

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].



1. Parabolische Bandform des Leitungsbandes,
2. Einbandleitung,
3. Kleine Magnetfelder.

Bekanntlich gelten für die Transportkoeffizienten: elektrische Leitfähigkeit σ , Hall-Konstante R und Nernst-Konstante Q , wobei vorerst anisotrope Materialeigenschaften nicht berücksichtigt werden sollen,

$$\sigma = \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau \rangle, \quad (1)$$

$$R = \frac{1}{en} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}, \quad (2)$$

$$Q = - \frac{\mu}{eT} \left[\frac{\langle E \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} - \frac{\langle \tau^2 \rangle \langle E \tau \rangle}{\langle \tau \rangle^3} \right] \quad (3)$$

(μ Ladungsträgerbeweglichkeit, n Ladungsträgerdichte) $\langle \tau \rangle$, $\langle \tau^2 \rangle$, $\langle E \tau \rangle$, $\langle E \tau^2 \rangle$ Mittelwerte.

Aus den Gln. (1) bis (3) ergibt sich durch Einsetzen in den Quotienten

$$K = \frac{e}{k} \frac{Q}{R \sigma} \quad (4)$$

der Ausdruck

$$K = \frac{1}{kT} \cdot \left[\frac{\langle E \tau^2 \rangle}{\langle \tau^2 \rangle} - \frac{\langle E \tau \rangle}{\langle \tau \rangle} \right] \quad (5)$$

Berechnet man die in Gl. (5) enthaltenen Mittelwerte für den Fall klassischer Statistik, so wird nach Einsetzen von $\tau = \tau_0 E^{-\lambda}$

$$K = \lambda.$$

Man erhält somit in Übereinstimmung mit CHAMPNESS eine direkte Information über die Art des Streumechanismus. Der Fall beliebiger Entartung führt zu einem Ausdruck der folgenden Form:

$$K(\lambda, \eta^*) = \frac{(\frac{5}{2}-\lambda) F_{3/2-\lambda}(\eta^*)}{(\frac{3}{2}-\lambda) F_{1/2-\lambda}(\eta^*)} - \frac{(\frac{5}{2}-2\lambda) F_{3/2-2\lambda}(\eta^*)}{(\frac{3}{2}-2\lambda) F_{1/2-2\lambda}(\eta^*)} \quad (6)$$

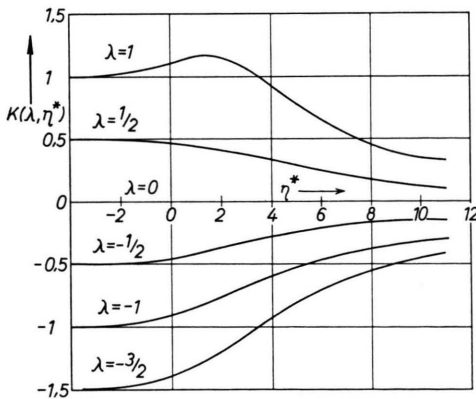


Abb. 1. $K(\lambda, \eta^*)$ als Funktion der reduzierten Fermi-Energie η^* für verschiedene Werte des Streukoeffizienten λ .

(E_F Fermi-Energie, $\eta^* = E_F/kT$ reduzierte Fermi-Energie, $F_P(\eta^*)$ tabellierte Fermi-Integrale).

Abb. 1 zeigt den Verlauf von $K(\lambda, \eta^*)$ als Funktion der reduzierten Fermi-Energie für verschiedene λ -Werte als Parameter, entsprechend Gl. (6). Es zeigt sich, daß für $\eta^* \rightarrow -\infty$, also für den Fall klassischer Statistik, K wie zu erwarten gegen die Größe λ strebt. Mit steigender Entartung erreicht K für alle Parameter λ asymptotisch den Wert 0. Die Relaxationszeit wird energieunabhängig. Das heißt: bei höher dotierten und daher stärker entarteten Proben kann λ durch Bildung des Quotienten K nicht mehr direkt erhalten werden. Um den Wert des Exponenten λ für den allgemeinen Fall bestimmen zu können, wurde folgendes Verfahren angewendet:

Aus Messungen der Thermokraft Θ ist es möglich, den Wert des reduzierten Fermi-Potential η^* mit Hilfe von Gl. (7) zu ermitteln.

$$\Theta = - \frac{k}{e} \left[\frac{(\frac{5}{2}-\lambda) F_{3/2-\lambda}(\eta^*)}{(\frac{3}{2}-\lambda) F_{1/2-\lambda}(\eta^*)} - \eta^* \right]. \quad (7)$$

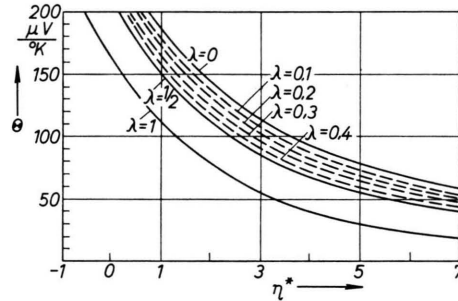


Abb. 2. Thermokraft Θ als Funktion der reduzierten Fermi-Energie η^* für verschiedene Werte des Streukoeffizienten λ .

Die graphische Darstellung von (7) wird in Abb. 2 für verschiedene Parameter λ gegeben. Der Verlauf der Thermokraft für nicht ganzzahlige Vielfache von $\lambda = 1/2$ wurde durch lineare Interpolation bestimmt. Aus dieser Abbildung kann für jeden gemessenen Wert von Θ das entsprechende reduzierte Fermi-Potential η^* abgelesen werden, nachdem eine Annahme über die Größe des Streuexponenten λ getroffen worden ist. Bei nun bekanntem η^* ist es nach Bildung des Quotienten K unter Zuhilfenahme von Abb. 1 möglich, zu kontrollieren, ob das gewählte λ dem tatsächlichen Wert entspricht. K müßte in diesem Falle auf der Kurve liegen, die den gewählten λ -Wert als Parameter besitzt. Trifft dies nicht zu, so muß der beschriebene Vorgang mit abgeändertem λ solange wiederholt werden, bis Übereinstimmung hergestellt ist.

Auf diese Art wurde der Verlauf von K als Funktion von η^* an fünf verschieden dotierten Proben der Zusammensetzung $\text{Bi}_2\text{Te}_{2,7}\text{Se}_{0,3}$ ermittelt (Abb. 3). Es zeigt sich, daß mit wachsendem η^* die Meßpunkte K qualitativ den aus Gl. (6) errechneten

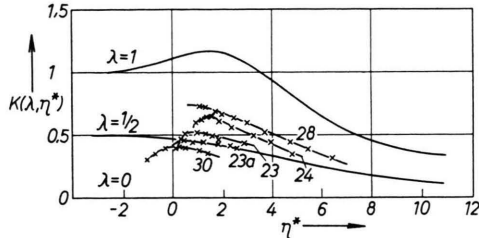


Abb. 3. $K(\lambda, \eta^*)$ als Funktion von η^* für verschiedene Proben.
 Probe Nr. 30 23 a 23 24 28
 $n =$ 1,6 4,3 5,2 14,3 $21,4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Kurven folgen und in Umgebung der theoretischen Werte für $\lambda = 1/2$ liegen. Es kann daraus auf überwiegende akustische Gitterstreuung, auch bei tiefen Temperaturen, geschlossen werden. Die mit wachsender Ladungsträgerdichte beobachtbare Verschiebung der Kurven gegen $\lambda = 1$ spricht gegen die Erwartung, daß bei stärkerer Dotierung eine Streuung an ionisierten Gitterdefekten merkbar wird. Der steile Abfall der gemessenen K -Kurven für kleine Werte η^* ist auf den beginnenden Einfluß von Eigenleitung zurückzuführen.

Die Messungen der Temperaturabhängigkeit von Q , R und σ sind in den Abb. 4, 5 und 6 zusammengestellt. Abb. 7 zeigt den Verlauf der absoluten Thermokraft. Diese Transportkoeffizienten wurden in folgender experimenteller Anordnung gemessen: Die Richtung des Temperaturgradienten bzw. des elektrischen Stromes war parallel zu den Spaltebenen, das magnetische Feld senkrecht dazu, in Richtung der trigonalen Kristallachse. Die unter-

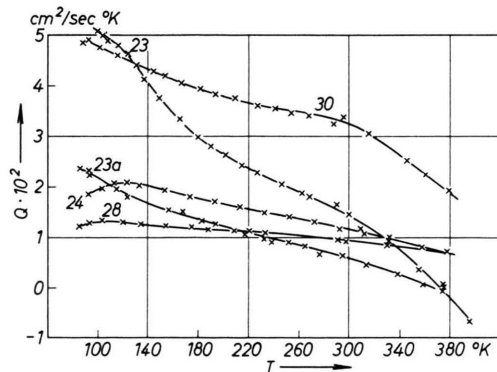


Abb. 4. Nernst-Konstante Q als Funktion der absoluten Temperatur T für verschiedene Proben (siehe Abb. 3).

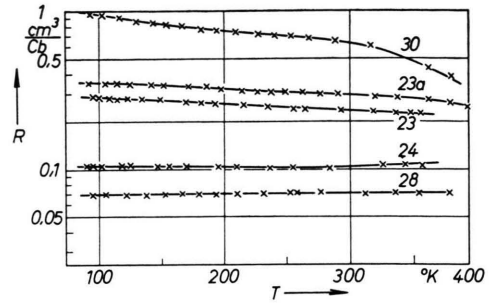


Abb. 5. Hall-Konstante R als Funktion der absoluten Temperatur T für verschiedene Proben (siehe Abb. 3).

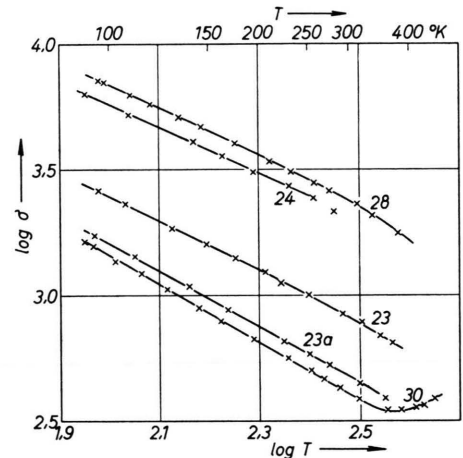


Abb. 6. Elektrische Leitfähigkeit σ als Funktion der absoluten Temperatur T für verschiedene Proben (siehe Abb. 3).

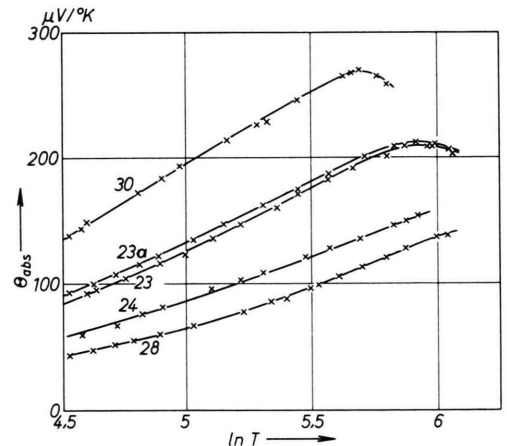


Abb. 7. Absolute Thermokraft Θ_{abs} als Funktion der absoluten Temperatur T für verschiedene Proben (siehe Abb. 3).

suchten Kristalle der Zusammensetzung $\text{Bi}_2\text{Te}_{2,7}\text{Se}_{0,3}$ wurden durch Zonenziehen erzeugt, wobei die Ausgangsmaterialien einen Reinheitsgrad von 5 N aufwiesen. Als Dotierungsmaterial diente Silberjodid zwischen 0,05 und 0,3 Gewichtsprozenten.

Berücksichtigung von anisotropem Verhalten

Hall-Effekt und elektrische Leitfähigkeit zeigen bei Wismuttellurid und natürlich auch bei den Legierungen mit Wismutselenid stark anisotropes Verhalten. Das gleiche gilt für den Nernst-Effekt. Wird für eine bestimmte Richtung des Wärme- bzw. elektrischen Stromes, sowie des magnetischen Feldes bezüglich der Orientierung des Kristalles das Verhältnis K gebildet, so müssen die entsprechenden Tensorkomponenten der Transportkoeffizienten eingesetzt werden.

Eine Theorie der galvanomagnetischen Effekte, bezogen auf ein Vieltalmodell, wurde von ABELES und MEIBOOM² und HERRING³ entwickelt. Diese Theorie wurde von DRABBLE und WOLFE⁴ auf die Kristallklasse $\bar{3}m$, welcher auch Wismuttellurid angehört, angewendet. Das Problem reduziert sich also auf die Untersuchung des anisotropen Nernst-Effektes. Es wird hierbei die Theorie von DRABBLE übernommen und durch Einführen eines zusätzlichen Temperaturgradienten auf thermomagnetische Effekte erweitert (siehe Anhang). Die nähere Untersuchung zeigt, daß bei Wahl eines orthogonalen Koordinatensystems, dessen z -Achse die Richtung der trigonalen Achse besitzt, während die xy -Ebene parallel zu der Spaltebene des Kristalles liegt, die Größe

$$K = Q_{ikl}/Q_{ikl} \sigma_{kk}$$

unabhängig von der kristallographischen Richtung der gemessenen Transportkoeffizienten Q_{ikl} , Q_{ikl} und σ_{kk} ist und nur eine Funktion von λ und η^* darstellt, welche die Form von Gl. (6) besitzt.

Aus der Rechnung im Anhang ergibt sich, daß bei festgehaltener Stromrichtung $\mathbf{J} = (i_1, 0, 0)$ bzw. $T = (\partial T/\partial x_1, 0, 0)$ die meßbaren Tensorkomponenten von Hall-Konstante Q_{ikl} und Nernst-Konstante Q_{ikl} der Bedingung

$$Q_{312}/Q_{123} = Q_{312}/Q_{123} \quad (8)$$

genügen. Die Stromrichtungen $(0, i_2, 0)$ sowie $(0, 0, i_3)$ führen zu ähnlichen Zusammenhängen, nämlich:

$$Q_{231}/Q_{132} = Q_{231}/Q_{132}, \quad (9)$$

$$Q_{321}/Q_{123} = Q_{321}/Q_{123}. \quad (10)$$

(8), (9) und (10) gelten auch für den Fall nicht-parabolischer Bänder. Die experimentelle Prüfung

dieser Bedingungen ermöglicht daher eine Kontrolle, wie weit die zur Vereinfachung der Rechnung eingangs gemachten Annahmen, vor allem die Annahme einer isotropen Relaxationszeit der Form $\tau = \tau_0 E^{-\lambda}$, zulässig sind.

Die zur Verfügung stehenden Kristalle erlaubten nur die Überprüfung der ersten Bedingung mit der Stromrichtung $(i_1, 0, 0)$. Abb. 8 zeigt den Verlauf der Hall- und Nernst-Konstanten von Probe 23.

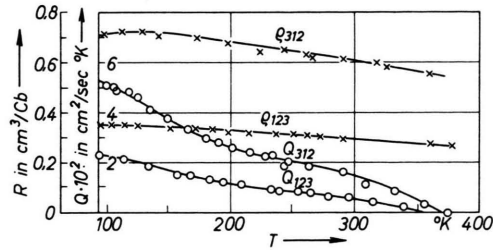


Abb. 8. Hall-Konstante R und Nernst-Konstante Q von Probe 23 als Funktion der absoluten Temperatur T .

Die gebildeten Quotienten ergeben den in Abb. 9 dargestellten Verlauf. Es sind die Verhältnisse Q_{312}/Q_{123} und Q_{312}/Q_{123} innerhalb eines weiten Temperaturbereiches ungefähr gleich groß. Ähnliche Messungen von WILLIAMS⁵ zeigen, daß für p-leitendes Wismuttellurid

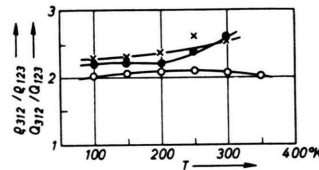


Abb. 9. $\circ-\circ$ Q_{312}/Q_{123} (Probe 23), $\bullet-\bullet$ Q_{312}/Q_{123} (Probe 23), $\times-\times$ Q_{312}/Q_{123} nach DRABBLE für Bi_2Te_3 .

$Q_{312}/Q_{123} = 2,3 \pm 0,1$ und $Q_{312}/Q_{123} = 2,3 \pm 0,2$, in befriedigender Übereinstimmung mit den eigenen Messungen. Es kann daraus ersehen werden, daß die Wahl des einfachen Zusammenhanges zwischen Relaxationszeit und Ladungsträgerenergie bei den untersuchten Proben zu einer befriedigenden Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment führt.

Anhang

Die Annahme, daß zur Lösung der Boltzmann-Gleichung bei Vorhandensein eines Magnetfeldes die

² B. ABELES u. S. MEIBOOM, Phys. Rev. **95**, 31 [1954].

³ C. HERRING, Bell. Syst. Tech. J. **34**, 237 [1955].

⁴ J. R. DRABBLE u. R. WOLFE, Proc. Phys. Soc. London **69 B**, 1101 [1956].

⁵ W. WILLIAMS, Proc. Phys. Soc. London **73**, 739 [1959].

Relaxationszeitnäherung angewendet werden kann, ergibt für kleine Feldstärken eine Reihendarstellung der gestörten Verteilungsfunktion^{6, 7}.

$$f = [1 + \tau \mathbf{\Omega} + \dots] \tau \mathfrak{V} \frac{\partial f_0}{\partial E}, \quad (\text{A } 1)$$

f gestörte Verteilungsfunktion, f_0 Fermi-Verteilungsfunktion, $\mathbf{\Omega}$ Vektoroperator $\mathbf{\Omega} = (e/\hbar) \mathfrak{V} \times \mathfrak{V} \nabla_k$,

$$\mathfrak{V} = e \mathfrak{E} - \nabla_r E_F + (E - E_F) T \nabla_r (1/T)$$

bei vorhandenem Temperaturgradienten und elektrischem Feld \mathfrak{E} .

Der allgemeine Ausdruck für die elektrische Stromdichte im Leiter lautet:

$$\mathbf{i} = -e \int n(\mathbf{f}) \mathfrak{V}_k \cdot \mathbf{f} d^3\mathbf{f}, \quad (\text{A } 2)$$

$n(\mathbf{f}) = 1/4 \pi^3$ Zustandsdichte im k -Raum,

$$\mathfrak{V}_k = (1/\hbar) \nabla_k E.$$

Legt man für die weitere Rechnung das von DRABBLE, GROVE und WOLFFE⁴ für Bi_2Te_3 ent-

wickelte Vielteilmodell zugrunde, so ergibt sich der Beitrag eines Tales p zum Gesamtstrom nach Einsetzen von f in die Beziehung für die Stromdichte i . Durch Vergleich mit der Taylor-Entwicklung nach Potenzen des magnetischen Feldes erhält man die Taylor-Koeffizienten σ_{ij} , σ_{ijk} , α_{ij} , α_{ijk}

$$i_i^{(p)} = \sigma_{ik}^{(p)} E_k + \sigma_{ikl}^{(p)} E_k H_l + \alpha_{ik}^{(p)} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{T} \right) + \alpha_{ikl}^{(p)} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{T} \right) H_l + \dots, \quad (\text{A } 3)$$

$$\sigma_{ik}^{(p)} = -\frac{e^2}{4 \pi^3 \hbar^2} \int \tau \cdot \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_k} d^3\mathbf{f}, \quad (\text{A } 4a)$$

$$\sigma_{ikl}^{(p)} = \frac{e^3}{4 \pi^3 \hbar^4} \int \tau \cdot \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_r} \cdot \frac{\partial}{\partial k_s} \left(\tau \frac{\partial E}{\partial k_k} \right) \varepsilon_{lrs} d^3\mathbf{f}. \quad (\text{A } 4b)$$

(A 4a) und (A 4b) sind Zusammenhänge, die ABELS und MEIBOOM² bereits angegeben haben. Weiters erhält man für

$$\alpha_{ik}^{(p)} = -\frac{e}{4 \pi^3 \hbar^2} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[T^3 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{E_F}{T} \right) + T E \right] \frac{\partial E}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_k} d^3\mathbf{f}, \quad (\text{A } 4c)$$

$$\alpha_{ikl}^{(p)} = \frac{e^2}{4 \pi^3 \hbar^4} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_r} \left(T^3 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{E_F}{T} \right) + T E \right) \frac{\partial}{\partial k_s} \left(\tau \frac{\partial E}{\partial k_k} \right) \varepsilon_{lrs} d^3\mathbf{f}. \quad (\text{A } 4d)$$

Mit der Annahme einer Relaxationszeit der Form $\tau = \tau_0 E^{-\lambda}$ findet sich ein einfacher Zusammenhang zwischen α_{ik} und σ_{ik} bzw. α_{ikl} und σ_{ikl} :

$$\alpha_{ik}^{(p)} = \frac{T^3}{e} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{E_F}{T} \right) \sigma_{ik}^{(p)} + \frac{T}{e} \sigma_{ik}^{(p)} (\lambda - 1), \quad (\text{A } 5a)$$

$$\alpha_{ikl}^{(p)} = \frac{T^3}{e} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{E_F}{T} \right) \sigma_{ikl}^{(p)} + \frac{T}{e} \sigma_{ikl}^{(p)} (\lambda - \frac{1}{2}) \quad (\text{A } 5b)$$

mit

$$\sigma_{ik}^{(p)} (\lambda - 1) = -\frac{e^2 \tau_0}{4 \pi^3 \hbar^2} \int E^{-(\lambda-1)} \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_k} d^3\mathbf{f},$$

$$\sigma_{ikl}^{(p)} (\lambda - \frac{1}{2}) = \frac{e^3 \tau_0^2}{4 \pi^3 \hbar^4} \int E^{-2(\lambda-\frac{1}{2})} \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_r} \cdot \frac{\partial}{\partial k_s} \left(\frac{\partial E}{\partial k_k} \right) \varepsilon_{lrs} d^3\mathbf{f}.$$

Die Komponenten der resultierenden Tensoren σ_{ik} , σ_{ikl} , α_{ik} , α_{ikl} erhält man durch Transformation des Anteiles jeden Tales auf ein gemeinsames Koordinatensystem und Summation über alle Täler. Aus den Beziehungen (A 5a), (A 5b) erkennt man, daß sich die Größen σ und α bezüglich der Transformation nur um Konstante unterscheiden. Es gelten daher

die Beziehungen (A 3) auch für den Gesamtstrom:

$$i_i = \sigma_{ik} E_k + \sigma_{ikl} E_k H_l + \alpha_{ik} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{T} \right) + \alpha_{ikl} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{T} \right) H_l + \dots$$

Die Inversion dieser Reihe führt zu

$$E_i = \varrho_{ik} i_k - \varrho_{ikl} i_k H_l + \tau_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} + Q_{ikl} \frac{\partial T}{\partial x_k} H_l \dots, \quad (6)$$

wobei definitionsgemäß die Koeffizienten in ihrer Reihenfolge dem Widerstands-Hall-Koeffizienten-, Thomson-Koeffizienten- und Nernst-Koeffiziententensor entsprechen.

Bei Wahl eines orthogonalen Koordinatensystems, dessen drei-Achse parallel zur trigonalen Achse liegt, während die eins-zwei-Ebene parallel zu den Spalt-ebenen orientiert ist, ergeben sich, wenn Wärme- bzw. elektrischer Strom die Richtung der 1-Achse besitzen, zwei mögliche Meßanordnungen.

Unter Berücksichtigung von Bedingungen für die Tensorkomponenten σ_{ik} , σ_{ikl} , die sich aus der Wahl des Koordinatensystems in den einzelnen Tälern er-

⁶ H. JONES u. C. ZENER, Proc. Roy. Soc. London A 144, 101 [1934].

⁷ A. SMITH, J. JANAK u. R. ADLER, Electronic Conduction in Solids, McGraw-Hill Book Comp., New York 1967.

geben, sowie Beziehungen zwischen den Q_{ik} bzw. Q_{ikl} aus Gründen der Kristallsymmetrie erhält man mit

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} &\neq 0 && (\text{nur wenn } i=k), \\ \sigma_{ikl} &\neq 0 && (\text{nur wenn } i \neq k \neq l), \\ Q_{11} &= Q_{22}, && Q_{312} = Q_{231} \end{aligned}$$

für die *Meßanordnung I*

$$\mathbf{I} = (i_1, 0, 0), \quad \mathbf{H} = (0, 0, H_3), \quad \nabla T = (\partial T / \partial x_1, 0, 0)$$

$$\left. \begin{aligned} Q &= Q_{11} = 1/\sigma_{11}, \\ R &= -Q_{213} = Q_{123} = \sigma_{123}/\sigma_{11}^2, \\ Q &= -Q_{213} = Q_{123} = -\frac{\sigma_{123} \alpha_{11} - \alpha_{123} \sigma_{22}}{T^2 \sigma_{11}^2} \\ &= -\frac{1}{e T} \cdot \frac{\sigma_{123}}{\sigma_{11}} \left[\frac{\sigma_{11}(\lambda-1)}{\sigma_{11}} - \frac{\sigma_{123}(\lambda-\frac{1}{2})}{\sigma_{123}} \right] \end{aligned} \right\} \quad (\text{A } 7)$$

und für die *Meßanordnung II*:

$$\mathbf{I} = (i_1, 0, 0), \quad \mathbf{H} = (0, H_2, 0), \quad \nabla T = (\partial T / \partial x_1, 0, 0)$$

$$\left. \begin{aligned} Q &= Q_{11} = 1/\sigma_{11}, \\ R &= -Q_{312} = -Q_{231} = -\sigma_{312}/\sigma_{11} \sigma_{33}, \\ Q &= -Q_{312} = -Q_{231} = \frac{\sigma_{312} \alpha_{11} - \alpha_{312} \sigma_{11}}{T^2 \sigma_{11} \sigma_{33}} \\ &= -\frac{1}{e T} \cdot \frac{\sigma_{312}}{\sigma_{33}} \left[\frac{\sigma_{11}(\lambda-1)}{\sigma_{11}} - \frac{\sigma_{312}(\lambda-\frac{1}{2})}{\sigma_{312}} \right] \end{aligned} \right\} \quad (\text{A } 8)$$

Man erhält hieraus die Beziehung

$$Q_{312}/Q_{123} = Q_{312}/Q_{123}. \quad (\text{A } 9)$$

Sie ergibt sich, ohne daß über die Bandform in Nähe der Energieminima Angaben gemacht wurden. Die experimentelle Prüfung dieses Zusammenhanges gibt daher eine Möglichkeit zu untersuchen, ob die Relaxationszeit in der angenommenen Form zulässig ist. Wird für jede der Meßanordnungen die Größe K durch Einsetzen der entsprechenden Tensorkomponenten ermittelt, so sind die Ergebnisse unabhängig von der kristallographischen Richtung gleich groß

und nur eine Funktion von η^* und λ :

$$K = \frac{1}{k T} \left[\frac{\sigma_{11}(\lambda-1)}{\sigma_{11}} - \frac{\sigma_{123}(\lambda-\frac{1}{2})}{\sigma_{123}} \right]. \quad (\text{A } 10)$$

Um die Tensorkomponenten errechnen zu können, müssen Annahmen über die Bandform gemacht werden. Nach dem Modell von DRABBLE und WOLFE⁴ wird die Energie in Umgebung des Extrems des p -ten Tales wie folgt beschrieben:

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_1^{(p)} - k_{10}^{(p)})^2}{m_1} + \frac{(k_2^{(p)} - k_{20}^{(p)})^2}{m_2} + \frac{(k_3^{(p)} - k_{30}^{(p)})^2}{m_3} \right], \quad (\text{A } 11)$$

wobei das gewählte Koordinatensystem mit den Hauptachsen des betrachteten Energieellipsoides zusammenfällt. Man erhält nach Ausführung der Integration von (A 4a) und (A 4b)

$$\sigma_{ik}^{(p)} = \frac{e^2 \tau_0}{3 \pi^2} \left(\frac{2 m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (3/2 - \lambda) (k T)^{1/2 - \lambda} F_{1/2 - \lambda}(\eta^*) \frac{\delta_{ik}}{m_i} \quad (\text{A } 12a)$$

$$\sigma_{ikl}^{(p)} = \frac{e^3 \tau_0}{3 \pi^2} \left(\frac{2 m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (3/2 - 2 \lambda) (k T)^{1/2 - 2 \lambda} \cdot F_{1/2 - 2 \lambda}(\eta^*) \frac{\varepsilon_{ikl}}{m_i m_k} \quad (\text{A } 12b)$$

$$m^* = (m_1 m_2 m_3)^{1/3}.$$

Nach Einsetzen der Beziehungen (A 12a) und (A 12b) in (A 10) erhält man

$$K = \frac{(5/2 - \lambda) F_{3/2 - \lambda}(\eta^*)}{(3/2 - \lambda) F_{1/2 - \lambda}(\eta^*)} - \frac{(5/2 - 2 \lambda) F_{3/2 - 2 \lambda}(\eta^*)}{(3/2 - 2 \lambda) F_{1/2 - 2 \lambda}(\eta^*)}$$

übereinstimmend mit Formel (6).

An dieser Stelle sei Herrn Prof. Dr. K. M. KOCH sowie Herrn Prof. Dr. F. LIHL, an dessen Institut die experimentellen Untersuchungen durchgeführt wurden, für wertvolle Diskussionen herzlicher Dank ausgesprochen. Weiters danken die Autoren der Ludwig-Boltzmann-Gesellschaft, die durch ihre finanzielle Unterstützung die Durchführung dieser Arbeit möglich machte.