}') = I_\omega(\mathbf{r}). \quad (32)$$

In Anhang 2 wird gezeigt, daß der Integraloperator $P_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ hermitesch und positiv ist. Hieraus folgt zunächst, daß die Integralgleichung (32) eine eindeutig bestimmte Lösung hat (das war aus physikalischen Gründen nicht anders zu erwarten). Weiter macht man sich leicht klar, daß das reelle Variationsfunktional

$$J(\Phi) = (\Phi | P_\omega | \Phi) - (\Phi | I_\omega) - (I_\omega | \Phi) \quad (33)$$

ein absolutes Minimum besitzt, welches es annimmt für $\Phi = \Delta_\omega$. Gl. (13) ist äquivalent zu dem aus der Theorie der elektrischen Leitfähigkeit bekannten Kohlerschen Variationsprinzip für eine Integralgleichung der Form (32).

Das Variationsfunktional (33) wird in den folgenden Abschnitten in physikalisch interessanten Fällen ausgewertet. Zur Ableitung der Rand- und Grenzbedingungen für den langsam veränderlichen Anteil von $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ schränken wir dabei im Sinne der obigen Diskussion die Menge der Testfunktionen ein: es werden nur solche Funktionen zur Konkurrenz zugelassen, die sich bis heran an Unstetigkeitsflächen räumlich wenig ändern auf der freien Weglänge l .

Zunächst soll aber noch in Hinblick auf Abschnitt 5 eine eindimensionale Formulierung des Variationsprinzips gegeben werden, die natürlich nur bei speziellen geometrischen Anordnungen möglich ist. Sie erweist sich aber als zweckmäßig bei der Untersuchung von Grenzflächenproblemen. Wir betrachten eine Doppelschicht, bestehend aus zwei homogenen

Leitern, die an der Grenzfläche $x = 0$ in elektrischem Kontakt stehen. An den Flächen $x = -a_1$ und $x = a_2$ grenzen die Leiter an Isolatoren. Die Durchlässigkeits- und Reflexionskerne seien unabhängig von y und z . Ein etwa vorhandenes Magnetfeld sei räumlich homogen und parallel zur Grenzfläche, $\mathbf{H} = H \hat{\mathbf{z}}$. Dann kann das Vektorpotential in der Form $\mathbf{A}(x) = x \hat{\mathbf{y}} H$ gewählt werden. Aus der Boltzmann-Gleichung (5) zusammen mit den Rand- und Grenzbedingungen folgt, daß $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0)$ außer von \mathbf{v}, x, x_0 nur von $y - y_0, z - z_0$ abhängt. Es ist dann keine Beschränkung der Allgemeinheit, wenn man $\Delta(\mathbf{r})$ ansetzt in der Form

$$\Delta(\mathbf{r}) = \Delta(x) \exp(i K_y y + i K_z z). \quad (34)$$

In Gl. (29) kommt es daher an auf die Größe

$$\bar{e}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \exp(-i(K_y y + K_z z)) \cdot e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp(i(K_y y + K_z z)). \quad (35)$$

Wir definieren die Funktion

$$\bar{e}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') = \exp(-i(K_y y + K_z z)) \cdot e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') \exp(i(K_y y + K_z z)) \quad (36)$$

und erhalten damit

$$\bar{e}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega \oint d\Omega' \bar{e}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'). \quad (37)$$

$\bar{e}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ gehorcht offenbar der Gl. (17) mit dem abgeänderten Vektorpotential

$$\mathbf{A}(x, K_y, K_z) \equiv \mathbf{A}(x) + \frac{1}{2e} (K_y \hat{\mathbf{y}} + K_z \hat{\mathbf{z}}). \quad (38)$$

Folglich bleiben alle Formeln und alle Aussagen in diesem Abschnitt richtig, wenn man \mathbf{r} durch x und $\mathbf{A}(x)$ durch $\mathbf{A}(x, K_y, K_z)$ ersetzt. Insbesondere ergibt sich mit

$$\bar{P}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{N(x) v(x)}{l(x)} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{N(x) v(x)}{l(x) l(x')} \bar{e}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (39)$$

$$\text{und} \quad \bar{P}_\omega(x, x') = \int_{-\infty}^{+\infty} dy' dz' \bar{P}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

für das auf die Flächeneinheit der Grenzfläche bezogene Variationsfunktional

$$j(\Phi) = \int_{-a_1}^{+a_2} dx dx' \Phi^*(x) \bar{P}_\omega(x, x') \Phi(x') - \int_{-a_1}^{+a_2} dx \Phi^*(x) I_\omega(x) - \int_{-a_1}^{+a_2} dx I_\omega^*(x) \Phi(x). \quad (40)$$

4. Die Randbedingung für die Diffusionsgleichung

Wir betrachten einen homogenen Leiter, der an einen Isolator grenzt. An der Leiteroberfläche gilt daher für die Verteilungsfunktion die Randbedingung (6). Wir wenden uns zunächst der Auswertung der Größe

$$F(\Phi) = \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega \oint d\Omega' \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \cdot \Phi^*(\mathbf{r}) e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') \Phi(\mathbf{r}') \quad (41)$$

zu. Gemäß der Bemerkung im Anschluß an Gl. (33) bedeutet Φ in Gl. (41) eine Testfunktion, die sich bis heran an die Oberfläche auf der Länge ζ_ω räumlich wenig ändert. Die durch

$$\Phi_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \oint d\Omega' \int d^3\mathbf{r}' e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') \Phi(\mathbf{r}') \quad (42)$$

$\Phi_\omega^{(1)}$ erfüllt offenbar die inhomogene Randbedingung

$$\Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}) - \int d\Omega_0 w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_0) = -\Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_1) + \int d\Omega_0 w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) \Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_0). \quad (47)$$

Gl. (47) kann noch erheblich vereinfacht werden. Die Integration von Gl. (45) entlang klassischer Bahnen (gerader Linien) zeigt nämlich, daß $\Phi_\omega^{(1)}$ exponentiell abfällt entlang dieser Bahnen mit der charakteristischen Länge $\zeta_\omega \sim l$. Wenn daher alle Lineardimensionen des Leiters groß sind gegen l , folgt notwendig

$$\Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_0) = 0. \quad (48)$$

Daher kann $\Phi_\omega^{(1)}$ in einem Oberflächenpunkt \mathbf{s} allein durch die spezielle Lösung Φ ausgedrückt werden gemäß

$$\Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_1) = -\Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_1) + \int d\Omega_0 w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) \Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_0). \quad (49)$$

Wir betrachten jetzt das Funktional F , das mit Gl. (42) und Gl. (46) geschrieben werden kann in der Form

$$F(\Phi) = \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) + \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}). \quad (50)$$

Der zweite Term in Gl. (50) wird durch fortgesetzte Anwendung von Gl. (45) und partielle Integration in ein Oberflächenintegral verwandelt:

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) &= - \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \zeta_\omega \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial} \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \\ &= - \int d^3\mathbf{s} \cdot \hat{\mathbf{v}} \Phi^*(\mathbf{s}) \zeta_\omega \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}) + \int d^3\mathbf{r} (\zeta_\omega \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial} \Phi(\mathbf{r}))^* \cdot \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \\ &= - \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_\omega \int d^2\mathbf{s} \cdot \hat{\mathbf{v}} ((\zeta_\omega \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial})^n \Phi(\mathbf{s}))^* \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}). \end{aligned} \quad (51)$$

Damit ergibt sich

$$F(\Phi) = F_{\text{Vol.}}(\Phi) + F_{\text{Oberfl.}}(\Phi) \quad (52)$$

mit dem Volumenterm

$$F_{\text{Vol.}}(\Phi) = \frac{\zeta_\omega}{4\pi} \oint d\Omega \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \sum_{n=0}^{\infty} (-\zeta_\omega \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial})^{2n} \Phi(\mathbf{r}) \quad (53)$$

und dem Oberflächenterm

$$F_{\text{Oberfl.}}(\Phi) = \frac{\zeta_\omega}{4\pi} \int d\Omega_1 \int d^2\mathbf{s} \cdot \hat{\mathbf{v}}_1 (\Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_1) - \int d\Omega_0 w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) \Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_0) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} [(\zeta_\omega \mathbf{v}_1 \cdot \tilde{\partial})^n \Phi(\mathbf{s})]^*). \quad (54)$$

¹⁰ Das folgende Verfahren zur Auswertung eines Ausdrucks der Form (41) wurde zuerst von G. LÜDERS in einer unveröffentlichten Arbeit angegeben.

definierte Funktion gehorcht der Gleichung

$$(\zeta_\omega^{-1} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial}) \Phi_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \Phi(\mathbf{r}) \quad (43)$$

mit der Randbedingung (6). Aus Gl. (43) läßt sich eine spezielle Lösung $\Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ in Form einer Reihe gewinnen¹⁰

$$\begin{aligned} \Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) &= \frac{1}{\zeta_\omega^{-1} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial}} \Phi(\mathbf{r}) \\ &= \zeta_\omega \sum_{n=0}^{\infty} (-\zeta_\omega \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial})^n \Phi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (44)$$

Um eine Lösung von Gl. (43) zu erhalten, die die Randbedingung (6) befriedigt, addieren wir eine Lösung der homogenen Gleichung

$$(\zeta_\omega^{-1} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial}) \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = 0 \quad (45)$$

$$\text{zu } \Phi_\omega^{(0)}: \Phi_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \Phi_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) + \Phi_\omega^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}); \quad (46)$$

($\Phi^{(0)}(\mathbf{s}, \mathbf{v}_1)$ nach Gl. (44)). In Gl. (54) ist über alle von der Oberfläche fortweisende Richtungen von \mathbf{v}_1 zu integrieren. Mit den Gln. (53) und (54) erhält man eine Reihenentwicklung von $F(\Phi)$ nach der kleinen Größe ζ_ω/L (L ist dabei eine Länge, auf der sich Φ wesentlich ändert). Selbstverständlich sind diese Reihen nach einer gewissen Anzahl von Gliedern abzubrechen. In niedrigster nichttrivialer Näherung nehmen wir nur die Summenglieder $n=0, 1$ im Volumenterm (53) mit. Demgemäß sind vom Oberflächenterm alle die Glieder mitzunehmen, die die eichinvariante Ableitung höchstens linear enthalten. Fassen wir diese Terme zusammen, so ergibt sich

$$F(\Phi) = \zeta_\omega \int d^3\mathbf{r} \left(|\Phi(\mathbf{r})|^2 - \frac{\zeta_\omega^2}{3} |\tilde{\partial}\Phi(\mathbf{r})|^2 \right). \quad (55)$$

Mit Gl. (33) erhalten wir für das Variationsfunktional

$$J(\Phi) = \frac{Nv}{l} \left(1 - \frac{\zeta_\omega}{l} \right) \int d^3\mathbf{r} |\Phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{Nv}{l} \frac{\zeta_\omega^3}{3l} \int d^3\mathbf{r} |\tilde{\partial}\Phi(\mathbf{r})|^2 - (\Phi|I_\omega) - (I_\omega, \Phi). \quad (56)$$

Es wird im Rahmen der hier betrachteten Näherung unabhängig von den Reflexionseigenschaften der Oberfläche. Dies ist eine Folge der beiden allgemeinen Beziehungen (8) und (9) für den Reflexionskern $w(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$.

Streng genommen ist der Ausdruck (56) in der Menge derjenigen Funktionen zu variieren, deren charakteristische Länge groß ist gegen l . Der Einfachheit halber wird aber frei nach Φ^* variiert. Das ist erlaubt, da auf diese Weise Funktionen erhalten werden, die sich wenig ändern auf der Länge l . Die freie Variation von Gl. (56) ergibt mit

$$\left(1 - \frac{\zeta_\omega}{l} \right) = \frac{\zeta_\omega}{v} 2|\omega| \quad (57)$$

die Diffusionsgleichung

$$\left(2|\omega| - \frac{vl}{3} \tilde{\partial}^2 \right) \Delta_\omega(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \Delta(\mathbf{r}) \quad (58)$$

und die dazugehörige Randbedingung

$$\mathbf{n} \cdot \tilde{\partial} \Delta_\omega(\mathbf{s}) = 0 \quad (59)$$

(\mathbf{s} ist ein Oberflächenpunkt). Sind paramagnetische Zusätze im Leiter verteilt, so gilt nach S. 659

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\zeta_\omega}{l} \right) &= \frac{\zeta_\omega}{v} \left(2|\omega| + \frac{v}{l(1)} - \frac{v}{l(2)} \right) \\ &= \frac{\zeta_\omega}{v} 2(|\omega| + nv\sigma_s). \end{aligned} \quad (60)$$

Während also in diesem Fall Gl. (59) ungeändert bleibt, ist in Gl. (58) $|\omega|$ zu ersetzen durch $|\omega| + nv\sigma_s$. Die Unterscheidung zwischen $l(1)$ und $l(2)$ in dem Term $vl/3 \tilde{\partial}^2 \Delta_\omega$ ist wegen der üblichen Annahme $\sigma_s \ll \sigma_1$ bedeutungslos.

Damit haben wir unter Berücksichtigung der mikroskopischen Reflexionseigenschaften der Oberfläche die bereits von DE GENNES angegebene Randbedingung (59) für die Diffusionsgleichung (58)

bestätigt. Diese Randbedingung, die von LÜDERS^{2, 11} für den Spezialfall spiegelnder Reflexion begründet wurde, bleibt richtig bei beliebiger Elektronenreflexion an der Oberfläche.

Das Ergebnis soll noch in anderer Form beschrieben werden. Dazu definieren wir die Green-Funktion $K'_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ der Differentialgleichung (58) durch

$$\left(2|\omega| - \frac{vl}{3} \tilde{\partial}^2 \right) K'_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = 2\pi N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (61)$$

$$\mathbf{n} \cdot \tilde{\partial} K'_\omega(\mathbf{s}, \mathbf{r}_0) = 0 \quad (62)$$

(\mathbf{s} auf der Oberfläche und \mathbf{r}_0 beliebig im Leiter). Mit dieser Funktion läßt sich der langsam veränderliche Anteil der durch Gl. (25) definierten Größe $\Delta_\omega(\mathbf{r})$ berechnen gemäß

$$\Delta_\omega(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3 N(\mathbf{r})} \int d^3\mathbf{r}_0 K'_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \Delta(\mathbf{r}_0). \quad (63)$$

Ein Vergleich der beiden Beziehungen (25) und (63) zeigt, daß sich $K'_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$, der Integralkern der Diffusionsnäherung, mit $K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ identifizieren läßt in dem Sinne, daß der langsam veränderliche Anteil von

$$\int d^3\mathbf{r}_0 K'_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \Delta(\mathbf{r}_0) \quad (64)$$

übereinstimmt mit

$$\int d^3\mathbf{r}_0 K_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \Delta(\mathbf{r}_0) \quad (65)$$

bei beliebiger, auf der freien Weglänge schwach veränderlicher Funktion $\Delta(\mathbf{r})$.

5. Grenzbedingungen für die Diffusionsgleichung

Ähnlich wie in Abschnitt 4 lassen sich auch die Grenzbedingungen zur Diffusionsgleichung an der Kontaktfläche zwischen zwei verschiedenen Leitern gewinnen. Wir wollen uns dabei aber auf eine einfache geometrische Anordnung der Leiter beschränken, die in Abschnitt 3 beschriebene Doppelschicht. Ein etwa vorhandenes Magnetfeld möge parallel sein zur Grenzfläche. In diesem Fall läßt sich das Problem eindimensional formulieren, was eine erhebliche Vereinfachung bedeutet.

Die Auswertung des Variationsfunktionals $j(\Phi)$, Gl.(40), erfolgt nach den gleichen Gesichtspunkten wie die von $J(\Phi)$. Wir betrachten zunächst wieder das Funktional

$$f(\Phi) = \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega \oint d\Omega' \int_{-a_1}^{a_2} dx dx' \Phi^*(x) \bar{e}_\omega(x, \mathbf{v}; x', \mathbf{v}') \Phi(x') \frac{N(x) v(x)}{l(x) l(x')}. \quad (66)$$

Die durch

$$\Phi_\omega(x, \mathbf{v}) = \oint d\Omega' \int_{-a_1}^{a_2} dx' \bar{e}_\omega(x, \mathbf{v}; x', \mathbf{v}') \Phi(x') \frac{1}{l(x')} \quad (67)$$

definierte Funktion gehorcht der Gleichung

$$(\zeta_\omega^{-1}(x) + \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial}) \Phi_\omega(x, \mathbf{v}) = \frac{1}{l(x)} \Phi(x) \quad (68)$$

mit der Randbedingung (6) bei $x = -a_1, a_2$ und den Grenzbedingungen (10), (11) bei $x = 0$. Eine spezielle in den Intervallen $-a_1 < x < 0$ und $0 < x < a_2$ definierte Lösung $\Phi_\omega^{(0)}(x, \mathbf{v})$ von Gl.(68) ist gegeben durch

$$\Phi_\omega^{(0)}(x, \mathbf{v}) = \frac{1}{\zeta_\omega^{-1}(x) + \mathbf{v} \cdot \tilde{\partial}} \frac{\Phi(x)}{l(x)} = \frac{\zeta_\omega(x)}{l(x)} \sum_{n=0}^{\infty} (-\zeta_\omega(x) \mathbf{v} \cdot \tilde{\partial})^n \Phi(x). \quad (69)$$

$\Phi_\omega(x, \mathbf{v})$ läßt sich schreiben in der Form

$$\Phi_\omega(x, \mathbf{v}) = \Phi_\omega^{(0)}(x, \mathbf{v}) + \Phi_\omega^{(1)}(x, \mathbf{v}); \quad (70)$$

dabei ist $\Phi_\omega^{(1)}(x, \mathbf{v})$ Lösung der homogenen Gleichung

$$(\zeta_\omega^{-1}(x) + \hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial}) \Phi_\omega^{(1)}(x, \mathbf{v}) = 0 \quad (71)$$

und ist so zu bestimmen, daß $\Phi_\omega(x, \mathbf{v})$ den richtigen Rand- und Grenzbedingungen genügt. Wir setzen jetzt voraus, daß die Schichtdicken a_j groß sind gegen die jeweiligen freien Weglängen l_j . Dann gilt für $\Phi_\omega^{(1)}(x, \mathbf{v})$ an den Oberflächen Gl. (49)

$$\Phi_\omega^{(1)}(s, \mathbf{v}_1) = -\Phi_\omega^{(0)}(s, \mathbf{v}_1) + \int d\Omega_0 w(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0) \Phi_\omega^{(0)}(s, \mathbf{v}_0), \quad s = -a_1, a_2. \quad (72)$$

$\Phi_\omega^{(1)}(x, \mathbf{v})$ verschwindet aber auch an der Grenzfläche für auf die Grenzfläche weisende Richtungen von \mathbf{v}

$$\Phi_\omega^{(1)}(x = -0, \mathbf{v}) = 0, \quad \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{v}} > 0, \quad (73) \quad \Phi_\omega^{(1)}(x = +0, \mathbf{v}) = 0, \quad \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{v}} < 0. \quad (74)$$

Unter Beachtung von Gl. (73) und Gl. (74) lassen sich die Grenzbedingungen umschreiben

$$\Phi_{\omega 1}^{(1)}(\mathbf{v}_1) = -\Phi_{\omega 1}^{(0)}(\mathbf{v}_1) + \int d\Omega_2 R^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \Phi_{\omega 1}^{(0)}(\mathbf{v}_2) + \int d\Omega_3 D^{(1)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3) \Phi_{\omega 2}^{(0)}(\mathbf{v}_3), \quad (75)$$

$$\Phi_{\omega 2}^{(1)}(\mathbf{v}_1) = -\Phi_{\omega 2}^{(0)}(\mathbf{v}_1) + \int d\Omega_2 R^{(2)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \Phi_{\omega 2}^{(0)}(\mathbf{v}_2) + \int d\Omega_3 D^{(2)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3) \Phi_{\omega 1}^{(0)}(\mathbf{v}_3). \quad (76)$$

Funktionswerte an der linken bzw. rechten Seite der Grenzfläche werden hier und im folgenden durch den unteren Index 1 bzw. 2 gekennzeichnet. Wir setzen jetzt Gl. (70) ein in das Funktional f

$$f(\Phi) = \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega \int_{-a_1}^{a_2} dx \Phi^*(x) \Phi_\omega^{(0)}(x, \mathbf{v}) \frac{N(x) v(x)}{l(x)} + \frac{1}{4\pi} \oint d\Omega \int_{-a_1}^{a_2} dx \Phi^*(x) \Phi_\omega^{(1)}(x, \mathbf{v}) \frac{N(x) v(x)}{l(x)}. \quad (77)$$

Der zweite Term wird wieder durch fortgesetzte Anwendung von Gl. (71) und partielle Integration in ein „Oberflächenintegral“ umgewandelt. Es soll nur das Ergebnis der im folgenden wichtigen ersten beiden Integrationen angegeben werden [vgl. Gl. (51)]

$$\int_{-a_1}^{a_2} dx \Phi^*(x) \Phi_{\omega}^{(1)}(x, \mathbf{v}) = -\frac{N_1 v_1}{l_1} A_1(\mathbf{v}) - \frac{N_2 v_2}{l_2} A_2(\mathbf{v}) + B(\mathbf{v}). \quad (78)$$

B ist die Summe aller Glieder, die mehr als eine eichinvariante Ableitung enthalten. Weiter bedeutet

$$A_1(\mathbf{v}) = \zeta_{\omega 1} \mathbf{n}_1 \cdot \hat{\mathbf{v}} \Phi_1^* \Phi_{\omega 1}^{(1)}(\mathbf{v}) + \zeta_{\omega 1} \mathbf{n}_2 \cdot \hat{\mathbf{v}} \Phi^*(-a_1) \Phi_{\omega}^{(1)}(-a_1, \mathbf{v}) \\ + \zeta_{\omega 1}^2 \mathbf{n}_1 \cdot \hat{\mathbf{v}} (\hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial} \Phi_1)^* \Phi_{\omega 1}^{(1)}(\mathbf{v}) + \zeta_{\omega 1}^2 \mathbf{n}_2 \cdot \hat{\mathbf{v}} (\hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial} \Phi(-a_1))^* \Phi_{\omega}^{(1)}(-a_1, \mathbf{v}). \quad (79)$$

In Gl. (79) sind die Normalenvektoren $\mathbf{n}_1 = \hat{\mathbf{x}}$ und $\mathbf{n}_2 = -\mathbf{x}$ eingeführt worden. $A_2(\mathbf{v})$ ergibt sich aus $A_1(\mathbf{v})$ durch die Substitution $(\frac{1}{2}) \rightarrow (\frac{2}{1})$, $-a_1 \rightarrow a_2$. Bei langsam veränderlichen Testfunktionen $\Phi(x)$ darf die Reihe (69) wieder nach dem dritten Glied abgebrochen werden. Vom Oberflächenintegral werden die Glieder gleicher Größenordnungen mitgenommen, also alle Terme, die höchstens eine eichinvariante Ableitung enthalten. Die Gln. (72), (75) und (76) werden eingesetzt in Gl. (79). Danach faßt man die Gln. (69), (77), (78) und (79) zusammen. Der so erhaltene Ausdruck für $j(\Phi)$ wird eingesetzt in Gl. (40). Auf diese Weise findet man für das Variationsfunktional $j(\Phi)$ im Rahmen der hier betrachteten Näherung

$$j(\Phi) = -G_1(\Phi) - G_2(\Phi) - (I_{\omega} | \Phi) \quad (80)$$

mit

$$G_1(\Phi) = \int_{-a_1}^0 dx \Phi^*(x) I_{\omega}(x) + \int_{-a_1}^0 dx \frac{N_1 v_1}{l_1} \Phi^*(x) \left(\frac{\zeta_{\omega 1}}{l_1} - 1 + \frac{\zeta_{\omega 1}^3}{3 l_1} \tilde{\partial}^2 \right) \Phi(x) \\ + \frac{N_1 v_1}{4 \pi} \frac{\zeta_{\omega 1}^2}{l_1} \left\{ -|\Phi_1|^2 d_1 - \zeta_{\omega 1} \mathbf{d}_1 \cdot (\tilde{\partial} \Phi_1)^* \Phi_1 - \zeta_{\omega 1} \tilde{\partial} \Phi_1^* \Phi_1 \cdot \left(\frac{2 \pi}{3} \mathbf{n}_1 - \mathbf{r}_1 \right) \right\} \\ + \frac{N_1 v_1}{4 \pi} \frac{\zeta_{\omega 1} \zeta_{\omega 2}}{l_1 l_2} \{ \Phi_1^* \Phi_2 d_1 + \zeta_{\omega 1} \mathbf{d}_1 \cdot (\tilde{\partial} \Phi_1)^* \Phi_2 + \zeta_{\omega 2} \Phi_1^* \mathbf{D}_1 \cdot \tilde{\partial} \Phi_2 \} \\ - \frac{N_1 v_1}{l_1} \Phi^*(-a_1) \mathbf{n}_2 \cdot \tilde{\partial} \Phi(-a_1) \frac{\zeta_{\omega 1}^3}{3 l_1}. \quad (81)$$

$G_2(\Phi)$ erhält man aus $G_1(\Phi)$ durch die Substitutionen $(\frac{1}{2}) \rightarrow (\frac{2}{1})$ und $-a_1 \rightarrow a_2$ (natürlich ist dann auch von 0 bis a_2 zu integrieren). In Gl. (81) bedeuten

$$r_j = \int d\Omega d\Omega' (-\mathbf{n}_j \cdot \hat{\mathbf{v}}) R^{(j)}(\mathbf{v}, -\mathbf{v}'), \\ \mathbf{r}_j = \int d\Omega d\Omega' (-\mathbf{n}_j \cdot \hat{\mathbf{v}}) R^{(j)}(\mathbf{v}, -\mathbf{v}') \hat{\mathbf{v}}, \\ d_j = \int d\Omega d\Omega' (-\mathbf{n}_j \cdot \hat{\mathbf{v}}) D^{(j)}(\mathbf{v}, -\mathbf{v}'), \\ \mathbf{d}_j = \int d\Omega d\Omega' (-\mathbf{n}_j \cdot \hat{\mathbf{v}}) D^{(j)}(\mathbf{v}, -\mathbf{v}') \hat{\mathbf{v}}, \\ \mathbf{D}_j = \int d\Omega d\Omega' (-\mathbf{n}_j \cdot \hat{\mathbf{v}}) D^{(j)}(\mathbf{v}, -\mathbf{v}') \hat{\mathbf{v}}', \\ j = 1, 2. \quad (82)$$

Wir merken an, daß die Vektoren in Gl. (82) wegen der vorausgesetzten Drehinvarianz von $R^{(j)}(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ und $D^{(j)}(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ parallel sind zu $\hat{\mathbf{x}}$.

Die in Gl. (82) definierten Koeffizienten sind nicht unabhängig voneinander, aus den allgemeinen Eigenschaften (13) und (14) für die Reflexions- und Durchlässigkeitskoeffizienten gewinnt man leicht die Beziehungen

$$r_j + d_j = \pi, \quad \mathbf{r}_j + \mathbf{d}_j = -\frac{2 \pi}{3} \mathbf{n}_j, \\ N_1 v_1 d_1 = N_2 v_2 d_2, \quad N_j v_j \mathbf{d}_j = N_k v_k \mathbf{D}_k, \quad (83) \\ (j = 1, 2; \quad k = 1, 2; \quad j \neq k).$$

Daher sind die uns interessierenden Größen d_j , \mathbf{d}_j , \mathbf{D}_j bereits vollständig durch die Reflexionskerne $R^{(j)}(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ festgelegt.

Bevor wir das Variationsfunktional $j(\Phi)$ auswerten, soll zunächst noch eine bestimmte Klasse von Reflexionskernen genauer diskutiert werden, und zwar gelte

$$\int d\Omega' R^{(j)}(\mathbf{v}, \mathbf{v}') = R_j \quad (84)$$

mit von \mathbf{v} unabhängigem R_j . Gl. (84) ist erfüllt bei Grenzflächen, die teils spiegelnd, teils diffus reflektieren, also

$$R^{(j)}(\mathbf{v}, \mathbf{v}') = R_j \left(p_j \frac{\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}}'}{\pi} + (1 - p_j) \delta(\mathbf{v}, \mathbf{v}' - (\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{v}') \mathbf{n}_j) \right) \quad (85)$$

mit $0 \leq p_j \leq 1$. R_j gibt die Stärke der Reflexion an, p_j die Diffusität. Wir sehen aber sofort, daß die in Gl.

(82) definierten Größen von p_j unabhängig sind, denn gehen wir mit dem Ansatz (85) bzw. mit dem allgemeineren Ansatz (84) ein in Gl. (82), so folgt

$$r_j = \pi R_j, \quad \mathbf{r}_j = -\frac{2\pi}{3} R_j \mathbf{n}_j \quad (86)$$

und daraus mit Gl. (83)

$$d_j = \pi(1 - R_j), \quad \mathbf{d}_j = -\frac{2\pi}{3} \mathbf{n}_j(1 - R_j). \quad (87)$$

Nach Gl. (12) ist $D^{(j)}(\mathbf{v}, \mathbf{v}') \geq 0$ und daher auch $d_j \geq 0$, also $0 \leq R_j \leq 1$. Die beiden Koeffizienten R_j sind nicht unabhängig voneinander, vielmehr ist nach Gl. (83)

$$N_1 v_1(1 - R_1) = N_2 v_2(1 - R_2). \quad (88)$$

Daher läßt sich eine Grenzfläche mit der Eigenschaft (84) in der von uns betrachteten Näherung durch einen einzigen Parameter charakterisieren. Es sei

$$N_1 v_1 \leq N_2 v_2.$$

Dann wählen wir $R_1 \equiv R$ als unabhängige Größe. Für $R=0$ ist $R_2 = 1 - \frac{N_1 v_1}{N_2 v_2}$, nur für $N_1 v_1 = N_2 v_2$ kann die

Grenzfläche völlig reflexionsfrei werden. Diese Eigenschaft bleibt richtig bei beliebiger Elektronenreflexion, sie folgt unmittelbar aus den Gln. (13) und (14). Gl. (84) erfaßt natürlich nicht alle mathematisch denkbaren Reflexionskerne; daher sollen die Gleichungen im folgenden mit den allgemeinen Koeffizienten aus Gl. (82) angeschrieben werden. Allerdings wird man aber wohl annehmen können, daß eine realistische Grenzfläche die Elektronen diffus [Gl. (85) mit $p_j=1$] reflektiert.

Gl. (80) ist zu variieren in der Menge derjenigen Funktionen, die sich wenig ändern auf der Länge ζ_ω . Wir bemerken zunächst, daß das Variationsfunktional (80) in unserer Näherung bei beliebiger Wahl von $\Phi(x)$ reell ist, daher darf unabhängig nach $\Phi^*(x)$ variiert werden. Bei festen Rand- und Grenzbedingungen von $\Phi^*(x)$ variieren wir zuerst frei im Volumenterm. Diese Variation führt offenbar auf die Diffusionsgleichung (vgl. Abschn. 4)

$$\left(2|\omega| - \frac{v(x)l(x)}{3} \tilde{\partial}^2\right) \Delta_\omega(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \Delta(x) \quad (89)$$

$[|\omega| \rightarrow (|\omega| + n v \sigma_s)_x]$ für Leiter mit paramagnetischen Zusätzen] und damit auf Funktionen, die

sich wenig ändern auf der Länge ζ_ω . Im zweiten Schritt minimalisieren wir Gl. (80) in dieser Funktionsklasse. Die allgemeine Lösung der Gl. (89) ist die Summe aus einer speziellen, fest gewählten Lösung $\Delta_\omega^{(0)}(x)$ der inhomogenen Gleichung und der allgemeinen Lösung der homogenen Diffusionsgleichung

$$\left(2|\omega| - \frac{v(x)l(x)}{3} \tilde{\partial}^2\right) \eta(x) = 0. \quad (90)$$

Setzen wir für $\Phi^*(x)$ diese Summe ein in Gl. (80), so erhalten wir zwei Terme, die aus $j(\Phi)$ hervorgehen, indem $\Phi^*(x)$ einmal ersetzt wird durch $(\Delta_\omega^{(0)}(x))^*$, zum anderen durch $\eta^*(x)$. Nur der zweite Term ist von Bedeutung, da bei der Variation $(\Delta_\omega^{(0)}(x))^*$ festgehalten werden darf. Die Lösung der Gl. (90) enthält vier unabhängige Integrationskonstanten, etwa die Funktionswerte von $\eta^*(x)$ an der linken und rechten Seite der Grenzfläche und an den Oberflächen. Das Verschwinden der partiellen Ableitungen nach diesen Parametern ist die Stationaritätsbedingung. Nun treten in dem zu variierenden Ausdruck Größen der Form $\zeta_{\omega j} \mathbf{d}_j \cdot (\tilde{\partial} \eta_j)^*$ auf, die jeweils von zweien der unabhängigen Parameter abhängen. Dies erschwert die Variation. Wir bemerken aber, daß diese Terme immer klein sind gegen $d_j \eta_j^*$: d_j ist von der Größenordnung $|\mathbf{d}_j|$, die charakteristische Länge von η^* aber von der Größenordnung $\sqrt{l_j v_j / 6 |\omega|}$. Also gilt

$$|(\tilde{\partial} \eta_j)^* \cdot \mathbf{d}_j \zeta_{\omega j}| \simeq \left| \eta_j^* d_j \frac{l_j}{\sqrt{l_j v_j / 6 |\omega|}} \right| \ll |\eta_j^* d_j|. \quad (91)$$

Daher darf man im Variationsfunktional die Terme $\zeta_{\omega j} \mathbf{d}_j \cdot (\tilde{\partial} \eta_j)^*$ gegen $\eta_j^* d_j$ vernachlässigen, da es dort nur auf Kombinationen der Form

$$(\eta_j^* d_j + \zeta_{\omega j} \mathbf{d}_j \cdot (\tilde{\partial} \eta_j)^*) \quad (92)$$

ankommt. Dann wird die Variation sehr einfach und ergibt bei $s = -a_1, a_2$ die Randbedingung

$$\mathbf{n} \cdot \tilde{\partial} \Delta_\omega(s) = 0 \quad (93)$$

und bei $x=0$ die Grenzbedingungen

$$N_1 v_1 d_1 (\Delta_{\omega 2} - \Delta_{\omega 1}) = C_1 \mathbf{n}_1 \cdot \left(\frac{2\pi}{3} \mathbf{n}_1 - \mathbf{r}_1 \right) + C_2 \mathbf{n}_2 \cdot \left(\frac{2\pi}{3} \mathbf{n}_2 + \mathbf{r}_2 \right), \quad (94)$$

$$N_2 v_2 d_2 (\Delta_{\omega 1} - \Delta_{\omega 2}) = C_2 \mathbf{n}_2 \cdot \left(\frac{2\pi}{3} \mathbf{n}_2 - \mathbf{r}_2 \right) + C_1 \mathbf{n}_1 \cdot \left(\frac{2\pi}{3} \mathbf{n}_1 + \mathbf{r}_1 \right) \quad (95)$$

$$\text{mit} \quad C_1 = N_1 v_1 l_1 \mathbf{n}_1 \cdot \tilde{\partial} \Delta_{\omega 1}, \quad C_2 = N_2 v_2 l_2 \mathbf{n}_2 \cdot \tilde{\partial} \Delta_{\omega 2}. \quad (96)$$

Die Randbedingung (93) war natürlich nach den Überlegungen in Abschnitt 4 zu erwarten.

Bildet man die Summe der Gln. (94) und (95), so folgt mit $N_1 v_1 d_1 = N_2 v_2 d_2$ und $\mathbf{n}_1 \cdot \tilde{\partial} = d/dx$, $\mathbf{n}_2 \cdot \tilde{\partial} = -d/dx$

$$N_1 v_1 l_1 \frac{d}{dx} \Delta_{\omega 1} = N_2 v_2 l_2 \frac{d}{dx} \Delta_{\omega 2}, \quad (97)$$

bildet man die Differenz dieser Gleichungen, so ergibt sich

$$\Delta_{\omega 1} - \Delta_{\omega 2} = \frac{1}{N_1 v_1 d_1} (C_1 \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - C_2 \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2), \quad (98) \quad \Delta_{\omega 1} - \Delta_{\omega 2} = \frac{l_1}{d_1} \frac{d}{dx} \Delta_{\omega 1} (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2), \quad (99)$$

die zweite Gleichung unter Beachtung von Gl. (97).

Die Beziehungen (97) und (99) sind schon im wesentlichen die gesuchten Grenzbedingungen. Es ist aber zweckmäßig, die entsprechenden Gleichungen für den Integralkern K_ω anzuschreiben. Dazu führen wir wie in Abschnitt 4 die Green-Funktion $K'_\omega(x, x_0)$ der Differentialgleichung (89) ein. Sie ist definiert durch die Gleichungen

$$\left(2|\omega| - \frac{v(x) l(x)}{3} \tilde{\partial} \right) K_\omega(x, x_0) = 2\pi N(x) \delta(x - x_0), \quad (100)$$

$$\frac{d}{dx} K'_\omega(x, x_0) = 0, \quad (x = -a_1, a_2), \quad (101)$$

$$v_1 l_1 \frac{d}{dx} K'_\omega(-0, x_0) = v_2 l_2 \frac{d}{dx} K'_\omega(+0, x_0), \quad (102)$$

$$\frac{K'_\omega(-0, x_0)}{N_1} - \frac{K'_\omega(+0, x_0)}{N_2} = \frac{1}{N_1 d_1} l_1 \frac{d}{dx} K'_\omega(-0, x_0) (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2). \quad (103)$$

Diese Funktion $K'_\omega(x, x_0)$ gestattet die Berechnung des langsam veränderlichen Anteils der in Gl. (25) erklärten Größe $\Delta_\omega(x)$ gemäß

$$\Delta_\omega(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{N(x)} \int dx_0 K'_\omega(x, x_0) \Delta(x_0), \quad (104)$$

und sie kann im Sinne der Überlegungen in Abschnitt 4 mit $K_\omega(x, x_0)$ identifiziert werden. Wir merken noch an, daß $K'_\omega(x, x_0)$, der Integralkern der Diffusionsnäherung, auch die beiden Relationen (15) und (16) erfüllt. Dies ist eine einfache Folge der Gln. (101), (102) und (103).

Die Randbedingungen (101) und die Grenzbedingung (102) wurden bereits von DE GENNES angegeben. Wir haben sie hier noch einmal abgeleitet unter Berücksichtigung der mikroskopischen Reflexionseigenschaften der Oberflächen und der Grenzfläche. Es ist bemerkenswert, daß Gl. (102) unabhängig von der Stärke und von der Art der Elektronenreflexion an der Grenzfläche gültig bleibt. Im Gegensatz hierzu hängt die Grenzbedingung (103) von der Stärke der Elektronenreflexion ab. Aus

dieser Gleichung erhalten wir im Grenzfall verschwindender Reflexion ($\mathbf{r}_j = 0$)

$$\frac{K'_\omega(-0, x_0)}{N_1} = \frac{K'_\omega(+0, x_0)}{N_2} \quad (105)$$

eine Beziehung, die ebenfalls schon von DE GENNES angegeben wurde. Es ist aber zu beachten, daß eine Grenzfläche höchstens für $N_1 v_1 = N_2 v_2$ vollständig reflexionsfrei sein kann, vgl. die allgemeinen Relationen (13) und (14) oder auch Gl. (88). Also kann auch Gl. (105) für $N_1 v_1 \neq N_2 v_2$ nicht exakt erfüllt werden. Wir fragen daher jetzt nach Voraussetzungen über die Stärke der Reflexion an der Grenzfläche, unter denen Gl. (105) noch näherungsweise richtig bleibt.

Zur Beantwortung dieser Frage sehen wir der Einfachheit halber von einem Magnetfeld und von paramagnetischen Zusätzen ab. Man überlegt sich leicht, daß im magnetfeldfreien Fall die maximale Temperatur, bei der die Selbstkonsistenzgleichung eine Lösung zeigt (d. h. die Sprungtemperatur), erhalten wird für $\mathbf{A}(x, K_y, K_z) = 0$. Also ist in Gl. (100) $\tilde{\partial}^2 = \partial_x^2$. Es sei jetzt $x_0 > 0$. Nach Gl. (100) ist dann

$K'_\omega(x, x_0)$ für $x < 0$ gegeben durch

$$K'_\omega(x, x_0) = K'_{\omega 1}(x_0) \cosh \frac{(x + a_1)}{\xi_{\omega 1}} \left(\cosh \frac{a_1}{\xi_{\omega 1}} \right)^{-1} \quad (106)$$

mit

$$\xi_{\omega 1} = \sqrt{\frac{l_1 v_1}{6 |\omega|}}, \quad K'_{\omega 1}(x_0) \equiv K'_\omega(-0, x_0). \quad (107)$$

Damit ergibt sich aus Gl. (103)

$$\frac{K'_{\omega 1}(x_0)}{N_1} - \frac{K'_{\omega 2}(x_0)}{N_2} = \frac{K'_{\omega 1}(x_0)}{N_1} \frac{l_1}{\xi_{\omega 1}} \frac{\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2}{d_1} \tanh \frac{a_1}{\xi_{\omega 1}}. \quad (108)$$

Wenn die Größen \mathbf{r}_j der Bedingung

$$\left| \frac{l_1}{\xi_{\omega 1}} \frac{\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2}{d_1} \tanh \frac{a_1}{\xi_{\omega 1}} \right| \ll 1 \quad (109)$$

genügen, bleibt also für $x_0 > 0$ Gl. (105) näherungsweise richtig. Ist $x_0 < 0$, so erhält man entsprechend

$$K'_\omega(x, x_0) = K'_{\omega 2}(x_0) \cosh \frac{(x - a_2)}{\xi_{\omega 2}} \left(\cosh \frac{a_2}{\xi_{\omega 2}} \right)^{-1} \quad (x > 0), \quad (110)$$

$$\xi_{\omega 2} = \sqrt{\frac{l_2 v_2}{6 |\omega|}}, \quad K'_{\omega 2}(x_0) \equiv K'_\omega(+0, x_0), \quad (111)$$

$$\frac{K'_{\omega 1}(x_0)}{N_1} - \frac{K'_{\omega 2}(x_0)}{N_2} = \frac{K'_{\omega 2}(x_0)}{N_2} \frac{l_2}{\xi_{\omega 2}} \frac{\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2}{d_2} \tanh \frac{a_2}{\xi_{\omega 2}}, \quad (112)$$

$$\left| \frac{l_2}{\xi_{\omega 2}} \frac{\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2}{d_2} \tanh \frac{a_2}{\xi_{\omega 2}} \right| \ll 1. \quad (113)$$

Damit haben wir gezeigt, daß die Grenzbedingung (105) noch in guter Näherung gültig ist, wenn die Koeffizienten \mathbf{r}_j und d_j die Bedingungen (109) und (113) erfüllen, wenn also die Durchlässigkeit der Grenzfläche hinreichend groß ist (guter elektrischer Kontakt der Leiter).

Falls die Elektronen an der Grenzfläche teils diffus, teils spiegelnd reflektiert werden [oder falls allgemeiner Gl. (84) erfüllt ist], gehen die Beziehungen (109) und (113) mit Gl. (86) über in

$$\frac{l_1}{\xi_{\omega 1}} \tanh \frac{a_1}{\xi_{\omega 1}} \ll \chi(R), \quad \frac{l_2}{\xi_{\omega 2}} \tanh \frac{a_2}{\xi_{\omega 2}} \ll \frac{N_1 v_1}{N_2 v_2} \chi(R). \quad (114)$$

Dabei ist

$$\chi(R) = \frac{3}{2} \frac{1 - R}{2R + \left(1 - \frac{N_1 v_1}{N_2 v_2}\right)(1 - R)} \quad (115)$$

mit $0 \leq R \leq 1$.

Wenn der Quotient $N_1 v_1 / N_2 v_2$ nicht erheblich kleiner als 1 ist, läßt sich Gl. (114) mathematisch immer durch geeignetes $R \ll 1$ erfüllen, da l/ξ_ω klein ist gegen 1.

Diese Ergebnisse lassen sich sofort verallgemeinern auf Leiter mit paramagnetischen Zusätzen. Dazu hat man lediglich $\xi_{\omega j}$ zu ersetzen durch eine Größe $\bar{\xi}_{\omega j}$,

die aus $\xi_{\omega j}$ hervorgeht durch die Substitution $|\omega| \rightarrow |\omega| + (n v \sigma_s)_j$. Ist ein (zur Grenzfläche paralleles) Magnetfeld vorhanden, so besteht kein Zweifel darüber, daß Gl. (105) bei gutem elektrischen Kontakt der Leiter wieder näherungsweise richtig ist. Es ist aber schwierig, die genauen Bedingungen, die die Reflexionskoeffizienten \mathbf{r}_j in diesem Fall erfüllen müssen, anzugeben.

Wir bemerken schließlich, daß sich in Leitern ohne Magnetfeld formal stets eine Grenzbedingung von der Art der Gl. (105) angeben läßt, denn nach Gl. (108) und Gl. (112) ist

$$\frac{K(-0, x_0)}{N_1} = \sigma_\omega(x_0) \frac{K(+0, x_0)}{N_2} \quad (116)$$

mit

$$\sigma_\omega(x_0) = \left[1 - \frac{l_1}{\xi_{\omega 1}} \left(\tanh \frac{a_1}{\xi_{\omega 1}} \right) \frac{\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2}{d_1} \right]^{-1} x_0 > 0, \quad (117)$$

$$\sigma_\omega(x_0) = 1 - \frac{l_2}{\xi_{\omega 2}} \left(\tanh \frac{a_2}{\xi_{\omega 2}} \right) \frac{\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{r}_2}{d_2} x_0 < 0. \quad (118)$$

Grenzbedingungen der Form (116), allerdings mit konstantem σ , wurden von SILVERT und COOPER⁹ sowie von MOORMANN¹¹ phänomenologisch einge-

¹¹ W. MOORMANN, Z. Phys. **197**, 136 [1966].

führt und diskutiert. Unsere Rechnungen zeigen, daß man zur Beschreibung von stark reflektierenden Grenzflächen aber nicht mit einem konstanten Parameter auskommt (ein von x_0 unabhängiges σ würde schon der Summenregel (16) widersprechen). Wir sehen weiter aus den Gln. (117) und (118), daß σ auch von $|\omega|$ und den Schichtdicken a_j abhängt. Es bereitet aber keine Schwierigkeiten, in dem von SILVERT und COOPER⁹ angegebenen Variationsverfahren zur Bestimmung der Übergangstemperatur mit dem von diesen Autoren angenommenen Varia-

tionsansatz für das Paarpotential $\Delta(x)$ eine Grenzbedingung der Form (116) zu berücksichtigen. Allerdings dürfte der dort gewählte Ansatz [$\Delta(x)$ näherungsweise konstant in dem einen Metall und näherungsweise Null in dem anderen Metall] zu einfach sein für einen quantitativen Vergleich der Ergebnisse mit dem Experiment.

Herrn Prof. Dr. G. LÜDERS danke ich sehr für die Anregung zu dieser Arbeit und für zahlreiche fördernde Diskussionen. Für die finanzielle Unterstützung danke ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft.

Anhang 1

Die Boltzmann-Gleichung (5) zeigt, daß in Systemen mit isotrop streuenden Störstellen die Verteilungsfunktion $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0)$ allein durch die Teilchendichte $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ bestimmt ist. Daher liegen hier wesentlich einfachere Verhältnisse vor als bei anisotrop streuenden Störstellen. Betrachtet man aber stark verunreinigte Leiter, so läßt sich auch bei anisotrop streuenden Störstellen näherungsweise wieder eine Integralgleichung für $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ von der Art der Gl. (23) angeben. Dazu schreiben wir Gl. (5) um

$$(2|\omega| + \mathbf{v} \cdot \tilde{\partial} + n v (\sigma - \sigma^{(1)})) g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0) - n v \left[\oint d\Omega' \frac{d\sigma(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}')}{d\Omega} g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}'; \mathbf{r}_0) - \sigma^{(1)} g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0) \right] = \frac{1}{(2\pi)^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (\text{A.1})$$

In Gl. (A.1) ist
$$\sigma^{(1)} = \oint d\Omega \frac{d\sigma(\vartheta)}{d\Omega} \cos \vartheta.$$

Übrigens ergibt sich damit nach Gl. (24) für die Transportweglänge

$$l_{tr}^{-1} = n(\sigma - \sigma^{(1)}).$$

Aus Gl. (A.1) folgt die zu Gl. (21) analoge Integralgleichung

$$g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0) = \int d^3\mathbf{r}' \oint d\Omega' \tilde{e}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') \left\{ (n v)_{\mathbf{r}'} \left[\oint d\Omega'' \left(\frac{d\sigma(\mathbf{v}' \cdot \mathbf{v}'')}{d\Omega} \right)_{\mathbf{r}'} g_\omega(\mathbf{r}', \mathbf{v}''; \mathbf{r}_0) - \sigma^{(1)} g_\omega(\mathbf{r}', \mathbf{v}'; \mathbf{r}_0) \right] + \frac{1}{(2\pi)^2 v(\mathbf{r}')} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0) \right\}, \quad (\text{A.2})$$

in der man die Green-Funktion $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ aus $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ durch die Substitution $l \rightarrow l_{tr}$ erhält. In einem stark verunreinigten Leiter (n groß) wird $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0)$ nahezu isotrop, näherungsweise kann man daher schreiben (vgl. II)

$$g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}_0) = \frac{1}{4\pi} g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) + \hat{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{g}_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0). \quad (\text{A.3})$$

Gehen wir mit diesem Ansatz ein in die rechte Seite von Gl. (A.2), so hebt sich der Stromanteil \mathbf{g}_ω heraus, integrieren wir diese Gleichung dann über $\hat{\mathbf{v}}$, so ergibt sich eine Gleichung für die Teilchendichte $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$, die die gleiche Form hat wie Gl. (21), es ist nur überall l durch l_{tr} ersetzt. Selbstverständlich wird der Ansatz (A.3) i. a. falsch in der Nähe von Unstetigkeitsflächen¹³, daher kann auf diese Weise $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ nur im Innern der Leiter in guter Näherung ausgerechnet werden, aber auch nur daran sind wir interessiert. In einer Randschicht von der Größenordnung der freien Weglänge wird $g_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ durch die extra-

¹³ Es gibt Ausnahmen. Gl. (A.3) bleibt im schmutzigen Grenzfall richtig bis heran an eine Leiteroberfläche, wenn die Elektroden dort spiegelnd reflektiert werden, vgl. II.

polierte Lösung dieser Integralgleichung ersetzt. Wir hoffen, auf diese Weise den wesentlichen Einfluß einer Anisotropie in der Störstellenstreuung zu erfassen. Mit gewissen Vorbehalten bleiben also alle Endresultate allgemein richtig, wenn man l ersetzt durch l_{tr} .

Anhang 2

In diesem Anhang wird gezeigt, daß der Integraloperator $P_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, Gl. (31), hermitesch

$$P_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = P_\omega^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{A.4})$$

und positiv

$$(\Phi | P_\omega | \Phi) = \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \Phi^*(\mathbf{r}) P_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}') > 0 \quad (\text{A.5})$$

ist. In Gl. (A.5) wird mit einer beliebigen, nicht identisch verschwindenden Funktion Φ über den Leiter integriert.

Zum Beweis von Gl. (A.4) gehen wir aus von der Funktion

$$f_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') = N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'). \quad (\text{A.6})$$

f_ω ist Lösung der Gleichung

$$(\zeta_\omega^{-1}(\mathbf{r}) + \mathbf{v} \cdot \tilde{\partial}) f_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}, \mathbf{v}') = N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\delta}(\mathbf{v}, \mathbf{v}'), \quad (\text{A.7})$$

erfüllt die Oberflächenbedingung (6) und modifizierte Grenzbedingungen, die sich sofort aus den Gln. (10), (11) und der Definition (A.6) ergeben. Als Folge von Gl. (A.7) und den Eigenschaften (6), (13) und (14) gehorcht $f_\omega(\mathbf{r}', \mathbf{v}'; \mathbf{r}'', \mathbf{v}'')$ der Symmetrierelation

$$f_\omega(\mathbf{r}', -\mathbf{v}'; \mathbf{r}'', -\mathbf{v}'') = f_\omega^*(\mathbf{r}'', \mathbf{v}''; \mathbf{r}', \mathbf{v}'). \quad (\text{A.8})$$

Zum Beweis dieser Beziehung [aus der dann Gl. (A.4) sofort folgt] multipliziert man Gl. (A.7) mit $e_\omega^*(\mathbf{r}, -\mathbf{v}; \mathbf{r}'', -\mathbf{v}'')$ und integriert über alle $\mathbf{r}, \hat{\mathbf{v}}$. Dann stellt man die zu Gl. (A.7) analoge Gleichung für $f_\omega^*(\mathbf{r}, -\mathbf{v}; \mathbf{r}'', -\mathbf{v}'')$ auf, multipliziert sie mit $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ und integriert ebenfalls über alle $\mathbf{r}, \hat{\mathbf{v}}$. Die so erhaltenen Gleichungen werden voneinander subtrahiert. Durch partielle Integration unter Beachtung der Rand- und Grenzbedingungen für die Verteilungsfunktion wird man auf Gl. (A.8) und damit auf Gl. (A.4) geführt. Die zu beweisende Gl. (A.5) schreiben wir mit der Definition (31) um

$$\int d^3\mathbf{r} \frac{N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r})}{l(\mathbf{r})} |\Phi(\mathbf{r})|^2 > \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \Phi^*(\mathbf{r}) H_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}'). \quad (\text{A.9})$$

In Gl. (A.9) ist

$$H_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r})}{l(\mathbf{r}) l(\mathbf{r}')} e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (\text{A.10})$$

Wir bemerken zunächst, daß sich die Green-Funktion $e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ als Lösung der Bewegungsgleichung (17) von der Green-Funktion $e_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ des magnetfeldfreien Falls (genauer $\mathbf{A}=0$) nur durch Phasenfaktoren vom Betrag 1 unterscheidet. Da überdies $e_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')$ nicht-negativ ist, gilt

$$|e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}')| \leq e_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'), \quad (\text{A.11})$$

also auch

$$|e_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')| \leq e_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}').$$

Wir beweisen jetzt, daß sogar der Betrag der rechten Seite von Gl. (A.9) kleiner ist als die linke Seite. Dazu betrachten wir die Funktion

$$f_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}') = N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) e_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'). \quad (\text{A.12})$$

Sie erfüllt die Bewegungsgleichung (17) mit ∂ an Stelle von $\tilde{\partial}$. Diese Gleichung wird über $\mathbf{r}, \hat{\mathbf{v}}$ integriert. Durch partielle Integration läßt sich der Term $\hat{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\partial} f_\omega^{(0)}$ umformen in Oberflächen- und Grenzflächenintegrale.

Die Summe dieser Integrale verschwindet als Folge der Rand- und Grenzbedingungen von $f_{\omega}^{(0)}$, also ergibt sich

$$\int d^3\mathbf{r} \zeta_{\omega}^{-1}(\mathbf{r}) N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) e_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}'). \quad (\text{A.13})$$

Mit $\zeta_{\omega}^{-1} > l^{-1}$ erhält man aus Gl. (A.13) die Ungleichung

$$\frac{N(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}')}{l(\mathbf{r}')} > \int d^3\mathbf{r} \frac{N(\mathbf{r}) v(\mathbf{r})}{l(\mathbf{r}') l(\mathbf{r})} e_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \int d^3\mathbf{r} H_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (\text{A.14})$$

Schließlich folgt mit $H_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = H_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' (|\Phi(\mathbf{r})| - |\Phi(\mathbf{r}')|) H_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (|\Phi(\mathbf{r})| - |\Phi(\mathbf{r}')|) \\ \leq \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' |\Phi(\mathbf{r}')|^2 H_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' |\Phi(\mathbf{r})| H_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\Phi(\mathbf{r}')|. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Jetzt kann mit den Gln. (A.10), (A.14) und (A.15) eine obere Schranke für den Betrag der rechten Seite von Gl. (A.9) angegeben werden:

$$|\int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \Phi^*(\mathbf{r}) H_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}')| \leq \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' |\Phi(\mathbf{r}')|^2 H_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') < \int d^3\mathbf{r}' \frac{N(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}')}{l(\mathbf{r}')} |\Phi(\mathbf{r}')|^2. \quad (\text{A.16})$$

Aus einem Vergleich mit Gl. (A.9) folgt die Behauptung. Man sieht leicht, daß die Eigenschaft (A.4) und (A.5) auch für Leiter mit paramagnetischen Zusätzen richtig bleiben.

Zum Streumechanismus in hochdotierten Halbleitern des Systems Bi-Te-Se

W. HELDMANN

Siemens AG, Siemens-Halske-Werke München, Hofmannstr. 50

und J. KLÜGEL

Ludwig-Boltzmann-Institut, Wien 6, Kopernikusgasse 15

(Z. Naturforsch. 23 a, 670—675 [1968]; eingegangen am 1. Februar 1968)

Aus dem Verhältnis von Nernst-Koeffizient zu Hall-Beweglichkeit ist es möglich, unter gewissen Voraussetzungen eine direkte Aussage über die Art der Ladungsträgerstreuung zu erhalten. Es werden die Einflüsse von Entartung und Anisotropie diskutiert und das Ergebnis mit Messungen an Kristallen der Halbleiterlegierung $\text{Bi}_2\text{Te}_{2,7}\text{Se}_{0,3}$ verglichen.

Wie CHAMPNESS und KIPLING¹ an Wismuttellurid zeigten, kann aus dem Verhältnis von Nernst-Koeffizient zu Hall-Beweglichkeit der Streuexponent λ berechnet werden, wenn die Energieabhängigkeit der Relaxationszeit τ in der Form

$$\tau = \tau_0 \cdot E^{-\lambda}$$

angesetzt wird. Die Meßergebnisse dieser Autoren führen auf einen λ -Wert von 0,5 im Temperaturbereich um 250 °K; eine Größe, die bekanntlich der Streuung an akustischen Phononen entspricht. Speziell bei Wismuttellurid und seinen Legierungen, die auch bei stöchiometrischem Erschmelzen bereits

hohe Löcherkonzentrationen aufweisen, muß aber mit teilweiser Entartung der Ladungsträger gerechnet werden. CHAMPNESS und KIPLING legten ihren Untersuchungen die Gültigkeit klassischer Statistik zugrunde. Damit kann jedoch das Absinken des λ -Wertes auf rund 0,2 bei tiefen Temperaturen nicht eindeutig geklärt werden.

Im folgenden soll beschrieben werden, wie unter Zuhilfenahme graphischer Methoden auch für den Fall beliebiger Entartung der Streukoeffizient λ aus Meßwerten des Nernst-Koeffizienten, der Hall-Konstanten, der elektrischen Leitfähigkeit und der absoluten Thermokraft gewonnen werden kann. Die folgenden Betrachtungen gelten unter einschränkenden Bedingungen, nämlich:

¹ C. H. CHAMPNESS u. A. L. KIPLING, J. Phys. Chem. Solids 27, 1409 [1966].