

Streuung von Blochelektronen am
Verzerrungsfeld einer
Schraubenversetzung in Kupfer

Diplomarbeit von
Christoph Stadler

angefertigt am Lehrstuhl Prof. Dr. H. Bross
an der Fakultät für Physik der
Ludwig-Maximilians-Universität München

München, im März 1995

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Konventionen	5
2	Bestimmung des Versetzungspotentials	6
2.1	Schraubenversetzung	6
2.2	Elastizitätstheorie	7
2.3	Darstellung des Deformationspotentials und der Übergangswahrscheinlichkeiten	9
2.4	Bestimmung des Deformationspotentials	12
3	Transporttheorie	16
3.1	Boltzmann-Gleichung	16
3.2	Diskrete Lösungsmethode für die Transportgleichung	19
4	Durchführung der Berechnungen	26
4.1	MAPW-Verfahren	26
4.2	Bestimmung des Außenraumpotentials	28
4.3	Wahl von QMAXSQ	32
4.4	Auswertung der Integrale über den Außenraum	35
4.4.1	Symmetrie von $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$	36
4.4.2	Methode der ausgezeichneten Richtungen	37
4.4.3	Auswertung der radialen Integrale	39
4.5	Behandlung der Gittersummen über das Verzerrungsfeld	41
4.5.1	Summe parallel zur Versetzungslinie	42
4.5.2	Summen senkrecht zur Versetzungslinie	43
4.6	Lösung der Transportgleichung	49
4.6.1	Schnittkurven der Fermifläche	50
4.6.2	Auswertung der symmetrischen Matrix \mathbf{V}	52
4.6.3	Nicht-divergente Komponenten des Leitfähigkeitstensors	56
4.7	Überblick über die Rechenschritte	59
5	Ergebnisse	60
5.1	Zur Behandlung der Transportgleichung	62
5.2	Vergleich mit dem Experiment	64
6	Zusammenfassung	66
A	Wahl der APW-Radien	69
B	Herleitung des Außenraumpotentials	70

C Fermischnitte	73
C.1 Lage der Schnitte in der 1. Brillouin-Zone	73
C.2 Auswahl und Berechnung der Schnitte	74
D Behandlung der Transportgleichung als lineares Gleichungssystem	76

1 Einleitung

Bei einem Metall mit idealem Kristallgitter erwartet man am Temperatur-Nullpunkt einen verschwindenden elektrischen Widerstand, da keine Phononen mehr die Periodizität des Kristallpotentials stören und somit die Bewegung der Leitungselektronen durch das Gitter dämpfen. In einem realen Kristall führen jedoch die vorhandenen Gitterbaufehler, welche die Periodizität aufheben, zu einem deutlichen, nicht-verschwindenden Restwiderstand. Neben anderen Gitterbaufehlern, wie Zwischengitteratomen oder Korngrenzen, wird dieser Restwiderstand von den Versetzungen verursacht. Letztere entstehen z.B. bei Kaltverformungen des Werkstoffs.

Um den Widerstand der Schraubenversetzungen zu berechnen, geht man von einer homogenen, isotropen Versetzungsverteilung aus. Diese Annahme erlaubt es, die Berechnung auf eine einzelne einzuschränken, wenn man von Wechselwirkungen zwischen den Versetzungen absieht.

Im Rahmen der Elastizitätstheorie bewirkt eine Versetzung ein Verzerrungsfeld, welches sich in einer statischen Verschiebung der Atomrümpfe gegenüber ihren Ruhelagen im idealen, versetzungsfreien Gitter ausdrückt.

Die beiden Versetzungstypen – Schraubenversetzung und Stufenversetzung – unterscheiden sich darin, daß das Verzerrungsfeld der Schraubenversetzung keine Dilatation des Kristallgitters bewirkt, die Verzerrung also volumenerhaltend ist, während bei der Stufenversetzung die Dilatation der dominierende Effekt ist [16].

Zur Bestimmung des Widerstands einer Versetzung ordnet man ihr ein Deformationspotential zu, an dem die Elektronen gestreut werden. Diese Streuung bewirkt Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Ein-Elektronen-Zuständen, aus denen sich mit Hilfe der Transporttheorie der Leitfähigkeitstensor berechnen läßt.

Seeger und *Bross* [26] konnten so in der Näherung freier Elektronen den Widerstand einer Stufenversetzung berechnen. Da ihr Deformationspotential aber allein von der Dilatation abhängig war, konnte damit einer (dilatationslosen) Schraubenversetzung kein Deformationspotential und somit auch kein Widerstand zugeschrieben werden. Andere Versuche, den Widerstand einer Versetzung zu bestimmen, gingen zumeist von modellmäßigen Deformationspotentialen aus. Eine Übersicht solcher Arbeiten findet man z.B. bei *Donghol-Diallo*, *Mrosan* und *Ziesche* [12].

Die Diplomarbeiten von *Häberlen* [16] (Stufenversetzungen) und *Schindler* [25] (Schraubenversetzungen), wie auch diese Arbeit, beschreiten einen aufwendigeren Weg, denn es

wird die Streuung ungestörter Blochelektronen an einem Deformationspotential betrachtet, welches aus den selbstkonsistenten, effektiven Ein-Teilchen-Potentialen unterschiedlich verzerrter Kristalle bestimmt wurde.

Während *Häberlen* [16] den Widerstand einer Stufenversetzung aus den effektiven Ein-Teilchen-Potentialen verschieden dilatierter Kristalle berechnete und so zu einem skalaren Deformationspotential kam, zerlegte *Schindler* [25] das Verzerrungsfeld der Schraubenversetzung in volumenerhaltende Verzerrungen und gelangte zu einem tensoriellen Deformationspotential, mit dem aber die antisymmetrischen Komponenten des Verzerrungstensors noch nicht erfaßt werden konnten.

Mit dem von *Bross* und *Häberlen* [10] eingeführten „modifizierten Deformationspotential“, welches in dieser Arbeit verwendet wird, ist es möglich, auch die antisymmetrischen Verzerrungsanteile zu berücksichtigen.

Wie bei *Häberlen* und *Schindler* wird auch in dieser Arbeit die Verzerrung innerhalb einer Elementarzelle jeweils als konstant angesehen, wodurch man die Matrixelemente des Deformationspotentials als Summe über verschieden homogen verzerrte Elementarzellen erhält.

Somit kann durch die Untersuchung der *Streuung von Blochelektronen am Verzerrungsfeld einer Schraubenversetzung in Kupfer* ein Wert für den spezifischen elektrischen Widerstand von Schraubenversetzungen bei $T = 0$ K gewonnen werden.

Experimentell sind solche Werte nur schwer zugänglich, da zum einen aus dem Restwiderstand durch sorgfältige Analyse der Widerstandsänderung bei Kaltverformung, bzw. bei der Erholung nach Kaltverformung, der Widerstandsanteil der Versetzungen herauspräpariert werden muß, und zum anderen Schrauben- und Stufenversetzungen i.a. gemeinsam auftreten.

1.1 Konventionen

Wie schon im Vorwort erwähnt, wird allen Berechnungen die Temperatur 0 K zugrundegelegt. Alle internen Berechnungen finden in atomaren Einheiten (*a.u.*) statt, die Endergebnisse werden jedoch in SI-Einheiten angegeben. Die atomaren Einheiten sind durch

$$\hbar := 1, \quad e^2 := 2, \quad m_e := \frac{1}{2}$$

definiert; daraus ergeben sich als Längen- und Energieeinheiten :

$$\begin{aligned} \text{Längeneinheit} &= 1 \text{ Bohr} = a_0 := \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529171 \text{ \AA} \\ \text{Energieeinheit} &= 1 \text{ Ryd} = \mathcal{E}_0 := \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2} = 13.6058 \text{ eV} \end{aligned}$$

Die Typisierung der Variablen geschieht durch folgende Schreibweisen :

allg. dreidimensionale Vektoren	\vec{r}, \vec{k}
Gittervektoren	\vec{R}, \vec{K}
Beträge von Vektoren	$r := \vec{r} $
Einheitsvektoren	\vec{n}^o
Tensoren 2. Stufe	$\underline{\sigma}, \underline{\rho}$
allg. Matrizen	\mathbf{A}, α

Für die Gitterkonstante a von Kupfer stehen zwei Werte zur Diskussion :

- $a = 6.83121719 \text{ a.u.} = 3.61488 \text{ \AA}$
- $a = 6.67720972 \text{ a.u.} = 3.53339 \text{ \AA}$

Der erste Wert ist der experimentell gefundene, der zweite ist die Gleichgewichts-Gitterkonstante, bei der die nach dem MAPW-Verfahren (siehe Abschnitt 4.1) berechnete Gesamtenergie des Kristalls ihr Minimum annimmt.

In dieser Arbeit wurde mit der Gleichgewichts-Gitterkonstante $a = 6.67720972 \text{ a.u.}$ gerechnet. Für die Endergebnisse (siehe Abschnitt 5) dürfte diese Abweichung von der Realität ohne großen Einfluß sein.

2 Bestimmung des Versetzungspotentials

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie man aus der Elastizitätstheorie eine Methode ableitet, das inhomogene, nichtperiodische Störpotential der Schraubenversetzung aus homogenen, periodischen Potentialen zusammensetzen, und wie man daraus die Übergangswahrscheinlichkeiten für die Streuung an der Schraubenversetzung bestimmt.

2.1 Schraubenversetzung

In einem realen Kristall existieren immer auch Gitterbaufehler. Diese gliedern sich in punktförmige Fehler, wie Fremdatome, Fehlstellen und Zwischengitteratome, lineare Fehler, wie Schrauben- und Stufenversetzungen und zweidimensionale Fehler, wie Stapelfehler und Korngrenzen.

In dieser Arbeit wird ausschließlich auf gerade, nichtaufgespaltene Schraubenversetzungen eingegangen. Entsprechende Untersuchungen für Stufenversetzungen (in Aluminium) findet man in der Diplomarbeit von *O. Häberlen* [16].

Eine Schraubenversetzung kann man in Gedanken dadurch erzeugen, daß man in einen Kristall mit einem Messer bis zur Mitte hineinscheidet und die getrennten Netzebenen an der Schnittkante um einen Atomabstand gegeneinander verschiebt. Aus einer planaren Netzebene wird dabei die Oberfläche einer Spirale – daher der Name „Schraubenversetzung“ [19]. Das Ende des Einschnitts bezeichnet man als Versetzungslinie.

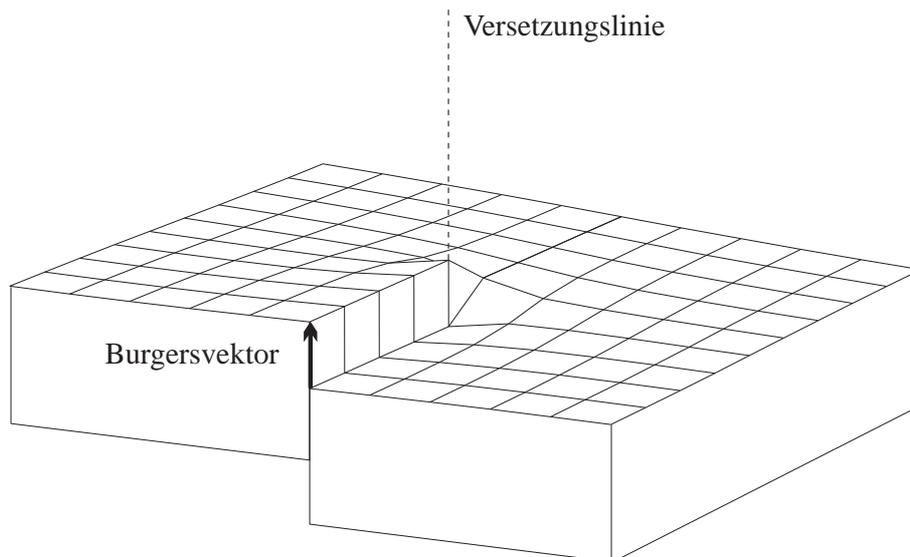


Abbildung 2.1: Skizze einer Schraubenversetzung

Eine Versetzung wird durch ihren Burgersvektor charakterisiert. Dieser liegt bei einer Schraubenversetzung parallel zur Versetzungslinie und hat gerade die Länge der Verschiebung der Netzebenen gegeneinander.

Da der Burgersvektor stets möglichst kurz ist, aber doch einen ganzen Ebenenabstand betragen muß [21], hat er in einem kubisch-flächenzentrierten Kristall typischerweise den Wert $\frac{1}{2}[110]$.

Schraubenversetzungen verändern nicht nur die elektrische Leitfähigkeit, sondern haben vor allem auch großen Einfluß auf die mechanischen Eigenschaften des Werkstoffs. Ihre Anzahl gibt man in der Werkstoffkunde als Versetzungslänge pro Volumen an, also in $\frac{\text{mm}}{\text{cm}^3}$. Ein geeignetes Maß für ihre Häufigkeit ist auch die Zahl der Versetzungen, die pro Flächenelement aus der Oberfläche des Kristalls heraustreten.

Diese Versetzungsdichten liegen bei realen Kupferproben zwischen $10^7/\text{cm}^2$ und $10^{14}/\text{cm}^2$ [3, 24]. Im selben Bereich liegen auch die in dieser Arbeit benutzten Versetzungsdichten.

2.2 Elastizitätstheorie

Wie schon im Vorwort erwähnt, wird der Einfluß der Schraubenversetzung auf die Elektronen über die Verschiebung \vec{s} berechnet, die ein jedes Atom gegenüber dem versetzungsfreien Gitter erfährt. Soweit die Verschiebungen klein sind, läßt sich die lineare Elastizitätstheorie anwenden. Hier ist die entscheidende Größe der Deformationstensor

$$\underline{\mathbf{d}} = (d_{ij}) := \frac{\partial s_i}{\partial r_j}, \quad (2.1)$$

wobei \vec{s} die Verschiebung ist, die der Ortsvektor \vec{r} erfährt. Dieser Deformationstensor wird im allgemeinen ortsabhängig sein.

Es ist üblich, den Deformationstensor in einen symmetrischen Anteil $\underline{\epsilon}$ und einen antisymmetrischen Anteil $\underline{\varphi}$ aufzuspalten :

$$\begin{aligned} \text{Verzerrungstensor } \underline{\epsilon} \quad \epsilon_{ij} &:= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s_i}{\partial r_j} + \frac{\partial s_j}{\partial r_i} \right) \\ \text{Verdrehungstensor } \underline{\varphi} \quad \varphi_{ij} &:= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s_i}{\partial r_j} - \frac{\partial s_j}{\partial r_i} \right) \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\text{mit } \underline{\mathbf{d}} = \underline{\epsilon} + \underline{\varphi}, \quad \text{und } \varphi_{ii} = 0$$

Sei \vec{r} ein Punkt in der Nähe von \vec{R} , so daß $\Delta\vec{r} := \vec{r} - \vec{R}$ als klein angesehen werden darf, dann gilt im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie

$$\begin{aligned}\vec{r}' &:= \vec{r} + \vec{s}(\vec{r}) = \vec{r} + \vec{s}(\vec{R}) + \underline{\mathbf{d}} \cdot \Delta\vec{r} \\ \Rightarrow \Delta\vec{r}' &:= \vec{r}' - \vec{R}' = \Delta\vec{r} + \underline{\mathbf{d}} \cdot \Delta\vec{r} = (\underline{\mathbf{1}} + \underline{\mathbf{d}}) \cdot \Delta\vec{r}.\end{aligned}\quad (2.3)$$

Falls diese Deformation volumenerhaltend ist, muß demnach

$$\det(\underline{\mathbf{1}} + \underline{\mathbf{d}}) \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.4)$$

gelten, was sich bei Vernachlässigung von Termen ab der Ordnung $O(d_{ij}^2)$ auch als

$$\text{Spur}(\underline{\mathbf{d}}) \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.5)$$

ausdrücken läßt.

Wählt man ein zylindrisches Koordinatensystem (ρ, \hat{z}, φ) so, daß die Versetzungslinie auf der Zylinderachse liegt, bewirkt eine Schraubenversetzung mit dem Burgersvektor $\vec{b} := b \cdot \vec{e}_{\hat{z}}$ nach *Sommerfeld* [27] folgendes Verschiebungsfeld :

$$s_{\rho} = s_{\varphi} = 0, \quad s_{\hat{z}} = -\frac{b}{2\pi} \varphi \quad (2.6)$$

Um die Verhältnisse in einem kubisch-flächenzentrierten Kupferkristall zu beschreiben, wählen wir ein kartesisches Koordinatensystem (x, y, z) , das im folgenden als „kubisch“ bezeichnet wird, und in dem die Gitterplätze des unverzerrten, versetzungsfreien Kristalls bei

$$\vec{R} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{usw. liegen.} \quad (2.7)$$

In diesem Koordinatensystem legen wir den Burgersvektor auf

$$\vec{b} := \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

fest. Die Transformation obiger Zylinderkoordinaten (ρ, \hat{z}, φ) in das kubische Koordinatensystem (x, y, z) erfolgt mittels

$$\begin{aligned}x &= (\rho \cos \varphi + \hat{z}) / \sqrt{2}, \\ y &= (\rho \cos \varphi - \hat{z}) / \sqrt{2}, \\ z &= \rho \sin \varphi.\end{aligned}\quad (2.9)$$

Für das Verschiebungsfeld folgt daraus

$$\vec{s}(\vec{r}) = -\frac{b}{2\pi\sqrt{2}} \arctan\left(\frac{\sqrt{2}z}{x+y}\right) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Mit der Gleichung (2.1) ergibt sich als Deformationstensor

$$\underline{\mathbf{d}} = \left(\frac{\partial s_i}{\partial r_j} \right) = \frac{b}{2\pi((x+y)^2 + 2z^2)} \begin{pmatrix} +z & +z & -(x+y) \\ -z & -z & +(x+y) \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

oder zerlegt nach symmetrischen und antisymmetrischen Anteilen

$$\underline{\mathbf{d}} = \frac{b}{2\pi((x+y)^2 + 2z^2)} \begin{pmatrix} +z & 0 & -\frac{1}{2}(x+y) \\ 0 & -z & +\frac{1}{2}(x+y) \\ -\frac{1}{2}(x+y) & +\frac{1}{2}(x+y) & 0 \end{pmatrix} + \frac{b}{2\pi((x+y)^2 + 2z^2)} \begin{pmatrix} 0 & +z & -\frac{1}{2}(x+y) \\ -z & 0 & +\frac{1}{2}(x+y) \\ +\frac{1}{2}(x+y) & -\frac{1}{2}(x+y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Im weiteren erweist sich folgende Zerlegung als sinnvoll :

$$\underline{\mathbf{d}} = \epsilon_{xx} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \epsilon_{xz} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

$$\text{mit } \epsilon_{xx} := \frac{z \cdot b}{2\pi((x+y)^2 + 2z^2)} \quad \text{und} \quad \epsilon_{xz} := \frac{-\frac{1}{2}(x+y) \cdot b}{2\pi((x+y)^2 + 2z^2)}$$

Derartige Vorfaktoren ϵ vor einer konstanten Matrix werden hier als „Verzerrungsstärken“ bezeichnet. Mit (2.8) gilt außerdem $b = |\vec{b}| = a/\sqrt{2}$.

2.3 Darstellung des Deformationspotentials und der Übergangswahrscheinlichkeiten

Unter dem Versetzungspotential ΔV verstehen wir die Differenz der effektiven Ein-Teilchen-Potentiale des gestörten, versetzungsbehafteten Kristalls und des ungestörten, versetzungsfreien Kristalls.

In Abschnitt 3 werden zur Lösung der Boltzmann-Gleichung die Wahrscheinlichkeiten $W(n'\vec{k}', n\vec{k})$ der Übergänge benötigt, die dieses Versetzungspotential zwischen den Zuständen $|n\vec{k}\rangle$ und $|n'\vec{k}'\rangle$ der Kristallelektronen bewirkt. Die Übergangswahrscheinlichkeiten gewinnt man nach *Fermis Goldener Regel* unmittelbar aus den Matrixelementen $\langle n'\vec{k}' | \Delta V | n\vec{k} \rangle$, d.h. im Rahmen zeitabhängiger Störungsrechnung 1. Ordnung wirkt das Versetzungspotential ΔV als Störoperator.

Die Einzelheiten dieser Rechnung sind in Abschnitt 4 erläutert.

Von den $|n\vec{k}\rangle$'s genügt es vorerst zu wissen, daß es sich um Blochzustände handelt, die Wellenfunktionen also die Bedingung

$$\begin{aligned}\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) &= e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})\end{aligned}\quad (2.14)$$

erfüllen.

Nach *Bross* und *Häberlen* [10] kann man das nichtperiodische, aber räumlich langsam veränderliche Versetzungspotential ΔV einer Schraubenversetzung dadurch approximieren, daß man den Deformationstensor $\underline{\mathbf{d}}(\vec{r})$ innerhalb der einzelnen Elementarzellen $C(\vec{R})$ als konstant annimmt und das Potential in jeder Zelle durch das eines entsprechend homogen verzerrten Kristalls ersetzt¹ :

$$\Delta V(\vec{r} + \vec{R}) \approx V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}(\vec{R}), \vec{r} + \vec{R}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}} = \underline{\mathbf{0}}, \vec{r} + \vec{R}) \quad \text{für } \vec{r} + \vec{R} \in C(\vec{R}) \quad (2.15)$$

Für einen beliebig homogen verzerrten Kristall läßt sich das Potential $V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}, \vec{r})$ aus einer selbstkonsistenten MAPW-Rechnung (siehe Abschnitt 4.1) gewinnen. Da aber durch die Schraubenversetzung jede Elementarzelle eine andere Verzerrung $\underline{\mathbf{d}}(\vec{R})$ als ihre Nachbarzellen erfährt, benötigt man einen Ausdruck, der das Kristallpotential für beliebige Deformationen wenigstens näherungsweise beschreibt.

Die Potenzreihenentwicklung

$$V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r}) + \underline{\mathbf{d}} : \underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r}) \quad (2.16)$$

¹ Die benachbarten Zellen sind etwa gleich stark verzerrt, so daß in guter Näherung die Verhältnisse in $C(\vec{R})$ einem homogen verzerrten Kristall gleichen.

des Kristallpotentials (bis zu linearen Termen in der Verzerrung) mit dem „modifizierten Deformationspotential“ $\underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r})$ ist nach *Bross* und *Häberlen* [10] eine hierfür geeignete Größe. Das modifizierte Deformationspotential $\underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r})$ unterscheidet sich vom nicht-modifizierten² $\underline{\mathbf{W}}(\vec{r})$ mit

$$V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}, \underline{\mathbf{d}}\vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r}) + \underline{\mathbf{d}} : \underline{\mathbf{W}}(\vec{r})$$

durch die Orte \vec{r} , bzw. $\underline{\mathbf{d}}\vec{r}$, an denen die Potentiale $V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}, \vec{r})$ verglichen werden. Der Operator „:“ entspricht der Spur des Produktes beider Tensoren :

$$\underline{\mathbf{d}} : \underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r}) := \text{Spur}(\underline{\mathbf{d}} \cdot \underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r})) = \sum_{ij=1}^3 d_{ij} \tilde{W}_{ji}(\vec{r}) \quad (2.17)$$

$\underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r})$ wird aus (2.16) durch den Grenzwert $\lim \|\underline{\mathbf{d}}\| \rightarrow 0$ bestimmt. $V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r})$ ist das effektive Ein-Teilchen-Potential eines unverzerrten Kupferkristalls.

Die bisher gemachten Näherungen und alle weiteren setzen voraus, daß die auftretenden Deformationen klein und nur langsam ortsveränderlich sind.

Die Faktoren $\epsilon_{xx}(\vec{R})$ und $\epsilon_{xz}(\vec{R})$ aus (2.13) zeigen jedoch auf der Versetzungslinie eine Singularität. Auch Abbildung 2.1 läßt erkennen, daß die Verzerrung der Elementarzellen im Versetzungskern, der Umgebung der Versetzungslinie, sehr groß ist. Da $\epsilon_{xx}(\vec{R})$ und $\epsilon_{xz}(\vec{R})$ aber nur mit $\frac{1}{R_{\perp}}$ abfallen, wobei R_{\perp} den Abstand von der Versetzungslinie bezeichnet, besteht der überwiegende Teil des Einflußbereichs der Schraubenversetzung aus gering verzerrten Elementarzellen, so daß die gemachten Näherungen, insbesondere wenn man den Versetzungskern ausschließt (siehe Abschnitt 4.5.2), nicht zu grob sind.

Setzt man diese Näherungen für die Schraubenversetzung und das Blochtheorem für die Elektronenzustände voraus, ergibt sich für das Matrixelement $\langle n'\vec{k}' | \Delta V | n\vec{k} \rangle$ nach *Bross* und *Häberlen* [10]

$$\begin{aligned} \langle n'\vec{k}' | \Delta V | n\vec{k} \rangle &\approx \langle n'\vec{k}' | \underline{\mathbf{d}}(\vec{r}) : \underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r}) | n\vec{k} \rangle \\ &\approx \sum_{\vec{R}} \langle n'\vec{k}' | \underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r}) | n\vec{k} \rangle_{C(\vec{R})} : \underline{\mathbf{d}}(\vec{R}) \\ &= \langle n'\vec{k}' | \underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r}) | n\vec{k} \rangle_{C(\vec{0})} : \sum_{\vec{R}} \underline{\mathbf{d}}(\vec{R}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Damit faktorisiert das Matrixelement in zwei Terme, wobei der erste mit dem modifizierten Deformationspotential $\underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r})$ die Änderung des Kristallpotentials bei einer beliebigen Deformation beschreibt, während der zweite eine Summe über das Verzerrungsfeld der

² Da das nicht-modifizierte Deformationspotential im weiteren nicht mehr auftritt, wird die Unterscheidung fallengelassen und es ist immer das modifizierte Deformationspotential gemeint.

Schraubenversetzung darstellt und völlig unabhängig von der elektronischen Struktur des Kristalls ist. Aus den Gleichungen (2.13),(2.17) und (2.18) erhält man

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle &= \sum_{\vec{R}} \epsilon_{xx}(\vec{R}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \sum_{ij=1}^3 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{ij} \langle n' \vec{k}' | \tilde{W}_{ji}(\vec{r}) | n \vec{k} \rangle + \\ &\sum_{\vec{R}} \epsilon_{xz}(\vec{R}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \sum_{ij=1}^3 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{ij} \langle n' \vec{k}' | \tilde{W}_{ji}(\vec{r}) | n \vec{k} \rangle \quad (2.19) \\ \text{mit} \quad \vec{q} &:= \vec{k} - \vec{k}' \end{aligned}$$

und daraus

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle &= \langle n' \vec{k}' | W_{xx}(\vec{r}) | n \vec{k} \rangle \sum_{\vec{R}} \epsilon_{xx}(\vec{R}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} + \\ &\langle n' \vec{k}' | W_{xz}(\vec{r}) | n \vec{k} \rangle \sum_{\vec{R}} \epsilon_{xz}(\vec{R}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}}, \quad (2.20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad W_{xx}(\vec{r}) &:= \tilde{W}_{11}(\vec{r}) + \tilde{W}_{12}(\vec{r}) - \tilde{W}_{21}(\vec{r}) - \tilde{W}_{22}(\vec{r}) \\ \text{und} \quad W_{xz}(\vec{r}) &:= 2 \tilde{W}_{13}(\vec{r}) - 2 \tilde{W}_{23}(\vec{r}) .bb \end{aligned}$$

Es ist zu beachten, daß in den Formeln (2.13) bzw. (2.19) der vollständige Deformationstensor $\underline{\mathbf{d}}$ verarbeitet wurde und nicht nur dessen symmetrischer Verzerrungsanteil $\underline{\epsilon}$, wie es bei *Schindler* [25] der Fall war.

2.4 Bestimmung des Deformationspotentials

Aus Gleichung (2.20) folgt, daß nicht alle neun Komponenten des Tensors $\tilde{\mathbf{W}}(\vec{r})$ benötigt werden, sondern daß es genügt, die Terme $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$ auswerten zu können. Im Grenzfall $\lim \|\underline{\mathbf{d}}\| \rightarrow 0$ liefert (2.16) eine Bestimmungsgleichung für $\tilde{\mathbf{W}}(\vec{r})$. Man kann eine Kombination tetragonaler und rhomboedrischer Verzerrungen, sowie starrer Rotationen des Kristalls angeben, deren Grenzwerte für verschwindende Verzerrungsstärken ϵ gerade $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$ ergeben.

Es beschreiben

$$\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}} := \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \underline{\mathbf{d}}_{\text{II}} := \epsilon \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

zwei volumenerhaltende, tetragonale Verzerrungen des Kupferkristalls.

Für einen Satz kleiner Verzerrungsstärken³ werden selbstkonsistente Potentiale der homogen verzernten Kristalle berechnet. Da sich $\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}$ mit einer Symmetrieoperation in $\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}$ überführen läßt,

$$\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \underline{\mathbf{d}}_{\text{I}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \quad (2.22)$$

$$\Rightarrow V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \vec{r}),$$

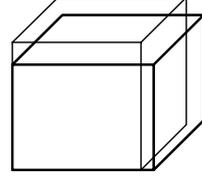


Abb. 2.2 :
Tetragonale Verzerrung
eines Würfels

genügt es, die selbstkonsistenten Potentiale für die tetragonale Verzerrung $\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}$ auszuwerten. Mit (2.16) gilt

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r})] &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} : \underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r}) \\ &= \tilde{\mathbf{W}}_{11} - 2\tilde{\mathbf{W}}_{22} + \tilde{\mathbf{W}}_{33} \quad \text{und} \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r})] &= \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} : \underline{\tilde{\mathbf{W}}}(\vec{r}) \\ &= -2\tilde{\mathbf{W}}_{11} + \tilde{\mathbf{W}}_{22} + \tilde{\mathbf{W}}_{33} \\ \Rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{3\epsilon} [V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}, \vec{r})] &= \tilde{\mathbf{W}}_{11} - \tilde{\mathbf{W}}_{22}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Betrachtet man noch eine starre Rotation des Kristalls um die Achse $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$, so gilt

$$\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}} := \varphi \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}^{-1} \vec{r}). \quad (2.24)$$

³ z.B.: $\epsilon \in \{0; \pm 2 \cdot 10^{-4}; \pm 5 \cdot 10^{-4}\}$ (siehe Abschnitt 4.3)
Für die Abbildungen 2.2 und 2.3 wurde $\epsilon := 10^{-2}$ gewählt.

Es muß daher kein neues selbstkonsistentes Potential für den gedrehten Kristall berechnet werden. Aus (2.16) folgt

$$\lim_{\varphi \rightarrow 0} \frac{1}{\varphi} \left[V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r}) \right] = \tilde{\mathbf{W}}_{12} - \tilde{\mathbf{W}}_{21}, \quad (2.25)$$

was zusammen mit (2.23) gerade $\mathbf{W}_{xx}(\vec{r})$ bildet :

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{3\epsilon} \left[V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}, \vec{r}) \right] + \lim_{\varphi \rightarrow 0} \frac{1}{\varphi} \left[V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r}) \right] = \\ \tilde{\mathbf{W}}_{11} + \tilde{\mathbf{W}}_{12} - \tilde{\mathbf{W}}_{21} - \tilde{\mathbf{W}}_{22} = \mathbf{W}_{xx}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Setzt man noch $\varphi \equiv \epsilon$, so ergibt die rechte Gleichungsseite eine Größe

$$V_{xx}(\epsilon, \vec{r}) := \frac{1}{3} \left[V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}, \vec{r}) \right] + \left[V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r}) \right], \quad (2.27)$$

deren Ableitung

$$\left. \frac{\partial V_{xx}(\epsilon, \vec{r})}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \mathbf{W}_{xx}(\vec{r}) \quad (2.28)$$

sich aus dem Satz der vorliegenden selbstkonsistenten Potentiale verschieden starker Verzerrung dadurch berechnen läßt, daß man an jedem festen Ort \vec{r} ein Ausgleichspolynom durch die $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$ -Werte legt und dessen Steigung an der Stelle $\epsilon = 0$ bestimmt.

Für $\mathbf{W}_{xz}(\vec{r})$ geht man analog vor. Aus den beiden volumenerhaltenden, rhomboedrischen Verzerrungen

$$\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}} := \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \underline{\mathbf{d}}_{\text{V}} := \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

zwischen denen wieder eine Symmetrieoperation vermittelt,

$$\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}^{-1} \quad (2.30)$$

$$\Rightarrow V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \vec{r}),$$

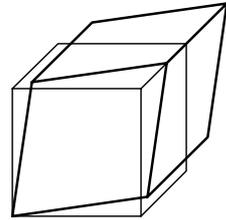


Abb. 2.3 :
Rhomboedr. Verzerrung
eines Würfels

und den beiden starren Rotationen um die Achsen $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$,

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}} &:= \varphi \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}^{-1} \vec{r}), \\ \underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}} &:= \varphi \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}^{-1} \vec{r}), \end{aligned} \quad (2.31)$$

bildet man

$$\begin{aligned} V_{xz}(\epsilon, \vec{r}) &:= \frac{1}{2} \left[V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}}, \vec{r}) \right] + \\ &\quad \left[V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r}) + V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}, \vec{r}) - V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r}) \right], \end{aligned} \quad (2.32)$$

wobei wieder $\varphi \equiv \epsilon$ gesetzt wurde.

Die Ableitung

$$\left. \frac{\partial V_{xz}(\epsilon, \vec{r})}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon=0} = W_{xz}(\vec{r}) \quad (2.33)$$

wird analog zu $W_{xx}(\vec{r})$ ausgewertet.

Die hierzu nötigen Sätze selbstkonsistenter tetragonaler und rhomboedrischer Kristallpotentiale wurden nach dem MAPW-Verfahren (siehe Abschnitt 4.1) berechnet und mir dankenswerterweise von Herrn Prof. Dr. H. Bross zur Verfügung gestellt.

Die Zerlegung des Deformationstensors in tetragonale bzw. rhomboedrische Verzerrungen und Drehungen bringt den Vorteil mit sich, daß die einzelnen Anteile relativ hohe Symmetrie (tetragonal 16-fach, rhomboedrisch 12-fach, Drehung 48-fach) behalten, was den Rechenaufwand zur selbstkonsistenten Bestimmung der effektiven Ein-Teilchen-Potentiale drastisch verringert.

Somit ist es möglich, aus den Potentialen homogen verzerter Kristalle die Matrixelemente $\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle$ der Streuung der Blochelektronen am Potential ΔV der Schraubenversetzung zu bestimmen.

3 Transporttheorie

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie man aus der elektronischen Struktur und den Übergangswahrscheinlichkeiten aus Abschnitt 2 den elektrischen Leitfähigkeitstensor dadurch bestimmt, daß man die Boltzmann-Gleichung in eine inhomogene, lineare Integralgleichung mit symmetrischem Kern überführt und auf einem diskreten \vec{k} -Raster löst.

3.1 Boltzmann-Gleichung

Wie üblich [1, 20] ist der Ausgangspunkt zur Beschreibung des Elektronentransports und damit auch der elektrischen Leitfähigkeit die Boltzmannsche Transportgleichung. Die Anwendbarkeit dieses semiklassischen Zugangs auf ein quantenmechanisches Streuproblem konnte, zumindest für die Streuung an Gitterverunreinigungen, durch feldtheoretische Überlegungen bestätigt werden [23].

Für die Verteilungsfunktion $f(\vec{k})$ der Elektronen lautet die Boltzmann-Gleichung im stationären Fall

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Felder}} = 0. \quad (3.1)$$

Der Stoßterm gibt in unserem Fall die Änderung der Verteilungsfunktion durch die Anwesenheit der Schraubenversetzung im Gitter an, während der Feldterm die Änderung durch ein konstantes, homogenes äußeres \vec{E} -Feld beschreibt. Es wird dabei die Abwesenheit von Magnetfeldern und eine konstante Temperatur von $T = 0$ K vorausgesetzt. Damit ergibt sich der Feldterm zu

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Felder}} = \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} f(\vec{k}). \quad (3.2)$$

Für den Stoßterm gilt

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}} = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{1. \text{ BZ}} \{ W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}) [1 - f(\vec{k}')] - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}') [1 - f(\vec{k})] \} d^3k', \quad (3.3)$$

wobei $W(\vec{k}', \vec{k})$ die Wahrscheinlichkeit einer Streuung vom Zustand $|n\vec{k}\rangle$ nach $|n'\vec{k}'\rangle$ angibt (die Bandindizes n, n' wurden weggelassen). Dem Pauliprinzip wird dadurch Rechnung getragen, daß die Streuung nur in unbesetzte Zustände erfolgen kann.

Genauer ist $\frac{1}{(2\pi)^3} W(\vec{k}', \vec{k}) d^3k' dt$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Zustand $|n\vec{k}\rangle$ innerhalb der Zeit dt in einen Zustand $|n'\vec{k}'\rangle$ der infinitesimalen Zelle d^3k' um \vec{k}' gestreut wird.

In zeitabhängiger Störungstheorie 1. Ordnung [1, 22] erhält man für die elastische Streuung am Versetzungspotential

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle n'\vec{k}' | \Delta V | n\vec{k} \rangle \right|^2 \delta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}'}) \frac{1}{LA_0} \quad (3.4)$$

mit $\mathcal{E}_{\vec{k}} = \text{Energie des Zustands } |n\vec{k}\rangle$.

$1/LA_0$ ist die Zahl der Schraubenversetzungen pro Einheitsvolumen. Die unendliche Größe L , die Länge der Versetzungslinie (siehe Abschnitt (4.5.1)), wird sich mit dem entsprechenden Faktor in $|\langle n'\vec{k}' | \Delta V | n\vec{k} \rangle|^2$ verkürzen.

Man sieht, daß die Übergangswahrscheinlichkeiten symmetrisch in \vec{k} und \vec{k}' sind, d.h.

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k}). \quad (3.5)$$

Unter dieser Voraussetzung vereinfacht sich (3.3) zu

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{1. BZ}} W(\vec{k}', \vec{k}) \{f(\vec{k}) - f(\vec{k}')\} d^3k'. \quad (3.6)$$

Damit lautet die Transportgleichung

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{1. BZ}} W(\vec{k}', \vec{k}) \{f(\vec{k}) - f(\vec{k}')\} d^3k' = \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \text{grad}_{\vec{k}} f(\vec{k}). \quad (3.7)$$

Da das gesuchte Endergebnis dieses Abschnitts der elektrische Leitfähigkeitstensor $\underline{\sigma}$ bzw. der Widerstandstensor $\underline{\rho}$ ist, ist es zulässig, von schwachen \vec{E} -Feldern auszugehen, und deshalb die Verteilungsfunktion $f(\vec{k})$ zu linearisieren

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}} \Phi(\vec{k}). \quad (3.8)$$

Dabei ist $f_0(\vec{k})$ die Verteilung im feld- und versetzungsfreien Fall, also die Fermiverteilung. Insbesondere gilt

$$f_0(\vec{k}) = \begin{cases} 1 & \text{falls } \mathcal{E}_{\vec{k}} < \mathcal{E}_{\text{Fermi}} \\ 0 & \text{falls } \mathcal{E}_{\vec{k}} > \mathcal{E}_{\text{Fermi}} \end{cases}, \quad \text{da } T = 0 \text{ K.} \quad (3.9)$$

$\Phi(\vec{k})$ sei linear in \vec{E} und von der Form

$$\Phi(\vec{k}) = \vec{E} \cdot \vec{X}(\vec{k}). \quad (3.10)$$

Macht man von den Beziehungen

$$(3.9) \Rightarrow (f_0(\vec{k}) - f_0(\vec{k}')) \cdot \delta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}'}) \equiv 0, \quad (3.11)$$

$$\vec{\text{grad}}_{\vec{k}} f(\vec{k}) = \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}) \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} + \mathcal{O}(\Phi)$$

Gebrauch, lautet mit (3.4) die Gleichung (3.7)

$$-\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{LA_0} \int_{1. \text{ BZ}} |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}'}) \cdot \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}) \Phi(\vec{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}') \Phi(\vec{k}') \right\} d^3 k' = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}) \vec{E} \cdot \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}}, \quad (3.12)$$

wobei nur lineare Terme in Φ und \vec{E} mitgenommen, und gemischte, sowie höhere Terme vernachlässigt wurden.

Für die Stromdichte kennt man die Beziehung [5]

$$\vec{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \int_{1. \text{ BZ}} f(\vec{k}) \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} d^3 k, \quad (3.13)$$

die mit (3.8) die Gestalt

$$\vec{j} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \int_{1. \text{ BZ}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}) \Phi(\vec{k}) \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} d^3 k, \quad (3.14)$$

annimmt, da mit der Fermiverteilung $f_0(\vec{k})$ allein noch kein Nettostrom fließt. Betrachtet man das Ohmsche Gesetz

$$\vec{j} = \underline{\underline{\sigma}} \vec{E} \quad \text{bzw.} \quad \vec{E} = \underline{\underline{\rho}} \vec{j}, \quad (3.15)$$

so ist das weitere Vorgehen klar :

Man bestimme zu drei linear unabhängigen Vektoren \vec{E}_{κ} , $\kappa=1, 2, 3$ die Lösung $\Phi_{\kappa}(\vec{k})$ der Transportgleichung (3.12), berechne mittels (3.14) die hervorgerufenen Ströme \vec{j}_{κ} und werte nach (3.15) den Leitfähigkeits- bzw. Widerstandstensor aus.

Leider erweist sich die Auflösung der Transportgleichung (3.12) nach $\Phi(\vec{k})$ in voller Allgemeinheit mit analytischen Mitteln als unmöglich; es müssen daher weitere Annahmen oder Näherungen gemacht werden.

3.2 Diskrete Lösungsmethode für die Transportgleichung

Neben der Relaxationszeitnäherung [18] ist das Kohler-Enskogsche Variationsverfahren [20], welches auch von *Häberlen* [16] und *Schindler* [25] benutzt wurde, die übliche Methode, eine approximative Lösung der Transportgleichung zu finden.

Hierzu geht man von einem Reihenansatz für die Lösung

$$\Phi(\vec{k}) = \sum_n a_n \psi_n(\vec{k}) \quad (3.16)$$

aus, dessen Ansatzfunktionen $\psi_n(\vec{k})$ die passende Symmetrie besitzen müssen, um Teilchenzahl- und Energieerhaltung sicherzustellen. Die Koeffizienten werden aus einer Extremalforderung an den Ausdruck

$$\iint_{\text{1. BZ}} |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}) \Phi(\vec{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}'}}(\vec{k}') \Phi(\vec{k}') \right\} \cdot \delta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}'}) \Phi(\vec{k}) d^3 k' d^3 k \quad (3.17)$$

bestimmt, was physikalisch der Maximierung der zeitlichen Entropie-Erzeugungsrate auf Grund der Stöße der Elektronen entspricht.

Hier soll jedoch ein anderer Weg beschritten werden, denn mit den heutigen numerischen Methoden und der verfügbaren Rechnerleistung ist es möglich, die Transportgleichung auf einem ausreichend dichten Raster von \vec{k} -Punkten direkt zu lösen :

Die Transportgleichung wird in eine inhomogene, lineare Integralgleichung mit symmetrischem Kern übergeführt. Die Lösung $\psi(\vec{k})$ der Integralgleichung erhält man als Linearkombination der Eigenfunktionen $\varphi_{\nu}(\vec{k})$ ihres Kerns, wobei sich die Koeffizienten a_{ν} dieser Linearkombination aus den Projektionen der Eigenfunktionen auf die Inhomogenität $R(\vec{k})$ ergeben [11].

Zur Auswertung der Integrale (3.12) und (3.14) über die Fermifläche wird man sich eines numerischen Integrationsverfahrens bedienen, im einfachsten Fall der Rechteckregel. Dies führt zur Nyströmschen Methode [2] für die Lösung linearer, inhomogener Integralgleichungen. Dabei werden alle Berechnungen auf dem diskreten Stützstellenraster $\{\vec{k}_i\}$ des Integrationsverfahrens durchgeführt.

Die Integralgleichung geht in eine N -dimensionale Vektor-Matrix-Gleichung über, wobei N die Zahl der Stützstellen $\{\vec{k}_i\}$ bezeichnet. Zur Darstellung der Lösung $\psi(\vec{k})$ als Linearkombination der $\varphi_{\nu}(\vec{k})$ sind die Eigenfunktionen des reellen, symmetrischen Kerns der Integralgleichung zu bestimmen. Durch die Diskretisierung reduziert sich dieses Problem auf die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren einer symmetrischen $N \times N$ -Matrix

– ein Problem, das auch für große Matrizen zuverlässig und schnell numerisch gelöst werden kann.

Nyström fand, daß jeder diskret gewonnenen Lösung der N -dimensionalen Vektorgleichung eineindeutig eine kontinuierliche Lösung der Integralgleichung zugeordnet werden kann, wenn man das Integral durch seine numerische Approximation ersetzt. Die Funktionswerte beider Lösungen stimmen an den Stützstellen überein. In diesem Sinne ist die diskret gefundene Lösung numerisch exakt.

Zunächst ist also die Gleichung (3.12) in eine inhomogene, lineare Integralgleichung mit symmetrischem Kern überzuführen.

In die Transportgleichung (3.12) bzw.

$$\int_{\text{1. BZ}} |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 \delta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}'}) \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}) \Phi(\vec{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}'}}(\vec{k}') \Phi(\vec{k}') \right\} d^3 k' =$$

$$-(2\pi)^2 e L A_0 \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}) \vec{E} \cdot \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} \quad (3.18)$$

geht als $\partial f_0 / \partial \mathcal{E}_{\vec{k}}$ die Ableitung der Fermiverteilung ein, die sich mit $T = 0$ K als

$$(3.9) \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}_{\vec{k}}}(\vec{k}) = -\delta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_F) \quad (3.19)$$

darstellt. Die auftretenden δ -Distributionen reduzieren das dreidimensionale Integral über die 1. Brillouin-Zone auf ein zweidimensionales Integral über die Fermifläche S_F . Die Volumenelemente $d^3 k$ gehen mit

$$d^3 k = \frac{dS(\vec{k}) \cdot d\mathcal{E}_{\vec{k}}}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}}|}, \quad (3.20)$$

nach Integration über $d\mathcal{E}_{\vec{k}} \cdot \delta(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_F)$ in Flächenelemente über, die allerdings von \vec{k} abhängen. Man erhält

$$\int_{S_F} |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 \{ \Phi(\vec{k}) - \Phi(\vec{k}') \} \frac{dS(\vec{k}')}{|\text{grad}_{\vec{k}', \mathcal{E}_{\vec{k}'}}|} =$$

$$-(2\pi)^2 e L A_0 \vec{E} \cdot \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} \quad \text{für } \vec{k} \in S_F \quad (3.21)$$

und sieht, daß sich das Netz der \vec{k} -Punkte nur über die Fermifläche zu erstrecken braucht.

Courant und *Hilbert* [11] definieren den Prototyp einer inhomogenen, linearen Integralgleichung mit symmetrischem Kern als

$$f(s) = \varphi(s) - \lambda \int K(s, t) \varphi(t) dt \quad \text{mit } K(s, t) = K(t, s) \quad \forall s, t. \quad (3.22)$$

Gleichung (3.21) ist somit auf die Form (3.22) zu bringen.

Hierzu schreibt man (3.21) als

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{k}) \cdot \int_{S_F} |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 \frac{dS(\vec{k}')}{|\text{grad}_{\vec{k}', \mathcal{E}_{\vec{k}'}}|} - \int_{S_F} |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 \Phi(\vec{k}') \frac{dS(\vec{k}')}{|\text{grad}_{\vec{k}', \mathcal{E}_{\vec{k}'}}|} = \\ -(2\pi)^2 eLA_0 \vec{E} \cdot \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (3.23)$$

und führt die Substitutionen

$$U(\vec{k}) := \int_{S_F} |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 \frac{dS(\vec{k}')}{|\text{grad}_{\vec{k}', \mathcal{E}_{\vec{k}'}}|} \quad \text{und} \quad (3.24)$$

$$\hat{\psi}(\vec{k}) := \Phi(\vec{k}) \sqrt{U(\vec{k})} \quad \text{ein.} \quad (3.25)$$

Dividiert man (3.23) durch $\sqrt{U(\vec{k})}$ erhält man

$$\hat{\psi}(\vec{k}) - \int_{S_F} \frac{|\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2}{\sqrt{U(\vec{k})} \sqrt{U(\vec{k}')}} \hat{\psi}(\vec{k}') \frac{dS(\vec{k}')}{|\text{grad}_{\vec{k}', \mathcal{E}_{\vec{k}'}}|} = -\frac{(2\pi)^2 eLA_0}{\sqrt{U(\vec{k})}} \vec{E} \cdot \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}}, \quad (3.26)$$

was (3.22) schon ähnelt.

Um (3.26) auszuwerten, kann man das Integral über die Fermifläche durch eine zweidimensionale Rechteckregel approximieren. Deren Stützstellennetz $\{\vec{k}_i\}$ wird für alle weiteren Berechnungen beibehalten, d.h. der Verlauf der in \vec{k} kontinuierlichen Funktionen wird nur noch auf diesem diskreten Raster betrachtet. Damit vereinfacht sich (3.26) zu

$$\hat{\psi}(\vec{k}_i) - \sum_{\vec{k}_j} \frac{|\langle n' \vec{k}_j | \Delta V | n \vec{k}_i \rangle|^2}{\sqrt{U(\vec{k}_i)} \sqrt{U(\vec{k}_j)}} \hat{\psi}(\vec{k}_j) \frac{\Delta S(\vec{k}_j)}{|\text{grad}_{\vec{k}, \mathcal{E}_{\vec{k}_j}}|} = -\frac{(2\pi)^2 eLA_0}{\sqrt{U(\vec{k}_i)}} \vec{E} \cdot \vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_i}. \quad (3.27)$$

Die Differentiale $dS(\vec{k})$ gehen dabei in endliche Flächenelemente $\Delta S(\vec{k}_j)$ über.

Es würde sich auch anbieten, (3.27) als lineares Gleichungssystem zur Berechnung der $\hat{\psi}(\vec{k}_i)$ aufzufassen. Dies entspräche der eigentlichen Idee des Nyströmschen Lösungsverfahrens [2]. Das Auftreten von Eigenfunktionen zum Eigenwert $\lambda = 1$ in Abschnitt 4.6.3

führt aber zu Singularitäten der Gleichungssysteme, die mit der Fredholmschen Alternative [11] verstanden und behandelt werden können (siehe Anhang D). Dazu müssen die Eigenfunktionen des Kerns der Integralgleichung bekannt sein. Daher ist es günstiger, die Darstellung von $\hat{\psi}(\vec{k}_i)$ als Linearkombination der Eigenfunktionen des Kerns zu bestimmen, wie im folgenden erläutert wird.

Numeriert man die \vec{k}_i -Punkte von 1 bis N , kann $\hat{\psi}(\vec{k}_i)$ und die rechte Seite von (3.27)

$$\hat{R}(\vec{k}_i) := -\frac{(2\pi)^2 eLA_0}{\sqrt{U(\vec{k}_i)}} \vec{E} \cdot \text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_i} \quad (3.28)$$

durch N -dimensionale Vektoren $\underline{\hat{\psi}}$ und $\underline{\hat{R}}$ ausgedrückt werden, mit

$$\hat{\psi}(\vec{k}_i) =: \hat{\psi}^{(i)} \Rightarrow \underline{\hat{\psi}} \quad \text{und} \quad \hat{R}(\vec{k}_i) =: \hat{R}^{(i)} \Rightarrow \underline{\hat{R}}. \quad (3.29)$$

Die Unterstreichung kennzeichnet hier ausnahmsweise Vektoren. Damit läßt sich (3.27) als Vektorgleichung schreiben

$$\underline{\hat{\psi}} - \hat{\mathbf{V}} \underline{\hat{\psi}} = \underline{\hat{R}} \quad \text{mit} \quad \hat{V}_{ij} := \frac{|\langle n' \vec{k}_j | \Delta V | n \vec{k}_i \rangle|^2}{\sqrt{U(\vec{k}_i)U(\vec{k}_j)}} \frac{\Delta S(\vec{k}_j)}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_j}|}. \quad (3.30)$$

Wegen des Terms $\frac{\Delta S(\vec{k}_j)}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_j}|}$ ist die Matrix $\hat{\mathbf{V}}$ aber noch nicht symmetrisch.

Mit den Definitionen

$$\begin{aligned} D(\vec{k}_j) &:= \frac{\Delta S(\vec{k}_j)}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_j}|}, \\ \psi(\vec{k}_i) &:= \hat{\psi}(\vec{k}_i) \sqrt{D(\vec{k}_i)} = \Phi(\vec{k}_i) \sqrt{D(\vec{k}_i)U(\vec{k}_i)}, \\ R(\vec{k}_i) &:= \hat{R}(\vec{k}_i) \sqrt{D(\vec{k}_i)} = -(2\pi)^2 eLA_0 \sqrt{\frac{D(\vec{k}_i)}{U(\vec{k}_i)}} \vec{E} \cdot \text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_i}, \\ V_{ij} &:= \hat{V}_{ij} \sqrt{\frac{D(\vec{k}_i)}{D(\vec{k}_j)}} = |\langle n' \vec{k}_j | \Delta V | n \vec{k}_i \rangle|^2 \sqrt{\frac{D(\vec{k}_i)D(\vec{k}_j)}{U(\vec{k}_i)U(\vec{k}_j)}}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

erhält man die Gleichung

$$\underline{\psi} - \mathbf{V} \underline{\psi} = \underline{R} \quad (3.32)$$

mit der reellen, symmetrischen $N \times N$ -Matrix \mathbf{V} .

Führt man ein N -dimensionales Skalarprodukt $\underline{a} \bullet \underline{b} := \sum_{i=1}^N a(\vec{k}_i) b(\vec{k}_i)$ ein, findet man allgemein für die Diskretisierung eines Integrals über die Fermifläche

$$\int_{S_F} f(\vec{k}) g(\vec{k}) \frac{dS(\vec{k})}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}}|} \iff \underline{F} \bullet \underline{G} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} F^{(i)} &:= f(\vec{k}_i) \sqrt{D(\vec{k}_i)} \\ G^{(i)} &:= g(\vec{k}_i) \sqrt{D(\vec{k}_i)} \end{aligned} . \quad (3.33)$$

Nach *Courant* und *Hilbert* [11] läßt sich die Lösung einer Integralgleichung vom Typ (3.22) als Linearkombination der Eigenfunktionen $\varphi_n(s)$ des Kerns darstellen, wobei die Reihe über die Eigenfunktionen absolut und gleichmäßig konvergiert.

Die Eigenfunktionen sind als

$$\varphi_n(s) = \lambda_n \int K(s, t) \varphi_n(t) dt \quad \forall s \quad (3.34)$$

definiert. Im diskreten Fall der Gleichung (3.32) ergibt sich

$$\underline{\varphi}_n = \lambda_n \mathbf{V} \underline{\varphi}_n \quad \text{mit} \quad \varphi_n^{(i)} = \varphi_n(\vec{k}_i). \quad (3.35)$$

Da \mathbf{V} eine reelle, symmetrische Matrix ist, sind ihre Eigenwerte reell und die Eigenräume orthogonal. Es ist insbesondere möglich, die Eigenvektoren bzw. Eigenfunktionen zu orthonormieren. Man beachte, daß λ_n die *reziproken* Eigenwerte der Matrix \mathbf{V} sind.

Während im Kohler-Enskogschens-Variationsverfahren nur das Proximum auf einem endlich-dimensionalen Ansatzraum bestimmt werden kann, bilden die $\{\underline{\varphi}_n\}$ eine vollständige Orthonormalbasis des \mathbb{R}^N .

Setzt man nun die Darstellung von $\underline{\psi}$ in der Orthonormalbasis der $\underline{\varphi}_n$

$$\underline{\psi} = \sum_n a_n \underline{\varphi}_n \quad (3.36)$$

in (3.32) ein, erhält man

$$\sum_n a_n (\mathbf{1} - \mathbf{V}) \underline{\varphi}_n = \underline{R} \quad \Rightarrow \quad \sum_n a_n \left(1 - \frac{1}{\lambda_n}\right) \underline{\varphi}_n = \underline{R}, \quad (3.37)$$

und nach Skalarproduktbildung mit einem der orthonormierten Eigenvektoren $\underline{\varphi}_m$

$$\begin{aligned} \sum_n a_n \left(\frac{\lambda_n - 1}{\lambda_n}\right) \underline{\varphi}_n \bullet \underline{\varphi}_m &= \underline{R} \bullet \underline{\varphi}_m \quad \text{mit} \quad \underline{\varphi}_n \bullet \underline{\varphi}_m = \delta_{n,m} \\ \Rightarrow a_m &= \frac{\lambda_m}{\lambda_m - 1} \underline{R} \bullet \underline{\varphi}_m . \end{aligned} \quad (3.38)$$

Die Entwicklungskoeffizienten ergeben sich als Projektionen der Eigenlösung $\varphi_m(\vec{k})$ auf die Inhomogenität $R(\vec{k})$. Mit

$$\Phi(\vec{k}_i) = \frac{1}{\sqrt{U(\vec{k}_i) D(\vec{k}_i)}} \sum_n a_n \varphi_n(\vec{k}_i) \quad (3.39)$$

ist der Verlauf der Lösung $\Phi(\vec{k})$ auf dem Netz $\{\vec{k}_i\}$ bekannt, und es kann mit (3.14) der zugehörige Strom berechnet werden. Man findet

$$\vec{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \sum_i \Phi(\vec{k}_i) \text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_i} D(\vec{k}_i). \quad (3.40)$$

Wie am Ende des vorangegangenen Abschnitts erwähnt, kann man sich ein Dreibein von \vec{E} -Vektoren vorgeben und zu jedem Vektor \vec{E}_κ , $\kappa = 1, 2, 3$ die Lösung $\Phi_\kappa(\vec{k})$ und den Strom \vec{j}_κ berechnen, woraus sich die neun Komponenten des Leitfähigkeitstensors bestimmen lassen. Nach

$$\underline{\rho} = \underline{\sigma}^{-1} \quad (3.41)$$

kann aus dem Leitfähigkeitstensor $\underline{\sigma}$ der Widerstandstensor $\underline{\rho}$ berechnet werden.

Für den magnetfeld-freien Fall fordern sowohl die Onsagerschen Reziprozitätsbeziehungen [1] als auch die Anschauung die Symmetrie des Leitfähigkeits- und Widerstandstensors.

Es soll noch gezeigt werden, daß auch das angegebene Verfahren zu diesem Ergebnis kommt.

Dazu führt man eine vektorwertige Funktion $\vec{P}(\vec{k})$ gemäß

$$\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} =: -\frac{1}{(2\pi)^2 e LA_0} \sqrt{\frac{U(\vec{k})}{D(\vec{k})}} \vec{P}(\vec{k}) \quad (3.42)$$

ein, mit der sich (3.29) und (3.38) als¹

$$\underline{R} = \vec{E} \cdot \underline{P} \quad \Rightarrow \quad a_n = \frac{\lambda_n}{\lambda_n - 1} \vec{E} \cdot \underline{P} \bullet \underline{\varphi}_n \quad (3.43)$$

darstellen.

Mit (3.42) und (3.43) läßt sich (3.40) als

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \frac{2}{(2\pi)^5 \hbar LA_0} \underline{\psi} \bullet \underline{P} = \frac{2}{(2\pi)^5 \hbar LA_0} \sum_n a_n \underline{\varphi}_n \bullet \underline{P} \\ &= \frac{2}{(2\pi)^5 \hbar LA_0} \sum_n \frac{\lambda_n}{\lambda_n - 1} (\vec{E} \cdot \underline{P} \bullet \underline{\varphi}_n) \underline{\varphi}_n \bullet \underline{P} \\ \Rightarrow j^{(i)} &= \frac{2}{(2\pi)^5 \hbar LA_0} \sum_n \frac{\lambda_n}{\lambda_n - 1} \sum_{j=1}^3 (\underline{\varphi}_n \bullet \underline{P}^{(j)}) (\underline{\varphi}_n \bullet \underline{P}^{(i)}) E^{(j)} \end{aligned} \quad (3.44)$$

¹ dreidimensionales Skalarprodukt $\vec{E} \cdot \vec{P}(\vec{k}_i)$

schreiben. Daraus folgt nach (3.15)

$$\sigma_{ij} = \frac{2}{(2\pi)^5 \hbar LA_0} \sum_n \frac{\lambda_n}{\lambda_n - 1} (\underline{\varphi}_n \cdot \underline{P}^{(j)}) (\underline{\varphi}_n \cdot \underline{P}^{(i)}), \quad (3.45)$$

woraus die Symmetrie $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ unmittelbar hervorgeht.

Man beachte, daß wegen (3.42) $\vec{P}(\vec{k})$ und deshalb auch $\underline{\sigma}$ proportional zu A_0 sind, auch wenn (3.45) den Anschein erweckt, $\underline{\sigma}$ wäre proportional zu $1/A_0$.

Aus der Nyströmschen Methode folgt, daß diese Darstellung bis auf die Approximation des Integrals durch die Rechteckregel exakt ist.

Experimentell zugänglich [3] sind nur die isotropen Mittelwerte $\bar{\sigma}, \bar{\rho}$ der Tensoren. Da sich die Tensoren unter Drehungen $\underline{S} \in SO(3)$ gemäß

$$\underline{\sigma}_{\text{gedreht}} = \underline{S}^{-1} \cdot \underline{\sigma}_{\text{ungedreht}} \cdot \underline{S} \quad (3.46)$$

transformieren, erhält man als Mittelwert über alle Drehungen

$$\bar{\sigma} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \underline{S}^{-1}(\Omega) \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{S}(\Omega) \, d\Omega. \quad (3.47)$$

Diese Integration muß aber nicht ausgeführt werden, da die Spur der Tensoren unter den Drehungen invariant ist. Bildet man von beiden Seiten der Gleichung (3.47) die Spur, so findet man

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{3} \text{Spur}(\underline{\sigma}). \quad (3.48)$$

Für den mittleren spezifischen Widerstand $\bar{\rho}$ gilt nach (3.41)

$$\bar{\rho} = \frac{1}{\bar{\sigma}}. \quad (3.49)$$

Damit ist es möglich, die berechneten Werte mit gemessenen zu vergleichen (siehe Abschnitt 5).

4 Durchführung der Berechnungen

In diesem Abschnitt werden die wesentlichen Schritte und Überlegungen dargestellt, die zur numerischen Auswertung der bisher entwickelten Theorie nötig sind.

4.1 MAPW-Verfahren

Aus den bisherigen Ausführungen geht hervor, daß man, um die Transportgleichung lösen zu können, u.a. die Blochzustände $|n\vec{k}\rangle$ des unverzerrten Kristalls und die Gestalt der Fermifläche, sowie den Energiegradienten $\vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}}$ darauf benötigt. Zur Bestimmung des Deformationspotentials braucht man, wie in Abschnitt 2.4 gezeigt, die effektiven Ein-Teilchen-Potentiale für den unverzerrten und eine Reihe unterschiedlich stark, rhomboedrisch oder tetragonal verzerrter Kristalle.

All das wurde mit dem MAPW-Verfahren nach *Bross* [4, 6, 9] berechnet, daher sollen hier dessen wesentliche Punkte erläutert werden.

Ausgangspunkt ist die Überlegung, daß das Potential, welches ein Elektron in einem Kristallgitter verspürt, in der Nähe eines Atomrumpfes etwa sphärische Symmetrie aufweist, mit einer Coulomb-Singularität am Ort des Kerns. In den Bereichen, die zwischen den Atomrümpfen liegen, ist das Potential dagegen nur langsam ortsveränderlich¹, für viele Fälle wird es als konstant angenommen².

In einem Gitter ohne Basis, wie es bei Kupfer der Fall ist, trennt man in jeder Elementarzelle den sphärischen, atomnahen Bereich I (Innenraum) vom atomfernen Bereich II (Außenraum) durch die sog. APW-Kugel, deren Radius R_{APW} so groß gewählt wird, daß die Kugel gerade noch in die Zelle hineinpaßt³.

Für die Wellenfunktion des Blochzustands $|n\vec{k}\rangle$ macht man den Ansatz

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) := \sum_{\vec{K}} v(n\vec{k}, \vec{K}) e^{i(\vec{k}+\vec{K})\cdot\vec{r}} + \chi_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (4.1)$$

Die \vec{K} -Summe läuft über $\{\vec{K} \mid (\vec{k} + \vec{K})^2 \leq \text{QMAXSQ} \cdot (2\pi/a)^2\}$, wobei der Parameter QMAXSQ für das vorliegende Problem auf 15.00 gesetzt wurde⁴. Während die Summe über die

¹ die sog. Warped-Muffin-Tin-Approximation

² die sog. Muffin-Tin-Approximation

³ zur tatsächlichen Wahl der APW-Radien siehe Anhang A

⁴ zur tatsächlichen Wahl von QMAXSQ siehe Abschnitt 4.3

ebenen Wellen in der ganzen Elementarzelle gilt, ist der Term $\chi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ nur im Innenraum von Null verschieden. Denkt man sich die Summe über die ebenen Wellen gemäß

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\nu=1}^{2l+1} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{k}^o) j_l(|\vec{k}|r) \quad (4.2)$$

nach Drehimpulsen entwickelt, so „sehen“ nur die Anteile der niedrigsten Drehimpulse $0, \dots, L$ das radiale Potential des Innenraums. Der Term $\chi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ muß daher für diese Drehimpulse ihre Anteile im Innenraum durch eine Entwicklung nach Radialfunktionen ersetzen, was durch die Form

$$\chi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{l=0}^L \sum_{\nu=1}^{2l+1} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}^o) \cdot \left\{ \sum_s A_{sl\nu} R_{sl}(r) - \sum_{\vec{K}} v(n\vec{k}, \vec{K}) Y_{l\nu}((\vec{k} + \vec{K})^o) j_l(|\vec{k} + \vec{K}|r) \right\} \quad (4.3)$$

erreicht wird. $Y_{l\nu}$ sind die reellwertigen Kugelflächenfunktionen, $\eta_{l\nu}$ die zugehörigen Normierungsfaktoren (siehe (4.2)) und j_l die sphärischen Besselfunktionen. Die R_{sl} sind die Lösungen der radialen Differentialgleichung des sphärisch-symmetrischen Innenraumpotentials zu geeignet gewählten Energien \mathcal{E}_{sl} ; die \vec{K} -Summe läuft über die Werte aus (4.1). Damit die Wellenfunktion überall stetig differenzierbar bleibt, muß auf der APW-Kugel

$$\chi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial r} \chi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall \vec{r} \text{ mit } |\vec{r}| = R_{\text{APW}} \quad (4.4)$$

gelten, was durch entsprechende Nebenbedingungen an die $A_{sl\nu}$ und $v(n\vec{k}, \vec{K})$ realisiert wird. Als Anzahl L der Drehimpulse in (4.3) genügt in unserem Fall $L := 3$.

Mit den bereits vorhandenen Computerprogrammen war es mit obigem Ansatz möglich, die Wellenfunktionen, die Fermienergie, den Energiegradienten und das selbstkonsistente Potential für den unverzerrten Kristall, sowie für beliebig stark tetragonal oder rhomboedrisch verzerrte Kristalle zu berechnen.

Durch die Aufteilung der Elementarzellen in zwei Bereiche ergibt sich für das Potential die Gestalt

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} V_I(\vec{r}) & := V_{\text{rad}}(r) & \text{falls } |\vec{r}| < R_{\text{APW}} \\ V_{II}(\vec{r}) & := \sum_{\vec{K}} V(\vec{K}) e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} & \text{falls } |\vec{r}| > R_{\text{APW}} \end{cases} \quad (4.5)$$

Die begrenzte Zahl ebener Wellen in den MAPW-Ansatzfunktionen bewirkt, daß eine endliche Fourierreihe des Außenraumpotentials genügt, um die Wellenfunktionen zu berechnen, d.h. würde man die Zahl der Fourierkoeffizienten des Potentials vergrößern, die

Zahl der ebenen Wellen der Ansatzfunktionen aber beibehalten, würden sich die Wellenfunktionen nicht verändern.

Die endlich Fourierreihe des Potentials genügt zwar, um die Wellenfunktionen zu bestimmen; um den tatsächlichen Verlauf des Außenraumpotentials $V_{II}(\vec{r})$ wiederzugeben, bräuchte man indes eine sehr viel größere Anzahl von Fourierkoeffizienten. Dies liegt zum einen an der Coulomb-Singularität des Potentials im Zellenmittelpunkt, zum anderen auch daran, daß das Potential im Innenraum sphärisch-symmetrisch, im Außenraum jedoch beliebig ist, daß es also auf der APW-Kugel i.a. springt. Die Fourierreihe des Potentials wird demnach in der Nähe der APW-Kugel „Überschwinger“ zeigen, die auch bei Mitnahme sehr vieler Koeffizienten nicht verschwinden.

Dieser Effekt wird von der (Warped)-Muffin-Tin-Approximation des Potentials verursacht und könnte durch Berücksichtigung nicht-sphärischer Anteile eliminiert werden.

Da zur Bestimmung des Deformationspotentials nach (2.27)(2.28) bzw. (2.32)(2.33) der genaue Potentialverlauf benötigt wird, ist es unzulässig, auf die vorliegenden Fourierkoeffizienten zurückzugreifen, sondern es muß das vollständige Außenraumpotential aus der Ladungsdichte konstruiert werden.

Die selbstkonsistenten Radialpotentiale $V_{\text{rad}}(r)$ können übernommen werden.

4.2 Bestimmung des Außenraumpotentials

Die zentrale Größe bei der Bestimmung des Potentials $V_{II}(\vec{r})$ ist die Ladungsdichte der ebenen Wellen im Außenraum, die sich als

$$\rho_{\text{PW}}(\vec{r}) = \rho_0 + \sum_{\vec{K} \neq 0} \rho_{\text{PW}}(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} \quad (4.6)$$

darstellt, mit ρ_0 als Mittelwert der Ladungsdichte der ebenen Wellen. Die Menge der \vec{K} -Vektoren, zu denen es Fourierkoeffizienten gibt, wird durch die Auswahl der ebenen Wellen der Ansatzfunktionen bestimmt und beinhaltet in unserem Fall etwa 50 Werte (siehe Abschnitt 4.3).

Faßt man alle Beiträge zum Außenraumpotentials zusammen, wie sie z.B. von *Bross* und *Eder* [9] angegeben wurden (siehe Anhang B), erhält man

$$V_{II}(\vec{r}) = 4\pi e^2 \sum_{\vec{K} \neq 0} \frac{\rho_{\text{PW}}(\vec{K})}{K^2} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} - 4\pi e^2 \rho_0 \sum_{\vec{K} \neq 0} \frac{1}{K^2} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} + \mu_{xc} [\rho_{\text{PW}}(\vec{r})] . \quad (4.7)$$

Der erste Term ist das Coulombpotential der ebenen Wellen. Der zweite Term ergibt das Potential eines Gitters positiver Punktladungen in einem kompensierenden Ladungshintergrund. Durch die sphärische Symmetrie des Innenraums wirkt dieser auf den Außenraum nämlich gerade wie eine Punktladung der Stärke $\rho_0 \cdot V_C$, mit V_C als Volumen der Elementarzelle.

Mit dem dritten Term, $\mu_{xc}[\rho(\vec{r})]$, werden Austausch- und Korrelationseffekte berücksichtigt, da das Vielteilchenproblem der Elektronen des Festkörpers als effektives Einteilchenproblem behandelt wird. Dies geschieht im Rahmen des lokalen Dichtefunktional-Formalismus nach *Hedin* und *Lundqvist* [17]; die Parameter wurden von *Gunnarson* und *Lundqvist* [15] angegeben.

Entsprechend gilt für den verzerrten Fall

$$V_{II}(\epsilon, \vec{r}) = 4\pi e^2 \sum_{\vec{K}\epsilon \neq 0} \frac{\rho_{PW}(\epsilon, \vec{K}\epsilon)}{K\epsilon^2} e^{i\vec{K}\epsilon \cdot \vec{r}} - 4\pi e^2 \rho_0(\epsilon) \sum_{\vec{K}\epsilon \neq 0} \frac{1}{K\epsilon^2} e^{i\vec{K}\epsilon \cdot \vec{r}} + \mu_{xc}[\rho_{PW}(\epsilon, \vec{r})] - \mathcal{E}_F(\epsilon). \quad (4.8)$$

Der Term $-\mathcal{E}_F(\epsilon)$ wird durch die Verzerrungsabhängigkeit der Fermienergie erforderlich, denn für verschieden stark verzerrte Kristalle erhält man aus den MAPW-Berechnungen leicht abweichende Fermienergien $\mathcal{E}_F(\epsilon)$.

Tatsächlich liegt jedoch *ein* Kristall mit verschieden stark verzerrten Bereichen vor, zwischen denen ein Elektronenaustausch stattfindet, bis sich ein Gleichgewicht einstellt. Die Fermienergie muß daher eine globale Größe des Kristalls sein. Da es auf ihren absoluten Wert nicht ankommt, darf man sie zu Null setzen. Dies erreicht man durch Subtraktion von $\mathcal{E}_F(\epsilon)$ in (4.8).

Durch die Endlichkeit der Fourierreihen der Ladungsdichte bereiten der erste und der dritte Term keine Schwierigkeiten.

Die Reihe $\sum_{\vec{K}\neq 0} \frac{1}{K^2} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$ des zweiten Terms erstreckt sich hingegen über das ganze reziproke Gitter und konvergiert so langsam, daß eine direkte Aufsummierung über eine große, endliche Zahl von \vec{K} -Vektoren keinen brauchbaren Näherungswert liefert. Diese Reihe wird daher nach dem Ewald-Verfahren [13, 16, 25, 14] ausgewertet. Mit dessen Hilfe erhält man

$$\sum_{\vec{K}\neq 0} \frac{1}{K^2} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{K}\neq 0} \frac{1}{K^2} e^{-\vec{K}^2 \eta} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} + \frac{V_C}{4\pi} \sum_{\vec{R}} \frac{1}{|\vec{r} + \vec{R}|} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{|\vec{r} + \vec{R}|}{2\sqrt{\eta}} \right) \right] - \eta. \quad (4.9)$$

Hierbei bewirkt der Parameter η , daß beide Reihen, die sich eigentlich über das ganze Gitter erstrecken, schnell konvergieren und deshalb problemlos numerisch auszuwerten

sind. V_C ist das Volumen der Elementarzelle und erf die Fehlerfunktion⁵.

Somit ist es möglich, aus den gegebenen Fourierkoeffizienten der Ladungsdichte das vollständige Potential im Außenraum zu konstruieren.

Um die Matrixelemente $\langle n'\vec{k}'|\Delta V|n\vec{k}\rangle$ der Blochzustände des unverzerrten Kristalls mit dem Störpotential der Versetzung auswerten zu können, sind nach Gleichung (2.20) die Terme $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$ des Deformationspotentials zu bestimmen, die über (2.27) (2.28) bzw. (2.32) (2.33) als Ableitungen von $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$ bzw. $V_{xz}(\epsilon, \vec{r})$ nach der Verzerrungsstärke ϵ definiert sind.

Bei den Deformationen $\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}$ und $\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}$ aus (2.21) handelt es sich um homogene, tetragonale Verzerrungen des Kristalls, bei $\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}}$ und $\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}}$ aus (2.29) um homogene, rhomboedrische Verzerrungen und bei $\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}$, $\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}$ und $\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}$ aus (2.24) bzw. (2.31) um starre Drehungen des unverzerrten Kristalls. Gemäß (2.22) und (2.30) kann jeweils eine tetragonale bzw. rhomboedrische Verzerrung durch eine kubische Symmetrioperation in die andere übergeführt werden.

Da auch im verzerrten Kristall das Potential innerhalb der APW-Kugel als sphärisch-symmetrisch angesehen wird, tritt der sehr erfreuliche Effekt ein, daß sowohl $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$, als auch $V_{xz}(\epsilon, \vec{r})$ und damit auch $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$ im Inneren der APW-Kugel verschwinden. Es gelten nämlich mit

$$\begin{aligned}
(2.22) & : \underline{\mathbf{d}}_{\text{II}} =: \underline{\mathbf{T}}_1 \underline{\mathbf{d}}_{\text{I}} \underline{\mathbf{T}}_1^{-1} \Rightarrow V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}, \underline{\mathbf{T}}_1^{-1} \vec{r}) \\
(2.30) & : \underline{\mathbf{d}}_{\text{V}} =: \underline{\mathbf{T}}_2 \underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}} \underline{\mathbf{T}}_2^{-1} \Rightarrow V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}}, \underline{\mathbf{T}}_2^{-1} \vec{r}) \\
(2.24) & : V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}^{-1} \vec{r}) \\
(2.31) & : V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}^{-1} \vec{r}) \\
(2.31) & : V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}, \vec{r}) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}^{-1} \vec{r}),
\end{aligned} \tag{4.10}$$

für den Innenraum wegen

$$|\underline{\mathbf{T}}_1^{-1} \vec{r}| = |\underline{\mathbf{T}}_2^{-1} \vec{r}| = |\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}^{-1} \vec{r}| = |\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}^{-1} \vec{r}| = |\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}^{-1} \vec{r}| = |\vec{r}| \quad \forall \vec{r} \tag{4.11}$$

⁵ $\text{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$

die Beziehungen

$$\begin{aligned}
V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}, \vec{r}) &= V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}, r) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}, \underline{\mathbf{T}}_1^{-1} \vec{r}) = V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}, r) \\
V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}}, \vec{r}) &= V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}}, r) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}}, \underline{\mathbf{T}}_2^{-1} \vec{r}) = V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}}, r) \\
V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}, \vec{r}) &= V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}, r) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}^{-1} \vec{r}) = V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{0}}, r) \\
V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}, \vec{r}) &= V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}, r) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}^{-1} \vec{r}) = V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{0}}, r) \\
V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}, \vec{r}) &= V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}, r) = V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}^{-1} \vec{r}) = V_{\text{rad}}(\underline{\mathbf{0}}, r).
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Durch die Definitionen (2.27) und (2.32) führt (4.12) dazu, daß $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$ und $V_{xz}(\epsilon, \vec{r})$ für $|\vec{r}| \leq R_{\text{APW}}$ identisch Null sind, daß also der Innenraum keinen Beitrag zu den Matrixelementen $\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle$ liefert.

Die weiteren Berechnungen betreffen daher allein den Außenraum.

Für die ersten drei Summanden aus (4.8) werden folgende Abkürzungen verwandt :

$$\begin{aligned}
\text{Coulombpotential} &: V_C(\epsilon, \vec{r}) := 4\pi e^2 \sum_{\vec{K}_\epsilon \neq 0} \frac{\rho_{\text{PW}}(\epsilon, \vec{K}_\epsilon)}{K_\epsilon^2} e^{i\vec{K}_\epsilon \cdot \vec{r}} \\
\text{Ewaldpotential} &: V_E(\epsilon, \vec{r}) := -4\pi e^2 \rho_0(\epsilon) \sum_{\vec{K}_\epsilon \neq 0} \frac{1}{K_\epsilon^2} e^{i\vec{K}_\epsilon \cdot \vec{r}} \\
\text{Austausch- und} & \\
\text{Korrelationspotential} &: V_{xc}(\epsilon, \vec{r}) := \mu_{xc} [\rho_{\text{PW}}(\epsilon, \vec{r})]
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Die Dichte $\rho_{\text{PW}}(\epsilon, \vec{r})$ erhält man durch Aufsummieren der Fourierreihe aus (4.6).

Das Außenraumpotential stellt sich somit als

$$V_{II}(\epsilon, \vec{r}) = V_C(\epsilon, \vec{r}) + V_E(\epsilon, \vec{r}) + V_{xc}(\epsilon, \vec{r}) - \mathcal{E}_F(\epsilon) \tag{4.14}$$

dar.

Da $\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}$ und $\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}$, bzw. $\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}}$ und $\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}}$ jeweils gleich stark sind, sich also nur in der Richtung der Verzerrung unterscheiden, und da die Drehungen $\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}$, $\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}$ und $\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}$ die Fermi-Energie nicht verändern, gilt

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_F(\underline{\mathbf{d}}_{\text{I}}) &= \mathcal{E}_F(\underline{\mathbf{d}}_{\text{II}}) \quad , \quad \mathcal{E}_F(\underline{\mathbf{d}}_{\text{IV}}) = \mathcal{E}_F(\underline{\mathbf{d}}_{\text{V}}) , \\
\mathcal{E}_F(\underline{\mathbf{d}}_{\text{III}}) &= \mathcal{E}_F(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VI}}) = \mathcal{E}_F(\underline{\mathbf{d}}_{\text{VII}}) = \mathcal{E}_F(\underline{\mathbf{0}}) ,
\end{aligned} \tag{4.15}$$

wodurch die Fermi-Energien in $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$ und $V_{xz}(\epsilon, \vec{r})$ verschwinden.

Das Potential des unverzerrten Kristalls $V_{\text{hom}}(\underline{\mathbf{0}}, \vec{r})$ hängt nicht von ϵ ab und darf daher zur Bestimmung von $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$ ebenfalls entfallen.

Zusammenfassend erhält man

$$V_{xx}(\epsilon, \vec{r}) = \frac{1}{3} \left[\left(V_C(\underline{\mathbf{d}}_I, \vec{r}) + V_E(\underline{\mathbf{d}}_I, \vec{r}) + V_{xc}(\underline{\mathbf{d}}_I, \vec{r}) \right) - \left(V_C(\underline{\mathbf{d}}_I, \underline{\mathbf{T}}_1^{-1}\vec{r}) + V_E(\underline{\mathbf{d}}_I, \underline{\mathbf{T}}_1^{-1}\vec{r}) + V_{xc}(\underline{\mathbf{d}}_I, \underline{\mathbf{T}}_1^{-1}\vec{r}) \right) \right] + \left(V_C(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{III}^{-1}\vec{r}) + V_E(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{III}^{-1}\vec{r}) + V_{xc}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{III}^{-1}\vec{r}) \right), \quad (4.16)$$

$$V_{xz}(\epsilon, \vec{r}) = \frac{1}{2} \left[\left(V_C(\underline{\mathbf{d}}_{IV}, \vec{r}) + V_E(\underline{\mathbf{d}}_{IV}, \vec{r}) + V_{xc}(\underline{\mathbf{d}}_{IV}, \vec{r}) \right) - \left(V_C(\underline{\mathbf{d}}_{IV}, \underline{\mathbf{T}}_2^{-1}\vec{r}) + V_E(\underline{\mathbf{d}}_{IV}, \underline{\mathbf{T}}_2^{-1}\vec{r}) + V_{xc}(\underline{\mathbf{d}}_{IV}, \underline{\mathbf{T}}_2^{-1}\vec{r}) \right) \right] + \left[\left(V_C(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{VI}^{-1}\vec{r}) + V_E(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{VI}^{-1}\vec{r}) + V_{xc}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{VI}^{-1}\vec{r}) \right) + \left(V_C(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{VII}^{-1}\vec{r}) + V_E(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{VII}^{-1}\vec{r}) + V_{xc}(\underline{\mathbf{0}}, \underline{\mathbf{d}}_{VII}^{-1}\vec{r}) \right) \right]. \quad (4.17)$$

Die Ableitungen dieser Größen nach ϵ ergeben die Terme $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$, die zur Berechnung der Matrixelemente $\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle$ benötigt werden.

Der größte Anteil dieser Ableitungen stammt von den Ewaldpotentialen. Der Beitrag der Coulombpotentiale ist deutlich geringer. Da das Austausch- und Korrelationsfunktional nur wenig mit der Dichte variiert, ist sein Beitrag noch kleiner.

Wertet man (4.16) und (4.17) für verschiedene Verzerrungsstärken aus, kann der Fall eintreten, daß der Punkt \vec{r} zwar in der unverzerrten Wigner-Seitz-Zelle $C(\vec{R}=0)$ liegt, sich im verzerrten Gitter jedoch schon in einer benachbarten Zelle befindet.

Da aber alle drei Potentialanteile von (4.14) aus Fourierreihen über das verzerrte, reziproke Gitter gewonnen werden (siehe (4.13)), haben sie das korrekte Translationsverhalten

$$V_{II}(\epsilon, \vec{r}) = V_{II}(\epsilon, \vec{r} + \vec{R}\epsilon) \quad \forall \vec{r} \quad \forall \vec{R}\epsilon, \quad (4.18)$$

so daß dadurch keine Probleme entstehen.

4.3 Wahl von QMAXSQ

Bei der Berechnung der Ableitungen $\partial V_{xx}(\epsilon, \vec{r})/\partial\epsilon$ und $\partial V_{xz}(\epsilon, \vec{r})/\partial\epsilon$ traten überraschende Schwierigkeiten auf, die zeigten, daß die Wahl von QMAXSQ⁶, bzw. die Auswahl der \vec{K} -Vektoren, die in den Ansatz (4.1) eingehen, von großer Bedeutung für die Bestimmung des Deformationspotentials ist.

⁶ Die Bezeichnung QMAXSQ entstammt den FORTRAN-Programmen, mit denen die MAPW-Rechnungen durchgeführt wurden.

Schindler [25] berechnete die Ableitungen mit einem symmetrischen Differenzenquotienten gemäß

$$\left. \frac{\partial V(\epsilon, \vec{r})}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon = 0} \approx \frac{1}{2\epsilon} [V(\epsilon, \vec{r}) - V(-\epsilon, \vec{r})] \quad \text{mit } \epsilon = 0.01. \quad (4.19)$$

Für diese Arbeit wurde stattdessen von selbstkonsistenten Ein-Teilchen-Potentialen zu $\epsilon \in \{0; \pm 1; \pm 2; \pm 4\} \cdot 10^{-2}$ ausgegangen und als Wert der Ableitung $\partial V(\epsilon, \vec{r})/\partial \epsilon$ an der Stelle \vec{r} die Ableitung der Ausgleichsparabel durch die sieben Werte $V(\epsilon, \vec{r})$ eingesetzt. In diesem Bereich der ϵ -Werte sind die Verzerrungen noch nicht zu groß, um linearisiert zu werden, andererseits sind die hervorgerufenen Potentialänderungen schon so deutlich, daß keine Stellenauslöschung zu befürchten ist.

Das Verfahren scheiterte jedoch daran, daß der Verlauf der sieben Werte $V(\epsilon, \vec{r})$ in jedem \vec{r} -Punkt äußerst unstetig war, so daß der Ableitung der Ausgleichsparabel keinerlei Aussagekraft beigemessen werden konnte.

Da *Schindler* nur zwei Potentiale ($\epsilon = \pm 0.01$) verglich, mußte ihm dieses Problem verborgen bleiben.

Als eine mögliche Ursache der Unstetigkeiten kam die Wahl des APW-Radius in Betracht. Bei dem neuen Satz selbstkonsistenter Potentiale wurden daher nicht nur die Verzerrungen deutlich kleiner gewählt ($\epsilon \in \{0; \pm 2; \pm 5; \pm 10; \pm 20\} \cdot 10^{-4}$), sondern überdies der APW-Radius für alle Verzerrungen konstant gelassen (siehe Anhang A).

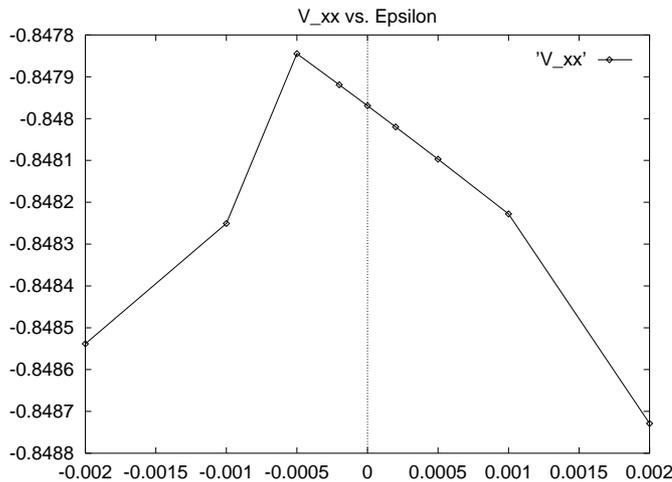


Abb. 4.1: Verlauf von $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$ zu festem \vec{r} und variiertem ϵ :

Für alle Orte \vec{r} erhält man qualitativ das gleiche, unstetige Verhalten.

Auch mit diesem neuen Satz selbstkonsistenter Potentiale waren Größen wie z.B. $V_{II}(\epsilon, \vec{r})$ und $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$ bzw. $V_{xz}(\epsilon, \vec{r})$ bei festgehaltenem \vec{r} als Funktion von ϵ so unstetig, daß die Ableitung $\partial/\partial \epsilon$ nicht approximiert werden konnte.

Wie in Abbildung 4.1 zu sehen, gibt es jedoch einen relativ kleinen Bereich ($\epsilon \in [-5 \cdot 10^{-4}, 10 \cdot 10^{-4}]$), in welchem der Verlauf stetig ist.

Es zeigt sich, daß genau für diesen Bereich keine „Sprünge“ in der Menge der \vec{K}_ϵ -Vektoren eintreten, für die es Fourierkoeffizienten $\rho_{\text{PW}}(\vec{K}_\epsilon)$ der Ladungsdichte gibt.

Daß solche „Sprünge“ eintreten können erkennt man, wenn man von der Auswahl der ebenen Wellen im Ansatz (4.1)

$$\vec{K} \in \{ \vec{K} \mid (\vec{k} + \vec{K})^2 \leq \text{QMAXSQ} \cdot \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \} \quad (4.20)$$

ausgeht und dazu den verzerrten Fall

$$\vec{K}_\epsilon \in \{ \vec{K}_\epsilon \mid (\vec{k}_\epsilon + \vec{K}_\epsilon)^2 \leq \text{QMAXSQ} \cdot \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \} \quad (4.21)$$

betrachtet. Dabei kann es passieren, daß sich zwar der Vektor \vec{K} in der „unverzerrten“ Menge (4.20) befindet, der zugehörige Vektor \vec{K}_ϵ aber nicht zugleich in der „verzerrten“ Menge (4.21) liegt – oder umgekehrt.

Dadurch kann sich die Menge der Fourierkoeffizienten der Ladungsdichte der ebenen Wellen ändern. Solche „Unstetigkeiten“ bewirken geringe sprunghafte Veränderungen im selbstkonsistenten Potential. Da aber die kleinen Verzerrungsstärken selbst auch nur geringe Potentialänderungen verursachen, überlagern sich zwei Effekte, die von gleicher Größenordnung sind.

Die „Sprünge“ im Ansatzraum lassen sich vermeiden, wenn man die Auswahl der \vec{K} -Vektoren zu $\epsilon = 0$ trifft und diese Wahl, im Gegensatz zu Gleichung (4.21), auch für $\epsilon \neq 0$ beibehält, d.h. die reziproken Gittervektoren nur noch passend verzerrt: $\vec{K} \mapsto \vec{K}_\epsilon$.

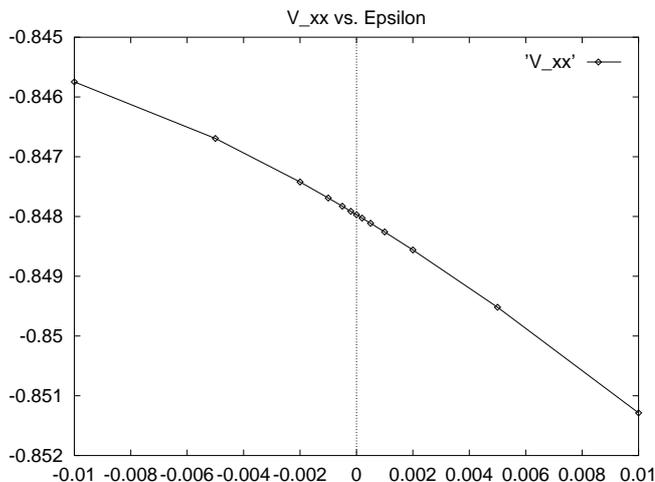


Abb. 4.2: Verlauf von $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$ zu festem \vec{r} und variiertem ϵ :

Im Gegensatz zu Abb. 4.1 wurden Sprünge in der Wahl der \vec{K} -Vektoren ausgeschlossen.

Man erhält für den ganzen Außenraum stetiges Verhalten über den relativ großen ϵ -Bereich von $\pm 1\%$.

Die betrachteten Größen $V_{xx}(\epsilon, \vec{r})$ bzw. $V_{xz}(\epsilon, \vec{r})$ verhalten sich dann für Verzerrungen bis zu $\epsilon = \pm 1\%$ (und darüber hinaus) stetig.

Um Potentiale zu erhalten, aus denen das Deformationspotential $\tilde{W}(\vec{r})$ berechnet werden kann, ist daher darauf zu achten, daß sich die Zahl der Fourierkoeffizienten der Ladungsdichte über den ganzen ϵ -Bereich nicht verändert.

Diese Forderung läßt sich auf drei verschiedene Arten realisieren :

1. Man wähle den ϵ -Bereich klein genug (entspr. Abb. 4.1).
2. Man wähle einen geeigneten, günstigen Wert für QMAXSQ.
3. Man behalte die Auswahl der $\{\vec{K}_\epsilon\}$ zu $\epsilon=0$ auch für $\epsilon \neq 0$ bei und verzerre lediglich die \vec{K} -Vektoren (entspr. Abb. 4.2).

Es zeigte sich, daß ein ungünstig gewähltes QMAXSQ den ϵ -Bereich soweit einschränken kann, daß Methode 1 zu verwerfen ist.

Die endgültigen Ein-Teilchen-Potential, die in dieser Arbeit verwendet wurden, wurden nach Methode 3 berechnet.

4.4 Auswertung der Integrale über den Außenraum

Nach Gleichung (2.18) und (2.20) sind zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten die Matrixelemente $\langle n' \vec{k}' | W_{xx}(\vec{r}) | n \vec{k} \rangle$ und $\langle n' \vec{k}' | W_{xz}(\vec{r}) | n \vec{k} \rangle$ auszuwerten.

Da, wie gezeigt, sowohl $W_{xx}(\vec{r})$ als auch $W_{xz}(\vec{r})$ im Innenraum der APW-Kugel verschwinden, reduzieren sich die Integrale über die Wigner-Seitz-Zelle WSZ auf Integrale über den Außenraum II.

Nach dem Ansatz (4.1) gilt dort $\chi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = 0$, es wirkt daher nur der Anteil der ebenen Wellen.

Man erhält

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{k}' | W_{xx}(\vec{r}) | n \vec{k} \rangle &= \int_{\text{WSZ}} \psi_{n'\vec{k}'}^*(\vec{r}) W_{xx}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) d^3r \\ &= \int_{\text{II}} \psi_{n'\vec{k}'}^*(\vec{r}) W_{xx}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) d^3r \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned}
(4.1) \Rightarrow &= \sum_{\vec{K}'} \sum_{\vec{K}} v^*(n'\vec{k}', \vec{K}') v(n\vec{k}, \vec{K}) \int_{\Pi} e^{i(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{K}-\vec{K}')\cdot\vec{r}} W_{xx}(\vec{r}) d^3r \\
&= \sum_{\vec{K}} \sum_{\vec{K}''} v^*(n'\vec{k}', \vec{K}-\vec{K}'') v(n\vec{k}, \vec{K}) \int_{\Pi} e^{i(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{K}'')\cdot\vec{r}} W_{xx}(\vec{r}) d^3r
\end{aligned}$$

und $\langle n'\vec{k}' | W_{xz}(\vec{r}) | n\vec{k} \rangle$ analog.

In der letzten Gleichungszeile wurde von der Tatsache Gebrauch gemacht, daß die Integrale nur von $\vec{K}-\vec{K}'$ abhängen, was die Zahl der auszuwertenden Integrale deutlich verringert.

Da der Integrand punktweise im Ortsraum und nicht als Fourierreihe gegeben ist, wird im Gegensatz zu den Arbeiten von *Häberlen* [16] und *Schindler* [25] das Außenraumintegral nicht als $\int_{\Pi} \dots = \int_{\text{WSZ}} \dots - \int_{\text{I}} \dots$ behandelt.

Dieses Verfahren würde auf Integrale der Form $\int_{\text{WSZ}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r$ und $\int_{\text{I}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r$ führen, die sich analytisch auswerten lassen [8].

Stattdessen transformiert man $\int_{\Pi} \dots$ in Kugelkoordinaten. Das radiale Teilintegral wird durch eine Spline-Interpolation ausgewertet, das verbleibende Integral über den Raumwinkel wird mit Hilfe ausgezeichneter Richtungen approximiert.

4.4.1 Symmetrie von $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$

Zur Anwendung der ausgezeichneten Richtungen ist es erforderlich, die Symmetrie des Integranden zu kennen.

Man findet für $\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

$$W_{xx}(\alpha\vec{r}) = \begin{cases} W_{xx}(\vec{r}) & \text{für } \alpha\vec{r} \in \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} \right\} \\ -W_{xx}(\vec{r}) & \text{für } \alpha\vec{r} \in \left\{ \begin{pmatrix} y \\ x \\ z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} y \\ x \\ -z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -y \\ -x \\ -z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -y \\ -x \\ z \end{pmatrix} \right\} \end{cases} \quad (4.23)$$

und

$$W_{xz}(\alpha\vec{r}) = \begin{cases} W_{xz}(\vec{r}) & \text{für } \alpha\vec{r} \in \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \right\} \\ -W_{xz}(\vec{r}) & \text{für } \alpha\vec{r} \in \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} \right\} \end{cases}. \quad (4.24)$$

Insbesondere sind $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$ gerade Funktionen in \vec{r} , d.h. es gilt

$$W_{xx}(\vec{r}) = W_{xx}(-\vec{r}) \quad \text{und} \quad W_{xz}(\vec{r}) = W_{xz}(-\vec{r}) \quad \forall \vec{r}. \quad (4.25)$$

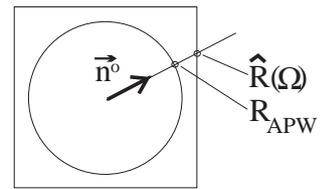
4.4.2 Methode der ausgezeichneten Richtungen

Das Außenraumintegral in (4.22) läßt sich zu

$$\begin{aligned} \int_{II} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} W(\vec{r}) d^3r &= \int_{4\pi} d\Omega \int_{R_{APW}}^{\hat{R}(\Omega)} r^2 \exp(i\vec{p}\cdot\vec{n}^o r) W(\vec{n}^o r) dr \\ &= \int_{4\pi} d\Omega F(\Omega) \\ \text{mit } F(\Omega) &:= \int_{R_{APW}}^{\hat{R}(\Omega)} r^2 \exp(i\vec{p}\cdot\vec{n}^o r) W(\vec{n}^o r) dr \end{aligned} \quad (4.26)$$

umformen.

Dabei ist $\vec{p} = \vec{k} - \vec{k}' + \vec{K} - \vec{K}'$, $\vec{n}^o(\Omega)$ der Einheitsvektor in Richtung Ω und $\hat{R}(\Omega)$ der Abstand vom Mittelpunkt der Wigner-Seitz-Zelle zum Durchstoßpunkt der Richtung \vec{n}^o mit ihrer Oberfläche.



Für die Symmetrioperationen $\{\alpha\}$, unter denen $W_{xx}(\vec{r})$ bzw. $W_{xz}(\vec{r})$ invariant sind, gilt

$$\int_{II} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} W(\vec{r}) d^3r = \int_{IRR} \sum_{\alpha} e^{i\vec{p}\cdot\alpha\vec{r}} W(\alpha\vec{r}) d^3r = \int_{IRR} W(\vec{r}) \sum_{\alpha} e^{i\alpha^{-1}\vec{p}\cdot\vec{r}} d^3r, \quad (4.27)$$

worin IRR den zur Symmetriegruppe der $\{\alpha\}$ gehörigen, irreduziblen Keil bezeichnet und sich die Summe $\sum_{\alpha} e^{i\alpha^{-1}\vec{p}\cdot\vec{r}}$ als symmetrisierte Linearkombination ebener Wellen auffassen läßt.

Dem irreduziblen Keil IRR kann ein irreduzibler Raumwinkelbereich Ω_{IRR} zugeordnet werden. Somit erhält man aus Gleichung (4.26)

$$\int_{II} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} W(\vec{r}) d^3r = \int_{\Omega_{\text{IRR}}} \hat{F}(\Omega) d\Omega$$

mit $\hat{F}(\Omega) := \int_{R_{\text{APW}}}^{\hat{R}(\Omega)} W(\vec{n}^\circ r) \left[\sum_{\alpha} e^{i\alpha^{-1}\vec{p}\cdot\vec{r}} \right] r^2 dr .$

(4.28)

Da die Inversion in beiden zu betrachtenden Symmetriegruppen (siehe Abschnitt 4.4.1) enthalten ist, gilt weiter

$$\hat{F}(\Omega) = 2 \int_{R_{\text{APW}}}^{\hat{R}(\Omega)} W(\vec{n}^\circ r) \left[\sum'_{\alpha} \cos(i\alpha^{-1}\vec{p}\cdot\vec{r}) \right] r^2 dr ,$$
(4.29)

wobei \sum'_{α} aussagt, daß nur über die Symmetrioperationen summiert wird, die nicht durch eine Inversion auseinander hervorgehen.

Sei s die Zahl der Symmetrioperationen der Gruppe der $\{\alpha\}$ (einschließlich der Inversion)⁷, so kann man das Raumwinkelintegral aus (4.28) durch eine gewichtete Summe über N Stützstellen $\Omega_i \in \Omega_{\text{IRR}}$ approximieren und erhält

$$\int_{\Omega_{\text{IRR}}} \hat{F}(\Omega) d\Omega \approx \frac{4\pi}{s} \sum_{i=1}^N g_i \hat{F}(\Omega_i) .$$
(4.30)

Die Summe der Gewichte legt man mit $\sum_{i=1}^N g_i \stackrel{!}{=} 1$ fest.

Um zu einer gegebenen Anzahl N die Richtungen Ω_i und Gewichte g_i optimal zu wählen, müßten die Bedingungen

$$\sum_{i=1}^N g_i K_n(\Omega_i) \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall n = 2, \dots, 3N$$
(4.31)

erfüllt sein, mit den gitter-harmonischen Funktionen $K_n(\Omega)$ zur jeweiligen Symmetrie der Funktion $\hat{F}(\Omega)$, d.h. falls $\hat{F}(\Omega)$ kubische Symmetrie besäße, wäre (4.31) für die kubischen Harmonischen K_2, \dots, K_{3N} zu erfüllen [7]. Die Anzahl $3N$ ergibt sich aus der Tatsache,

⁷ Für $F_{xx}(\Omega)$ ist $s = 4$, für $F_{xz}(\Omega)$ gilt $s = 2$ (siehe Abschnitt 4.4.1).

daß für jede der N Richtungen die drei Parameter $g_i, (\vartheta_i, \varphi_i)$ frei wählbar sind. Für $N > 1$ sind solche Richtungssätze nicht gefunden worden.

Man kann aber gute Näherungen erhalten, wenn man die Forderungen (4.31) für möglichst viele n erfüllt.

Der große Rechenaufwand einer solchen Richtungssuche verhinderte für die vorliegenden $\hat{F}_{xx}(\Omega)$ und $\hat{F}_{xz}(\Omega)$ die Bestimmung eines eigenen Richtungssatzes zur entsprechenden Symmetrie. Stattdessen wurde auf einen, von *Bross* [7] angegebenen, kubischen 12-Richtungssatz zurückgegriffen.

Durch geeignete kubische Symmetrieoperationen wurde die Zahl der Richtungen vergrößert, bis die Winkelbereiche Ω_{IRR} zu $\hat{F}_{xx}(\Omega)$ und $\hat{F}_{xz}(\Omega)$ ausgefüllt waren. Die Gewichte g_i verringerten sich dabei um einen Faktor $\frac{5}{48}$. Auf diese Weise entstanden für $\hat{F}_{xx}(\Omega)$ ein 144-Richtungssatz und für $\hat{F}_{xz}(\Omega)$ ein 288-Richtungssatz.

4.4.3 Auswertung der radialen Integrale

Nach Gleichung (4.29) sind die radialen Integrale

$$\hat{F}(\Omega) = \int_{R_{\text{APW}}}^{\hat{R}(\Omega)} r^2 W(\vec{n}^o r) \cos(\vec{p} \cdot \vec{n}^o r) dr \quad (4.32)$$

auszuwerten. Benutzt man die Reihendarstellung

$$\cos x = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} \quad (4.33)$$

der Cosinus-Funktion, läßt sich (4.32) zu

$$\hat{F}(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\vec{p} \cdot \vec{n}^o)^{2n}}{(2n)!} \int_{R_{\text{APW}}}^{\hat{R}(\Omega)} W(\vec{n}^o r) r^{2n+2} dr \quad (4.34)$$

umschreiben. Mit der Definition der „radialen Momente“

$$M_n(\Omega) := \int_{R_{\text{APW}}}^{\hat{R}(\Omega)} W(\vec{n}^o r) r^{2n+2} dr \quad (4.35)$$

erhält man

$$\hat{F}(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\vec{p} \cdot \vec{n}^o)^{2n}}{(2n)!} M_n(\Omega) . \quad (4.36)$$

Die Cosinus-Reihe (4.33) für größere Argumente⁸ numerisch auszuwerten ist jedoch ungünstig, da die Summanden sehr groß werden und dadurch Stellenauslöschung eintritt. Man entwickelt deshalb $\cos(\vec{p} \cdot \vec{n}^o r)$ nicht um $r = 0$, sondern um den Mittelpunkt

$$\bar{R}(\Omega) := \frac{1}{2} (\hat{R}(\Omega) + R_{\text{APW}}) \quad \Rightarrow \quad r' := r - \bar{R}(\Omega), \quad (4.37)$$

wodurch die Cosinus-Reihe gemäß

$$\begin{aligned} \cos(\vec{p} \cdot \vec{n}^o r) &= \cos(\vec{p} \cdot \vec{n}^o (r' + \bar{R})) \\ &= \cos(\vec{p} \cdot \vec{n}^o \bar{R}) \cdot \cos(\vec{p} \cdot \vec{n}^o r') - \sin(\vec{p} \cdot \vec{n}^o \bar{R}) \cdot \sin(\vec{p} \cdot \vec{n}^o r') \end{aligned} \quad (4.38)$$

in zwei numerisch unproblematische Reihen zerfällt.

Die auftretenden Integrale

$$\int_{R_{\text{APW}} - \bar{R}(\Omega)}^{\hat{R}(\Omega) - \bar{R}(\Omega)} W(\vec{n}^o (r' + \bar{R}(\Omega))) (r' + \bar{R}(\Omega))^2 r'^m dr' \quad \text{für } m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.39)$$

werden dadurch ausgewertet, daß man die Funktion $W(\vec{n}^o (r' + \bar{R}(\Omega))) \cdot (r' + \bar{R}(\Omega))^2$ bezüglich r' auf einem äquidistanten Raster zwischen R_{APW} und $\hat{R}(\Omega)$ mit kubischen Splines interpoliert. Diese Darstellung erlaubt es, die Integrale (4.39) analytisch zu lösen.

Das Verfahren legt auch die Punkte \vec{r} fest, für welche die Funktionen $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$ auszuwerten sind, nämlich für jede der ausgezeichneten Richtungen Ω_i auf N_i Punkten zwischen $\vec{n}_i^o \cdot R_{\text{APW}}$ und $\vec{n}_i^o \cdot \hat{R}(\Omega_i)$.

Dabei liegt der erste Punkt auf der APW-Kugel und der letzte Punkt auf der Oberfläche der Wigner-Seitz-Zelle. Da die Länge $\hat{R}(\Omega_i) - R_{\text{APW}}$ stark variiert, wurde die Zahl der Stützstellen N_i richtungsabhängig gewählt, so daß der Abstand zweier aufeinanderfolgender Punkte für alle Richtungen etwa gleich ist. Mit maximal 100 Stützstellen pro Richtung kann man die radialen Momente auf etwa 4 Dezimalstellen berechnen.

⁸ In unserem Fall bis zu $\vec{p} \cdot \vec{r} \approx 8$

4.5 Behandlung der Gittersummen über das Verzerrungsfeld

Die Behandlung der Gittersummen, wie sie hier beschrieben wird, folgt weitgehend der Arbeit von *Häberlen* [16].

In Gleichung (2.20) treten die Summen

$$S_{xx}(\vec{q}) := \sum_{\vec{R}} \epsilon_{xx}(\vec{R}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \quad \text{und} \quad S_{xz}(\vec{q}) := \sum_{\vec{R}} \epsilon_{xz}(\vec{R}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \quad (4.40)$$

auf, die sich jeweils über das ganze, unverzerrte Kristallgitter erstrecken.

Mit $\epsilon_{xx}(\vec{R})$ und $\epsilon_{xz}(\vec{R})$ aus (2.13) erhält man für diese Summen die Darstellung

$$\begin{aligned} S_{xx}(\vec{q}) &= \frac{b}{2\pi} \sum_{\vec{R}} \frac{z}{(x+y)^2 + 2z^2} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}}, \\ S_{xz}(\vec{q}) &= -\frac{b}{4\pi} \sum_{\vec{R}} \frac{(x+y)}{(x+y)^2 + 2z^2} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \quad \text{mit} \quad \vec{R} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Das weitere Vorgehen wird am Beispiel von $S_{xx}(\vec{q})$ erläutert; mit $S_{xz}(\vec{q})$ verfährt man analog.

Das bisher verwendete „kubische“ Koordinatensystem (siehe (2.7)) erweist sich im folgenden als ungünstig. Man führt daher ein „versetzungsbezogenes“ Koordinatensystem mit den Basisvektoren

$$\begin{aligned} \vec{d}_1 &:= \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{d}_2 := a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \\ \vec{d}_1 \cdot (\vec{d}_2 \times \vec{d}_3) &\stackrel{!}{=} V_C = \frac{a^3}{4} \quad \Rightarrow \quad \vec{d}_3 := \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.42)$$

ein, mit denen sich der Gittervektor \vec{R} als

$$\vec{R} = n_1 \vec{d}_1 + n_2 \vec{d}_2 + n_3 \vec{d}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} n_1 + n_3 \\ n_1 \\ 2n_2 + n_3 \end{pmatrix}, \quad (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3 \quad (4.43)$$

und $\epsilon_{xx}(\vec{R})$ als

$$\epsilon_{xx}(\vec{R}) \rightarrow \epsilon_{xx}(n_1, n_2, n_3) = \frac{b}{2\pi} \frac{2}{a} \frac{2n_2 + n_3}{(2n_1 + n_3)^2 + 2(2n_2 + n_3)^2} \quad (4.44)$$

darstellen lassen. Die Summe

$$S_{xx}(\vec{q}) = \frac{b}{2\pi} \frac{2}{a} \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{2n_2 + n_3}{(2n_1 + n_3)^2 + 2(2n_2 + n_3)^2} \exp(i\vec{q} \cdot (n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3)) \quad (4.45)$$

kann mit

$$\begin{aligned} n'_1 &:= n_1 + n'_3 & (n'_1, n'_2, n'_3) &\in \mathbb{Z}^3 \\ n'_2 &:= n_2 + n'_3 & n &\in \{0; 1\} \\ 2n'_3 + \nu &:= n_3 & \leftarrow & \text{(Diese Zerlegung ist eindeutig)} \end{aligned} \quad (4.46)$$

als

$$\begin{aligned} S_{xx}(\vec{q}) &= \frac{b}{2\pi} \frac{2}{a} \sum_{n'_1, n'_2} \sum_{\nu=0}^1 \frac{2n'_2 + \nu}{(2n'_1 + \nu)^2 + 2(2n'_2 + \nu)^2} \exp(i\vec{q} \cdot (n'_1\vec{a}_1 + n'_2\vec{a}_2)) \cdot \\ &\quad \exp(i\vec{q} \cdot \vec{a}_3 \nu) \sum_{n'_3} \exp(i\vec{q} \cdot (2\vec{a}_3 - \vec{a}_1 - \vec{a}_2) n'_3) \end{aligned} \quad (4.47)$$

geschrieben werden.

Dabei ergibt $2\vec{a}_3 - \vec{a}_1 - \vec{a}_2$ gerade den Burgersvektor \vec{b} (siehe (2.8)).

4.5.1 Summe parallel zur Versetzungslinie

Da sich das Verzerrungsfeld parallel zur Versetzungslinie nicht ändert, hängt $\epsilon_{xx}(\vec{R})$ nicht von n'_3 ab⁹. Dem letzten Faktor von (4.47) erwächst daraus entscheidende Bedeutung für den Streumechanismus.

Geht man von periodischen Randbedingungen aus, kann man der Schraubenversetzung eine Länge $L = N \cdot b$ zuordnen. Mit dieser ergibt sich für die Summe über $n := n'_3$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} n} = \frac{L}{b} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta_{\vec{q} \cdot \vec{b}, 2\pi j} \quad (\text{Kronecker-}\delta). \quad (4.48)$$

Streuung kann daher nur stattfinden, wenn die Änderung $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ des Quasiimpulses in Richtung der Versetzungslinie der entsprechenden Komponente eines reziproken Gittervektors \vec{K} entspricht¹⁰. Somit tritt Streuung nur zwischen Ebenen des \vec{k} -Raums mit $\vec{k} \cdot \vec{b} = \pi \cdot (k_x - k_y) = \text{const.}$ auf, und nur dann, wenn sich die Konstanten $\vec{k} \cdot \vec{b}$ und $\vec{k}' \cdot \vec{b}$ um ein ganzzahliges Vielfaches von 2π unterscheiden.

⁹ Eine Änderung von n'_3 um ± 1 verschiebt \vec{R} parallel zur Versetzungslinie um die Strecke $|\vec{b}| = b$.

¹⁰ Für alle reziproken Gittervektoren \vec{K} gilt $\vec{K} \cdot \vec{b} \in 2\pi \cdot \mathbb{Z}$.

Wie in Abschnitt 3 gezeigt, brauchen für die Streuung nur die Zustände auf der Fermifläche betrachtet zu werden. Sucht man den Wertebereich der Konstanten $\vec{k} \cdot \vec{b}$, so findet man mit Hilfe des MAPW-Verfahrens den Durchstoßpunkt der $[1, -1, 0]$ -Richtung mit der Fermifläche bei $\vec{k}_{\max} \approx 0.5165 \cdot (1, -1, 0) \cdot 2\pi/a$, was zu $\vec{k}_{\max} \cdot \vec{b} \approx 1.033\pi$ führt. Daraus folgt, daß für den größten Teil der Fermifläche die Streuung nur innerhalb einer Ebene stattfindet, die \vec{k} -Komponente in Versetzungsrichtung also konstant bleibt, und nur für den kleinen Bereich mit $|\vec{k} \cdot \vec{b}| \approx \pi$ auch Änderungen dieser Komponente um $\pm 1 \cdot \pi$ möglich sind.

Derartige Übergänge, bei denen sich der \vec{k} -Vektor um die Komponente eines reziproken Gittervektors $\vec{K} \neq 0$ ändert, werden *Umklapp-Prozesse* genannt [18].

Die Eigenschaft, daß die Streuung „ebenenweise“ erfolgt, wird bei der Lösung der Transportgleichung zu beachten sein.

Um die Integration über das Quadrat einer Deltadistribution zu vermeiden, erweist es sich als günstig, die Quadrierung von (4.48) schon im endlichen Fall vorzunehmen und erst danach $\lim N \rightarrow \infty$ auszuführen, da in die Transportgleichung nur die Absolutquadrate der Matrixelemente $\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle$ eingehen (siehe (3.4)). Man erhält

$$\left| \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} n} \right|^2 \Rightarrow \left(\frac{L}{b} \right)^2 \left| \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta_{\vec{q} \cdot \vec{b}, 2\pi j} \right|^2 = \left(\frac{L}{b} \right)^2 \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta_{\vec{q} \cdot \vec{b}, 2\pi j}. \quad (4.49)$$

Der Grenzübergang $\lim N \rightarrow \infty$ überführt das diskrete Kronecker- δ mittels

$$\delta_{\vec{q} \cdot \vec{b}, 2\pi j} \rightarrow \frac{2\pi b}{L} \delta(\vec{q} \cdot \vec{b} - 2\pi j) \quad (4.50)$$

in ein kontinuierliches Dirac- δ , was

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \left| \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} n} \right|^2 &= \left(\frac{L}{b} \right)^2 \frac{2\pi b}{L} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta(\vec{q} \cdot \vec{b} - 2\pi j) \\ &= 2\pi \frac{L}{b} \frac{1}{b} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta\left([(k_x - k'_x)/\sqrt{2} - (k_y - k'_y)/\sqrt{2}] - \frac{2\pi}{b} j \right) \end{aligned} \quad (4.51)$$

zur Folge hat.

4.5.2 Summen senkrecht zur Versetzungslinie

Nach (4.47) sind senkrecht zur Versetzungslinie die Summen

$$\sum_{n'_1, n'_2} \frac{2n'_2 + \nu}{(2n'_1 + \nu)^2 + 2(2n'_2 + \nu)^2} \exp(i\vec{q} \cdot (n'_1 \vec{a}_1 + n'_2 \vec{a}_2)) \quad \text{für } \nu \in \{0; 1\} \quad (4.52)$$

auszuwerten. Diese Summen sind jedoch divergent.

Andererseits ist es unrealistisch, den Einflußbereich einer Schraubenversetzung auf den ganzen Kristall auszudehnen. Man ordnet stattdessen jeder Schraubenversetzung einen Zylinder der (unendlichen) Länge L und der Querschnittsfläche $A_0 = \pi R_{\text{cut}}^2$ zu und denkt sich den ganzen Kristall vollständig mit solchen Zylindern aufgefüllt. Auf diese Weise definiert man eine Versetzungsdichte $n_{\text{disl}} := 1/A_0$, welche die Anzahl der Schraubenversetzungen angibt, die pro Fläche aus dem Kristall austreten¹¹.

Der Abschneideradius R_{cut} begrenzt die Summation in (4.52) und kann durch einen Faktor

$$\exp(-\vec{R}_{\perp}^2/R_{\text{cut}}^2) = \exp(-\lambda \vec{R}_{\perp}^2) \quad \text{mit } \lambda := \pi \cdot n_{\text{disl}} = \frac{1}{R_{\text{cut}}^2} \quad (4.53)$$

verwirklicht werden, mit dem die Summen in (4.52) zu multiplizieren sind.

Dabei gibt $|\vec{R}_{\perp}|$ den Abstand der Punktes \vec{R} von der Versetzungslinie an, weswegen

$$\vec{R}_{\perp}^2 = \left| (n'_1 + \nu) \vec{a}_1 + (n'_2 + \nu) \vec{a}_2 \right|^2 = \frac{a^2}{2} \left[(n'_1 + \nu)^2 + 2(n'_2 + \nu)^2 \right] \quad (4.54)$$

gilt. Die Summen (4.52) lassen sich somit in der Form

$$\sum_{n'_1, n'_2} \frac{2n'_2 + \nu}{(2n'_1 + \nu)^2 + 2(2n'_2 + \nu)^2} \exp(i\vec{q} \cdot (n'_1 \vec{a}_1 + n'_2 \vec{a}_2)) \cdot \exp\left(-\lambda \left| (n'_1 + \nu) \vec{a}_1 + (n'_2 + \nu) \vec{a}_2 \right|^2\right) \quad (4.55)$$

schreiben. Sie konvergieren zwar, allerdings so langsam¹², daß zur numerischen Auswertung wieder das Ewald-Verfahren [13] herangezogen werden muß.

Nach einer Umformung gewinnt man aus (4.47) den Ausdruck

$$S_{xx}(\vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{b}{2\pi} \frac{1}{a} \sum_{n'_3} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b} n'_3) \sum_{\nu=0}^1 \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b} \nu/2) \sigma_{xx}(\vec{q}, \nu) \quad (4.56)$$

¹¹ Die Versetzungsdichte kann auch als Länge der Versetzungslinien pro Volumen verstanden werden und ist experimentell bestimmbar [3].

¹² insbesondere für kleine λ , entspricht niedrigen Versetzungsdichten

mit

$$\sigma_{xx}(\vec{q}, \nu) := \sum_{n'_1, n'_2} \frac{\sqrt{2} (n'_2 + \nu/2)}{(n'_1 + \nu/2)^2 + 2(n'_2 + \nu/2)^2} \cdot \exp(i\vec{q} \cdot [(n'_1 + \nu/2)\vec{a}_1 + (n'_2 + \nu/2)\vec{a}_2]) \cdot \exp\left(-\lambda |(n'_1 + \nu/2)\vec{a}_1 + (n'_2 + \nu/2)\vec{a}_2|^2\right). \quad (4.57)$$

$\sigma_{xx}(\vec{q}, \nu)$ wird nach dem Ewald-Verfahren in zwei schnell-konvergente Teilreihen zerlegt.

Dabei ist zu beachten, daß $\sigma_{xx}(\vec{q}, \nu)$ für $n'_1 = n'_2 = \nu = 0$ singulär wird. Allgemein ist die Verzerrung in der Nähe der Versetzungslinie¹³ sehr groß, so daß die Näherungen aus Abschnitt 2 nicht erfüllt sind. Es muß daher mindestens $\vec{R} = \vec{0}$ als Versetzungskern bei der Summation in (4.57) ausgespart werden.

Die Netzebene senkrecht zur Versetzungslinie zerfallen in zwei Klassen – solche mit und solche ohne einem Atom auf der Versetzungslinie.

Für das Ewald-Verfahren führt man in diesen Ebenen ein zweidimensionales „rechteckig-zentriertes“ Translationsgitter mit den Basisvektoren

$$\vec{a}_{\parallel,1} := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{a}_{\parallel,2} := \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

ein, woraus sich auch ein zweidimensionales reziprokes Gitter

$$\vec{b}_{\parallel,1} := (1, 0) \quad \text{und} \quad \vec{b}_{\parallel,2} := (0, 1/\sqrt{2}) \quad \text{mit} \quad \vec{a}_{\parallel,i} \cdot \vec{b}_{\parallel,j} = \delta_{i,j} \quad (4.59)$$

ergibt. Man definiert weiter zweidimensionale Gittervektoren

$$\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)} \quad \text{mit} \quad \vec{R}_{\parallel}(n'_1, n'_2) := n'_1 \vec{a}_{\parallel,1} + n'_2 \vec{a}_{\parallel,2} \quad \text{und} \quad (4.60)$$

$$\vec{R}_{\parallel}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{R}_{\parallel}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{pmatrix} \quad \text{als 2-elementiger Basis.}$$

¹³ entspricht betragsmäßig kleinen Werten von n'_1 und n'_2

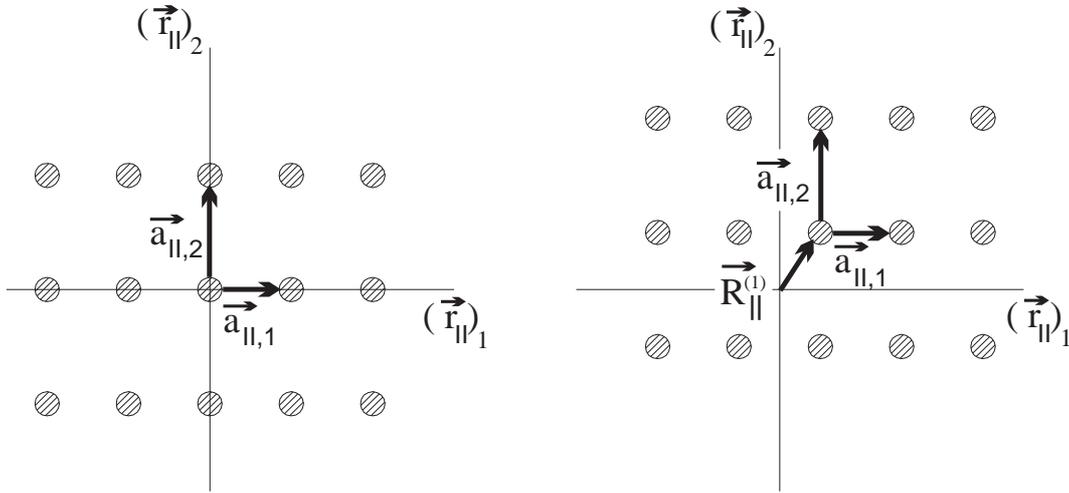


Abbildung 4.3

zweidim. Gitter zu $\vec{R}_{\parallel}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

zweidim. Gitter zu $\vec{R}_{\parallel}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$

Damit gilt

$$\begin{aligned}
 \vec{R}_{\parallel}(n'_1, n'_2) + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)} &= \begin{pmatrix} n'_1 + \nu/2 \\ \sqrt{2}(n'_2 + \nu/2) \end{pmatrix} \\
 \Rightarrow |\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2 &= (n'_1 + \nu/2)^2 + 2(n'_2 + \nu/2)^2 \quad \text{und} \\
 \Rightarrow (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})_2 &= \sqrt{2}(n'_2 + \nu/2),
 \end{aligned} \tag{4.61}$$

womit sich (4.57) als

$$\sigma_{xx}(\vec{q}, \nu) = \sum_{\vec{R}_{\parallel}}' \frac{(\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})_2}{|\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2} \exp(i\vec{q}_{\parallel} \cdot (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}) - \lambda|\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2) \tag{4.62}$$

schreiben läßt, wenn man \vec{q}_{\parallel} über

$$\vec{q}_{\parallel} := \vec{b}_{\parallel,1}(\vec{q} \cdot \vec{a}_1) + \vec{b}_{\parallel,2}(\vec{q} \cdot \vec{a}_2) \tag{4.63}$$

definiert und wegen (4.54) den Parameter $\hat{\lambda} := \lambda a^2/2$ einführt.

Σ' in (4.62) drückt aus, daß die Menge $\{A_{\parallel}^{(\nu)}\}$ der Gittervektoren, die den Versetzungskern bilden, von der Summation auszuschließen ist, da dort die Verzerrung zu stark ist, um mit den vorgenommenen Näherungen behandelt zu werden.

Mit (4.59) und (4.63) wird zugleich ein zweidimensionales reziprokes \vec{K}_{\parallel} -Gitter festgelegt, welches für die Anwendung des Ewald-Verfahrens auf (4.62) benötigt wird.

Man erhält dadurch die Darstellung

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}(\vec{q}, \nu) = & \\
& \sqrt{2\pi i} \sum_{\vec{K}_{\parallel}} \frac{(\vec{q}_{\parallel} + \vec{K}_{\parallel})_2}{|\vec{q}_{\parallel} + \vec{K}_{\parallel}|^2} \exp(-i\vec{K}_{\parallel} \cdot \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}) \cdot \\
& \quad \left[\exp(-|\vec{q}_{\parallel} + \vec{K}_{\parallel}|^2/4(\hat{\lambda} + \eta)) - \exp(-|\vec{q}_{\parallel} + \vec{K}_{\parallel}|^2/4\hat{\lambda}) \right] \\
& + \sum_{\vec{A}_{\parallel}^{(\nu)}} \frac{(\vec{A}_{\parallel}^{(\nu)})_2}{|\vec{A}_{\parallel}^{(\nu)}|^2} \exp(i\vec{q}_{\parallel} \cdot \vec{A}_{\parallel}^{(\nu)}) \left[\exp(-(\hat{\lambda} + \eta)|\vec{A}_{\parallel}^{(\nu)}|^2) - \exp(-\hat{\lambda}|\vec{A}_{\parallel}^{(\nu)}|^2) \right] \\
& + \sum'_{\vec{R}_{\parallel}} \frac{(\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})_2}{|\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2} \exp(i\vec{q}_{\parallel} \cdot (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})) - (\hat{\lambda} + \eta)|\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2,
\end{aligned} \tag{4.64}$$

in der η den Ewaldparameter bezeichnet.

Das Ewaldverfahren für die zweidimensionale Summe $\sum'_{\vec{R}_{\parallel}} \dots$ aus (4.62) erfolgt analog zu der dreidimensionalen Summe $\sum_{\vec{K}^2 \neq 0} \frac{1}{K^2} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$ aus (4.9) (siehe [13, 16, 25, 14]). Dabei macht man von der Beziehung

$$\sum_{\vec{K}_{\parallel}} \exp(i\vec{K}_{\parallel} \cdot (\vec{r}_{\parallel} - \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})) = \sqrt{2} \sum_{\vec{R}_{\parallel}} \delta(\vec{r}_{\parallel} - \vec{R}_{\parallel} - \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}) \tag{4.65}$$

Gebrauch. Die eingeschränkte Summe $\sum'_{\vec{R}_{\parallel}} \dots$ verarbeitet man als

$$\sum'_{\vec{R}_{\parallel}} \dots = \sum_{\vec{R}_{\parallel}} \dots - \sum_{\vec{A}_{\parallel}^{(\nu)}} \dots \tag{4.66}$$

Mit

$$\frac{1}{K^2} = \int_0^{\infty} e^{-K^2 t} dt \tag{4.67}$$

findet man

$$\begin{aligned}
& \sum'_{\vec{R}_{\parallel}} \frac{(\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})_i}{|\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2} \exp(-\hat{\lambda}|\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2 + i\vec{q}_{\parallel} \cdot (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})) = \\
& \sum'_{\vec{R}_{\parallel}} \int_0^{\eta} (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})_i \exp(-(\hat{\lambda} + t)|\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2 + i\vec{q}_{\parallel} \cdot (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})) dt + \\
& \sum'_{\vec{R}_{\parallel}} \int_{\eta}^{\infty} (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})_i \exp(-(\hat{\lambda} + t)|\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)}|^2 + i\vec{q}_{\parallel} \cdot (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})) dt.
\end{aligned} \tag{4.68}$$

Die weitere Vorgehensweise entspricht dem dreidimensionalen Fall.
Den abweichenden Term $(\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})_l$ behandelt man als

$$(\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})_l \exp(i\vec{q}_{\parallel} \cdot (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})) = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{q}_{\parallel l}} \exp(i\vec{q}_{\parallel} \cdot (\vec{R}_{\parallel} + \vec{R}_{\parallel}^{(\nu)})) \quad (4.69)$$

und erhält schließlich die Darstellung (4.64).

Damit kann $S_{xx}(\vec{q})$, bzw. wegen (4.51) $|S_{xx}(\vec{q})|^2$, ausgewertet werden.

Für $S_{xz}(\vec{q})$ findet man analog zu (4.56)

$$S_{xz}(\vec{q}) = -\frac{b}{4\pi} \frac{1}{a} \sum_{n'_3} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b} n'_3) \sum_{\nu=0}^1 \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b} \nu/2) \sigma_{xz}(\vec{q}, \nu). \quad (4.70)$$

$\sigma_{xz}(\vec{q}, \nu)$ erhält man aus (4.64), wenn man in allen Brüchen die zweiten Komponenten der Vektoren durch die ersten ersetzt.

Mit (4.51) und (4.56) gilt somit

$$\left| \sum_{\vec{R}} \epsilon_{xx}(\vec{R}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \right|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{b}{2\pi a} \right)^2 \left| \sum_{\nu=0}^1 e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} \nu/2} \sigma_{xx}(\vec{q}, \nu) \right|^2 \cdot 2\pi \frac{L}{b} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta(\vec{q} \cdot \vec{b} - 2\pi j), \quad (4.71)$$

was zusammen mit (4.22) zu

$$\begin{aligned} |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 &= 2\pi \frac{L}{b} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta(\vec{q} \cdot \vec{b} - 2\pi j) \cdot \\ &\left| \int_{\Pi} \psi_{n' \vec{k}'}^*(\vec{r}) W_{xx}(\vec{r}) \psi_{n \vec{k}}(\vec{r}) d^3 r \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{b}{2\pi a} \right) \sum_{\nu=0}^1 e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} \nu/2} \sigma_{xx}(\vec{q}, \nu) + \right. \\ &\left. \int_{\Pi} \psi_{n' \vec{k}'}^*(\vec{r}) W_{xz}(\vec{r}) \psi_{n \vec{k}}(\vec{r}) d^3 r \cdot \left(-\frac{b}{4\pi a} \right) \sum_{\nu=0}^1 e^{i\vec{q} \cdot \vec{b} \nu/2} \sigma_{xz}(\vec{q}, \nu) \right|^2 \end{aligned} \quad (4.72)$$

$$\Rightarrow |\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2 =: 2\pi \frac{L}{b} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta(\vec{q} \cdot \vec{b} - 2\pi j) \cdot M(\vec{k}', \vec{k}) \quad (4.73)$$

führt.

Die Übergangswahrscheinlichkeiten haben also eine zweifache Abhängigkeit von der Versetzungsdichte $n_{\text{disl}} = 1/A_0$:

1. Die Versetzungsdichte n_{disl} geht über $\hat{\lambda} = \pi n_{\text{disl}} a^2 / 2$ in die Berechnung von $\sigma_{xx}(\vec{q}, \nu)$ und $\sigma_{xz}(\vec{q}, \nu)$ ein.
2. Über den Vorfaktor $\frac{1}{LA_0}$ aus (3.4) sind die Übergangswahrscheinlichkeiten etwa proportional zu $n_{\text{disl}} = 1/A_0$.

Die Proportionalität (2) führt dazu, daß letztlich nicht die absolute Leitfähigkeit $\underline{\sigma}$, sondern die spezifische, versetzungsbezogene Leitfähigkeit

$$\underline{\tilde{\sigma}} := \frac{1}{A_0} \underline{\sigma} \quad (4.74)$$

betrachtet wird.

Auch alle experimentellen Vergleichsdaten [3] sind versetzungsbezogen.

4.6 Lösung der Transportgleichung

Zur Lösung der Transportgleichung ist zunächst das in Abschnitt 3.2 eingeführte $\{\vec{k}_i\}$ -Netz festzulegen, auf dem die weiteren Berechnungen durchgeführt werden. Es erweist sich als günstig, dabei gleich die $\delta(\vec{q} \cdot \vec{b} - 2\pi j)$ -Abhängigkeit der Matrixelemente $\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle$ zu berücksichtigen, wie sie in Gleichung (4.73) auftritt.

Jedes Matrixelement wird durch die beiden Vektoren \vec{k} und \vec{k}' festgelegt, denen jeweils eine Ebene des \vec{k} -Raums mit $\vec{k} \cdot \vec{b} = \text{const}_1$ bzw. $\vec{k}' \cdot \vec{b} = \text{const}_2$ zugeordnet werden kann. Wegen der δ -Abhängigkeit ist das Matrixelement nur dann von Null verschieden, wenn $\vec{q} \cdot \vec{b} = \text{const}_1 - \text{const}_2 \in 2\pi \mathbb{Z}$ erfüllt ist.

Wie in Abschnitt 4.5.1 erläutert, läßt die Größe der Fermifläche in den meisten Fällen nur $\vec{q} \cdot \vec{b} = 0$ zu, höchstens aber $\vec{q} \cdot \vec{b} = \pm 2\pi$.

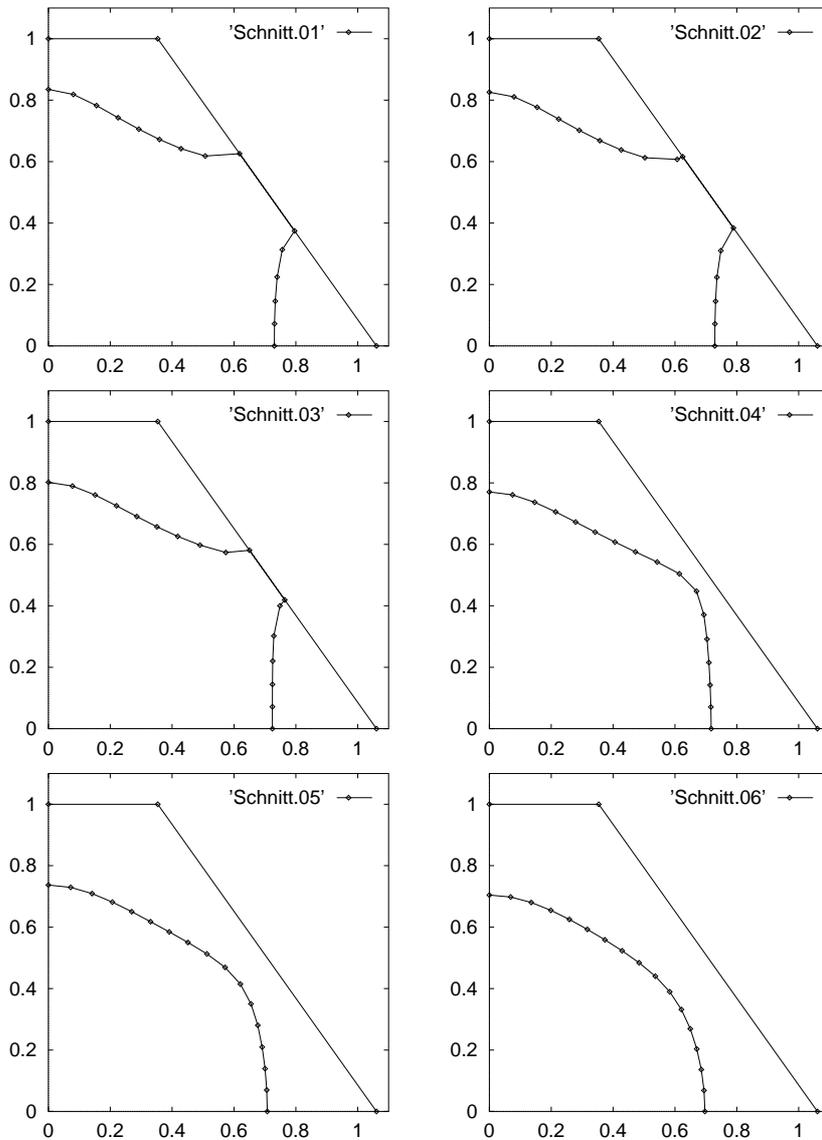
Man legt daher Schnitte durch die Fermifläche, auf denen $\vec{k} \cdot \vec{b} = \text{const}$ ist. Auf den resultierenden Schnittkurven wählt man die diskreten Punkte \vec{k}_i . Dann braucht man nur die Matrixelemente $\langle \vec{k}_i | \Delta V | \vec{k}_j \rangle$ zwischen den Punkten derselben Ebene, bzw. zwischen den Punkten $\vec{k} = \vec{k}_i$ der einen und $\vec{k}' = \vec{k}_j$ von höchstens einer anderen Ebenen zu berechnen. Zur Wahl der Schnittebenen siehe Anhang C.

4.6.1 Schnittkurven der Fermifläche

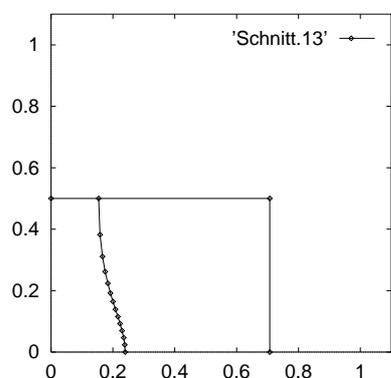
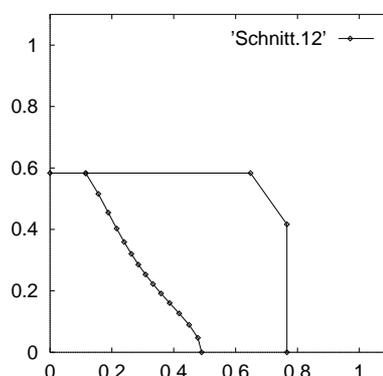
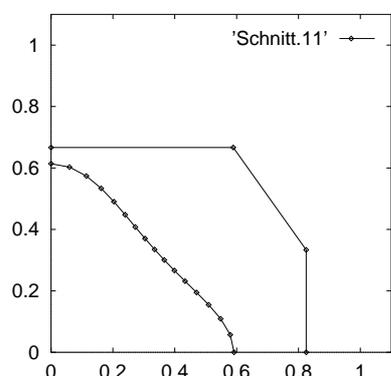
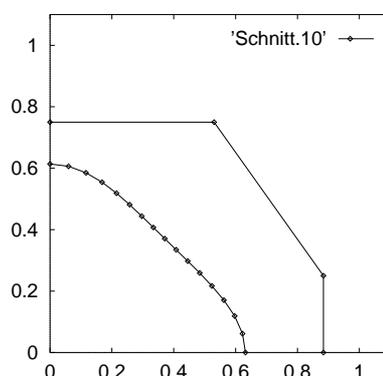
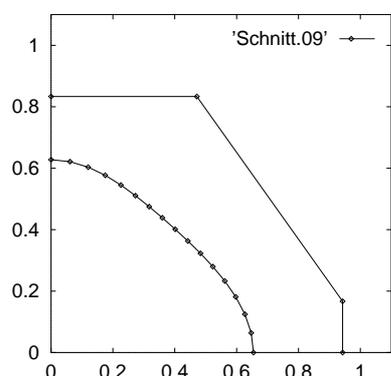
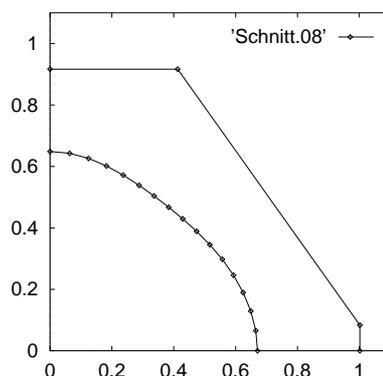
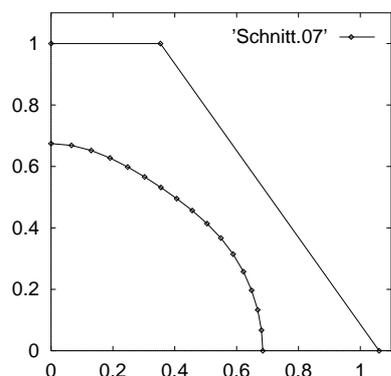
Zur Lösung der Transportgleichung wurden 13 Schnitte durch die Fermifläche ausgewertet.

Der erste Quadrant jeder Schnittebene wurde in 17 Winkelschritte zwischen 0 und $\pi/2$ geteilt und für jede dieser Richtungen der Durchstoßpunkt mit der Fermifläche iterativ mit dem MAPW-Verfahren (siehe Anhang C.3) bis auf 13 Dezimalstellen berechnet.

Für Ebenen, die Hälse der Fermifläche anschneiden (Nr. 1 2 3 12 und 13), wurden zusätzlich die Schnittpunkte der Fermifläche mit der Berandung der 1. Brillouin-Zone bestimmt.



Ebene	$\vec{k} \cdot \vec{b}$
Schnitt 01	$\pi \cdot 0$
Schnitt 02	$\pi \cdot 1/12$
Schnitt 03	$\pi \cdot 2/12$
Schnitt 04	$\pi \cdot 3/12$
Schnitt 05	$\pi \cdot 4/12$
Schnitt 06	$\pi \cdot 5/12$
Schnitt 07	$\pi \cdot 6/12$
Schnitt 08	$\pi \cdot 7/12$
Schnitt 09	$\pi \cdot 8/12$
Schnitt 10	$\pi \cdot 9/12$
Schnitt 11	$\pi \cdot 10/12$
Schnitt 12	$\pi \cdot 11/12$
Schnitt 13	$\pi \cdot 12/12$



Die Abbildungen zeigen den Verlauf der Fermifläche im 1. Quadranten der Schnittebenen.

Die berechneten \vec{k} -Punkte sind markiert. Zusätzlich ist die Berandung der 1. Brillouin-Zone in dieser Ebene eingezeichnet.

4.6.2 Auswertung der symmetrischen Matrix V

Betrachtet man die Gleichungen (3.23) und (3.24), so tritt in beiden ein Integral über die Fermifläche auf, mit einem Integranden, der $|\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle|^2$ enthält.

Dieser ist nach (4.51) proportional zu

$$2\pi \frac{L}{b^2} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta \left([(k_x - k'_x)/\sqrt{2} - (k_y - k'_y)/\sqrt{2}] - \frac{2\pi}{b} j \right), \quad (4.75)$$

was die zweidimensionalen Integrale über die Fermifläche zu eindimensionalen Integralen über eine Schnittkurve reduziert.

Es erweist sich als vorteilhaft, im \vec{k} -Raum Zylinderkoordinaten (ρ, \hat{z}, φ) gemäß

$$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) = \left((\rho \cos \varphi + \hat{z})/\sqrt{2}, (\rho \cos \varphi - \hat{z})/\sqrt{2}, \rho \sin \varphi \right) \quad (4.76)$$

einzuführen, mit denen

$$\begin{aligned} \vec{k} \cdot \vec{b} &= \frac{a}{\sqrt{2}} \hat{z} \quad \text{und} \\ (k_x - k'_x)/\sqrt{2} - (k_y - k'_y)/\sqrt{2} &= \hat{z} - \hat{z}' \end{aligned} \quad (4.77)$$

gilt. Die Schnittebenen sind also durch $\hat{z} = \text{const.}$ festgelegt.

Die Fermifläche wird in diesen Zylinderkoordinaten als $\rho(\hat{z}, \varphi)$ parametrisiert.

In Zylinderkoordinaten stellt sich ein Oberflächenelement als

$$dS(\vec{k}) = \sqrt{\rho^2(\hat{z}, \varphi) \left(1 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \hat{z}} \right)^2 \right) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \varphi} \right)^2} \Bigg|_{\vec{k} \hat{=} (\rho, \hat{z}, \varphi)} d\hat{z} d\varphi \quad (4.78)$$

dar. Die Wurzel wird im weiteren mit $\sqrt{\dots}$ abgekürzt.

Ein Integral über die Fermifläche hat damit die Form

$$\int_{S_F} f(\vec{k}) \frac{dS(\vec{k})}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}}|} = \int_{-\hat{z}_{\max}}^{\hat{z}_{\max}} \int_0^{2\pi} f(\rho(\hat{z}, \varphi), \hat{z}, \varphi) \sqrt{\dots} \frac{d\hat{z} d\varphi}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{(\rho, \hat{z}, \varphi)}|}, \quad (4.79)$$

wobei man die Hälse der Fermifläche aus dem Integrationsgebiet auszuschließen hat.

\hat{z}_{\max} definiert sich als halber Durchmesser der Fermifläche in Versetzungsrichtung, d.h. $\hat{z}_{\max} \approx 0.5165 \sqrt{2} \cdot 2\pi/a$.

Gilt nun

$$f(\vec{k}) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \delta(\hat{z} - \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} j) \cdot g(\vec{k}), \quad (4.80)$$

so erhält man für das Integral (4.79)

$$\int_{S_F} f(\vec{k}) \frac{dS(\vec{k})}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}}|} = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \int_0^{2\pi} g(\rho, \hat{z}, \varphi) \sqrt{\dots} \frac{d\varphi}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{(\rho, \hat{z}, \varphi)}|} \Bigg|_{\substack{\rho = \rho(\hat{z}, \varphi) \\ \hat{z} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} j}}. \quad (4.81)$$

Das Integral erstreckt sich nur noch über eine Konturkurve der Fermifläche innerhalb einer Schnittebene. Es handelt sich dabei jedoch um kein Längenintegral über den Umfang, denn es gilt

$$\frac{dS}{d\hat{z}} = \sqrt{\rho^2 \left(1 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \hat{z}}\right)^2\right) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \varphi}\right)^2} d\varphi \neq \sqrt{\rho^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \varphi}\right)^2} d\varphi = dl. \quad (4.82)$$

Mit (4.73), (4.77) und (4.81) erhält man für (3.23)

$$\begin{aligned} & \Phi(\vec{k}) \sum_{j \in \mathbb{Z}} \int_0^{2\pi} M(\vec{k}, \vec{k}') \sqrt{\dots} \frac{d\varphi'}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}'}|} \Bigg|_{\substack{\rho' = \rho(\hat{z}', \varphi') \\ \hat{z}' = \hat{z} - \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} j}} - \\ & \sum_{j \in \mathbb{Z}} \int_0^{2\pi} M(\vec{k}, \vec{k}') \Phi(\vec{k}') \sqrt{\dots} \frac{d\varphi'}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}'}|} \Bigg|_{\substack{\rho' = \rho(\hat{z}', \varphi') \\ \hat{z}' = \hat{z} - \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} j}} \\ & = -2\pi e b^2 A_0 \vec{E} \cdot \text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (4.83)$$

Die Reduktion der Integrale $\int_{S_F} \dots$ über die Fermifläche zu Summen über eindimensionale Integrale $\int_0^{2\pi} \dots$, wie sie in (4.81) angegeben ist, muß in der Argumentation aus Abschnitt 3.2 berücksichtigt werden.

Aus (3.24) gewinnt man mit (4.73) und (4.81) die Darstellung

$$U(\vec{k}) := \sum_{j \in \mathbb{Z}} \int_0^{2\pi} M(\vec{k}, \vec{k}') \sqrt{\dots} \frac{d\varphi'}{|\text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}'}|} \Bigg|_{\substack{\rho' = \rho(\hat{z}', \varphi') \\ \hat{z}' = \hat{z} - \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} j}}. \quad (4.84)$$

Den diskreten Punkten $\{\vec{k}_i\}$ auf der Fermifläche ordnet man Doppelindizes $i \hat{=} (\hat{z}_i, \varphi_i)$ zu. Dabei soll der Winkel der innere Laufindex sein, d.h. die Punkte einer Schnittebene sollen aufeinander folgen.

Wenn $\Delta\hat{z}$ den konstanten Abstand zweier benachbarter Schnittebenen bezeichnet¹⁴, ergibt sich aus (4.82) die Abschätzung

$$\frac{\Delta S(\vec{k}_i)}{\Delta\hat{z}} \approx \sqrt{\rho^2 \left(1 + \left(\frac{\partial\rho}{\partial\hat{z}}\right)^2\right) + \left(\frac{\partial\rho}{\partial\varphi}\right)^2} \Bigg|_{(\rho, \hat{z}, \varphi) \hat{=} \vec{k}_i} \Delta\varphi, \quad (4.85)$$

durch die sich (4.84) mit Gewichten $D(\vec{k}_j)$ aus Gleichung (3.31) als

$$U(\vec{k}_i) := \frac{1}{\Delta\hat{z}} \sum_{l \in \mathbb{Z}} \sum_{\varphi_j} M(\vec{k}_i, \vec{k}_j) D(\vec{k}_j) \Bigg|_{\hat{z}_j = \hat{z}_i - \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} l} \quad (4.86)$$

schreiben läßt.

Der Vorgehensweise aus Abschnitt 3.2 folgend, gelangt man schließlich zu

$$\begin{aligned} \psi(\vec{k}_i) &= \sum_{l \in \mathbb{Z}} \sum_{\varphi_j} \frac{1}{\Delta\hat{z}} M(\vec{k}_i, \vec{k}_j) \sqrt{\frac{D(\vec{k}_i)D(\vec{k}_j)}{U(\vec{k}_i)U(\vec{k}_j)}} \psi(\vec{k}_j) \Bigg|_{\hat{z}_j = \hat{z}_i - \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} l} \\ &= -2\pi e b^2 A_0 \sqrt{\frac{D(\vec{k}_i)}{U(\vec{k}_i)}} \vec{E} \cdot \text{grad}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (4.87)$$

mit der reellen, symmetrischen Matrix

$$V_{ij} := \frac{1}{\Delta\hat{z}} M(\vec{k}_i, \vec{k}_j) \sqrt{\frac{D(\vec{k}_i)D(\vec{k}_j)}{U(\vec{k}_i)U(\vec{k}_j)}} \cdot \sum_{l \in \mathbb{Z}} \delta_{\hat{z}_j, \hat{z}_i - 2\pi/a \cdot \sqrt{2} l}. \quad (4.88)$$

Alle hier auftretenden Größen sind entweder ungerade

$$\Phi(\vec{k}) = -\Phi(-\vec{k}), \quad \psi(\vec{k}) = -\psi(-\vec{k}), \quad R(\vec{k}) = -R(-\vec{k}) \quad (4.89)$$

oder gerade

$$V(\vec{k}_i, \vec{k}_j) = V(-\vec{k}_i, -\vec{k}_j), \quad D(\vec{k}) = D(-\vec{k}), \quad U(\vec{k}) = U(-\vec{k}). \quad (4.90)$$

¹⁴ In unserem Fall gilt wegen $\Delta(\vec{k} \cdot \vec{b}) = \pi/12$ (siehe Anhang C.2) und (4.77) : $\Delta\hat{z} = \frac{\pi}{12} \frac{\sqrt{2}}{a}$

Somit kann das Netz der \vec{k}_i -Punkte auf eine Hälfte der Fermifläche eingeschränkt werden. Man verwendet daher nur Schnittebenen mit Scharparameter $\vec{k} \cdot \vec{b} \geq 0$ (siehe Anhang C.2).

Durch das Kronecker- δ in (4.88) nimmt die Matrix \mathbf{V} Blockgestalt an, wenn man die Reihenfolge der $\{\vec{k}_i\}$ geeignet wählt.

Da die $\{\vec{k}_i\}$ so numeriert sind, daß die Punkte eines Schnittes aufeinander folgen, kann man die Matrix \mathbf{V} in Untermatrizen $V^{\alpha\beta}$ aufteilen, die jeweils der Streuung aus der Schnittebene α in die Schnittebene β entsprechen. Für die meisten Schnitte α ist nur Streuung innerhalb einer Ebene zulässig, höchsten jedoch in eine weitere Zielebene β . Daher enthalten die meisten Untermatrizen nur Nullen.

Die Untermatrizen $V^{\alpha\alpha}$ auf der Hauptdiagonalen entsprechen den Streuprozessen innerhalb einer Ebene. Sie sind quadratisch, symmetrisch und i.a. von Null verschieden.

Die Umklapp-Prozesse führen wegen $\vec{q} \cdot \vec{b} = \pm 2\pi$ von einer Hälfte der Fermifläche in die andere, also auf Zustände, die eigentlich nicht mehr im \vec{k}_i -Netz liegen. Bei geeigneter Wahl der Schnitte läßt sich aber sicherstellen, daß jeder Umklapp-Prozeß auf die Inversion einer bereits vorhandenen Schnittebene führt¹⁵.

Wählt man die Reihenfolge der $\{\vec{k}_i\}$ so, daß auf die Punkte der Ebene α die Punkte ihrer Umklappebene α' folgen, falls es eine solche gibt, so zerfällt die Matrix \mathbf{V} vollständig in quadratische, symmetrische Blöcke entlang der Hauptdiagonalen, wobei jeder Block mit einem Schnitt durch die Fermifläche korrespondiert und gegebenenfalls auch die Umklapp-Prozesse enthält.

Die Lösung des Eigenwertproblems der Matrix \mathbf{V} zerfällt damit in eine Reihe reell-symmetrischer Eigenwertprobleme von entsprechend geringerer Dimension, wodurch sich der Rechenaufwand erheblich reduziert, denn das Netz der $\{\vec{k}_i\}$ -Punkte aus Anhang C ergibt für \mathbf{V} eine Größe von 776×776 , während die größte der Untermatrizen nur von der Dimension 60×60 ist.

¹⁵ Die Teilung aus Anhang C.2 bewirkt, daß Umklapp-Prozesse nur zwischen der letzten Ebene und ihrer Inversion eintreten.

4.6.3 Nicht-divergente Komponenten des Leitfähigkeitstensors

Für eine Integralgleichung der Form

$$f(s) = \varphi(s) - \mu \int K(s,t) \varphi(t) dt \quad \text{mit} \quad K(s,t) = K(t,s) \quad \forall s,t \quad (4.91)$$

stellt sich die Fredholmsche Alternative [11], die darüber entscheidet, ob zu einer Inhomogenität $f(s)$ eine Lösung $\varphi(s)$ existiert.

Dazu untersucht man die Lösungen der zugehörigen homogenen Integralgleichung

$$\varphi(s) = \mu \int K(s,t) \varphi(t) dt, \quad (4.92)$$

wobei in unserem Fall (vgl. (3.26)) $\mu := 1$ zu setzen ist.

Die Fredholmsche Alternative besagt, daß, falls es keine Lösungen zu (4.92) gibt, die inhomogene Gleichung (4.91) für jede stetige Inhomogenität $f(s)$ genau eine stetige Lösung $\varphi(s)$ hat.

Falls aber n Lösungen $\varphi_\mu^i(s)$, $i = 1, \dots, n$ der homogenen Gleichung (4.92) existieren, besitzt (4.91) nur für jene $f(s)$ eine Lösung, die den Bedingungen

$$\int f(s) \varphi_\mu^i(s) ds \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall i = 1, \dots, n \quad (4.93)$$

genügen.

Mit den N -dimensionalen Vektoren aus Abschnitt 3.2 erhält man für die drei linear-unabhängigen elektrostatischen Felder \vec{E}_κ , $\kappa = 1, 2, 3$ je eine Vektorgleichung

$$\underline{\psi} - \mathbf{V} \underline{\psi} = \underline{R}_\kappa, \quad (4.94)$$

die einer inhomogenen, linearen Integralgleichung mit symmetrischem Kern vom Typ (4.91) entspricht.

Die homogene Integralgleichung (4.92) geht für $\mu = 1$ über in

$$\underline{\varphi} = \mathbf{V} \underline{\varphi}. \quad (4.95)$$

Da die Lösung $f(s)$ als Linearkombination der Eigenfunktionen $\varphi_\lambda(s)$ des Kerns $K(s,t)$ dargestellt wird [11] (vgl. (3.36) und (3.38)), sind die Eigenvektoren

$$\underline{\varphi}_\lambda = \lambda \mathbf{V} \underline{\varphi}_\lambda \quad (4.96)$$

der Matrix \mathbf{V} zu bestimmen. Gleichung (4.95) kann somit als Suche nach Eigenvektoren zum Eigenwert $\lambda = 1$ aufgefaßt werden.

Bestimmt man die Eigenwerte der Matrix \mathbf{V} , erhält man zum Eigenwert $\lambda = 1$ einen Eigenraum, dessen Basis für jede der NZ Schnittebenen α eine Eigenfunktion φ_1^α , $\alpha = 1, \dots, NZ$ enthält, deren Träger die Ebene α und ggf. ihre Umklappebene α' ist. Nutzt man die Blockgestalt der Matrix \mathbf{V} , hat jede der NZ Untermatrizen $V^{\alpha\alpha}$ genau einen Eigenvektor φ_1 zum Eigenwert $\lambda = 1$.

Das Auftreten der Eigenfunktionen zum Eigenwert $\lambda = 1$ erfordert eine zweckmäßige Wahl der drei \vec{E}_κ -Vektoren.

Aus den Zylinderkoordinaten (4.76) ergibt sich ein kartesisches, versetzungsbezogenes Koordinatensystem

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{\text{neu}} = \begin{pmatrix} \rho \cos \varphi \\ \rho \sin \varphi \\ \hat{z} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{\text{neu}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{\text{alt}}, \quad (4.97)$$

entlang dessen Koordinatenachsen die Vektoren \vec{E}_κ gelegt werden. \vec{E}_1 und \vec{E}_2 stehen damit senkrecht auf der Versetzungslinie, \vec{E}_3 liegt parallel dazu.

Die Wahl des Koordinatensystems und der \vec{E}_κ erweist sich als günstig, da die Koordinatenachsen und die \vec{E}_κ mit den anschaulich zu erwartenden Hauptachsen des Leitfähigkeitstensors $\underline{\sigma}$ zusammenfallen.

Für die drei elektrostatischen Felder ist mit der Fredholmschen Alternative getrennt über die Lösbarkeit der Transportgleichung zu entscheiden.

Hierbei zeigt sich, daß die Orthogonalitätsbedingung (4.93), die sich als

$$\varphi_1^\alpha \bullet \underline{R}_\kappa \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall \alpha = 1 \dots NZ \quad (4.98)$$

darstellt, nur für $\kappa = 1, 2$ erfüllt ist, nicht jedoch für $\kappa = 3$.

Betrachtet man (3.38) und (3.39), würde die Änderung $\Phi(\vec{k})$ der Verteilung aus (3.8) wegen der Singularität $\frac{\lambda}{\lambda-1}$ aus (3.38) unendlich groß werden.

Diesen Sachverhalt kann man so interpretieren, daß ein \vec{E} -Feld mit nicht verschwindender Komponente in Richtung der Versetzungslinie, eine unendlich hohen Strom hervorruft, wodurch der in Gleichung (3.15) vorausgesetzte, lineare Zusammenhang von Feldstärke \vec{E} und Stromdichte \vec{j} nicht mehr gegeben ist.

Im Sinne der Transporttheorie bedeutet dies, daß die Verteilungsfunktion nicht ins Gleichgewicht kommt.

Im Leitfähigkeitstensor $\underline{\sigma}$ divergieren somit die Komponenten σ_{xz} , σ_{yz} , σ_{zx} , σ_{zy} und σ_{zz} ; die Leitfähigkeit in Richtung der Versetzungslinie ist unendlich groß.

Endliche Zahlenwerte können nur für σ_{xx} , σ_{xy} , σ_{yx} und σ_{yy} erhalten werden, was der Leitfähigkeit senkrecht zur Versetzungslinie entspricht.

Der isotrope Mittelwert $\bar{\sigma}$ der Leitfähigkeit ist nach (3.48) als

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{3} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \quad (4.99)$$

definiert und würde wegen σ_{zz} ebenfalls divergieren, was aber nicht den Tatsachen entspräche. Betrachtet man stattdessen den Widerstandstensor $\underline{\rho}$, so gehen die Komponenten, die im Leitfähigkeitstensor $\underline{\sigma}$ divergieren, gegen Null. Der isotrope Mittelwert $\bar{\rho}$ bleibt endlich, und es kann über (3.49) auch die mittlere Leitfähigkeit $\bar{\sigma}$ bestimmt werden.

Die Anisotropie α des Leitfähigkeitstensors ist das Verhältnis der Leitfähigkeit in Versetzungsrichtung zur Leitfähigkeit senkrecht dazu [28]. Sie ist in dem versetzungsbezogenen, kartesischen Koordinatensystem aus (4.97) als

$$\alpha := \frac{\sigma_{zz}}{\frac{1}{2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})} \quad (4.100)$$

definiert und wird wegen der Divergenz von σ_{zz} unendlich groß.

4.7 Überblick über die Rechenschritte

Alle numerischen Berechnungen wurden mit Hilfe von FORTRAN77-Programmen auf einem Cluster von HP 9000/735-Workstations unter dem Betriebssystem UNIX durchgeführt.

Der gesamte FORTRAN77-Code umfaßt etwa 300 kByte.

Die Berechnungen und die dafür verbrauchte Rechenzeit¹⁶ gliedern sich wie folgt :

0. Selbstkonsistente MAPW-Rechnungen für verschieden stark rhomboedrisch bzw. tetragonal verzerrte Kupferkristalle, aus denen die Ladungsdichten $\rho_{PW}(\epsilon, \vec{K}_\epsilon)$ gewonnen werden	ca. 300.000 CPU-sec
1. Berechnung der Außenraumpotentiale $V_{II}(\epsilon, \vec{r})$ aus den Ladungsdichten entlang ausgezeichneter Richtungen Ω_i ; Bestimmung der Ableitungen $W_{xx}(\vec{r})$ und $W_{xz}(\vec{r})$ nach ϵ ; radiale Spline-Interpolation der Ableitungen für jede der ausgezeichneten Richtungen und Auswertung der radialen Momente $M_n(\Omega_i)$	ca. 8.000 CPU-sec
2. Iterative Bestimmung der Schnitte durch die Fermifläche des unverzerrten Kristalls mit dem MAPW-Verfahren; Berechnung der Wellenfunktionen $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ der Zustände auf dem $\{\vec{k}_i\}$ -Netz auf dieser Fermifläche	ca. 10.000 CPU-sec
3. Berechnung aller Übergangsmatrixelemente $M(\vec{k}, \vec{k}')$ der Punkte $\vec{k}, \vec{k}' \in \{\vec{k}_i\}$ für eine bestimmte Versetzungsdichte	ca. 20.000 CPU-sec
4. Lösung der Transportgleichung gemäß Abschnitt 4.6 : Aufstellen der Matrix \mathbf{V} ; Lösung des Eigenwertproblems; Berechnung des Leitfähigkeits- und Widerstandstensors	ca. 3 CPU-sec

¹⁶ Für den Rechenaufwand ist die Zeit maßgeblich, während der einem Programm die CPU zugeteilt war. Da im Timesharing-Verfahren mehrere Programme zugleich auf einem Rechner laufen, verteilt sich die Rechenzeit anteilmäßig.

5 Ergebnisse

Das Verfahren, das in den vorangegangenen Kapiteln dargestellt wurde, erlaubt es, den Anteil des elektrischen Widerstands von Kupfer für $T = 0$ K zu berechnen, der von einer homogenen Dichte von Schraubenversetzungen herrührt.

Da, wie in Abschnitt 3.2 gezeigt, die Leitfähigkeit $\underline{\sigma}$ (näherungsweise) umgekehrt proportional zur Versetzungsdichte n_{disl} ist, ist es üblich, die versetzungsbezogene Leitfähigkeit $\underline{\tilde{\sigma}} := \underline{\sigma} \cdot n_{\text{disl}}$ bzw. den versetzungsbezogenen Widerstand $\underline{\tilde{\rho}} := \underline{\rho}/n_{\text{disl}}$ anzugeben.

Diese Größen wurden für Versetzungsdichten $n_{\text{disl}} = 10^7 \dots 2 \cdot 10^{14}/\text{cm}^2$ berechnet.

Niedrigere Versetzungsdichten sind experimentell schwer zugänglich [3], zum einen wegen des sehr kleinen Absolutwerts des Probenwiderstands, der bei den verwendeten Probenabmessungen nur noch einige $10^{-11} \Omega$ beträgt, zum anderen, weil sonst die unvermeidlichen Verunreinigungen im Kupfer die Versetzungen als Streu-Ursache dominieren und das Ergebnis verfälschen.

Da eine Kupferoberfläche nur etwa $1.5 \cdot 10^{15}$ Atome pro cm^2 enthält, sind höhere Versetzungsdichten nicht realisierbar.

n_{disl}	10^7	...	10^{12}	10^{13}	10^{14}	$2 \cdot 10^{14}$	cm^{-2}
$\tilde{\rho}_{xx}$	14.659	...	14.659	14.569	13.368	11.139	$10^{-19} \Omega \text{cm}^3$
$\tilde{\rho}_{yy}$	11.658	...	11.658	11.555	10.596	9.179	$10^{-19} \Omega \text{cm}^3$
$\bar{\rho}$	8.772	...	8.772	8.708	7.988	6.772	$10^{-19} \Omega \text{cm}^3$
$\tilde{\sigma}_{xx}$	0.6822	...	0.6822	0.6864	0.7480	0.8978	$10^{18} \Omega^{-1} \text{cm}^{-3}$
$\tilde{\sigma}_{yy}$	0.8578	...	0.8578	0.8654	0.9438	1.0895	$10^{18} \Omega^{-1} \text{cm}^{-3}$
$\bar{\sigma}$	1.1400	...	1.1400	1.1484	1.2519	1.4766	$10^{18} \Omega^{-1} \text{cm}^{-3}$

Tabelle 5.1 : Überblick über die berechneten, nicht divergenten bzw. nicht verschwindenden Komponenten der Widerstands- und Leitfähigkeitstensoren für verschiedene Versetzungsdichten

Der isotrope, versetzungsbezogene Mittelwert des Widerstandstensors berechnet sich nach $\bar{\rho} := \frac{1}{3} \text{Spur } \underline{\tilde{\rho}}$ mit $\tilde{\rho}_{zz} = 0$.

Da $\tilde{\sigma}_{zz}$ divergiert, wird der isotrope, versetzungsbezogene Leitfähigkeitsmittelwert *nicht* als $\bar{\sigma} := \frac{1}{3} \text{Spur } \underline{\tilde{\sigma}}$ definiert, sondern als $\bar{\sigma} := 1/\bar{\rho}$.

Das gewählte Koordinatensystem (4.97) korrespondiert mit den Hauptachsen der Tensoren, daher sind die Nicht-Diagonal-Elemente $\tilde{\sigma}_{xy}$, $\tilde{\sigma}_{yx}$ und $\tilde{\rho}_{xy}$, $\tilde{\rho}_{yx}$ ebenfalls Null¹.

Man sieht, daß sich die versetzungsbezogenen Größen von $n_{\text{disl}} = 10^7 \dots 10^{12}/\text{cm}^2$ kaum ändern, daß in diesem Bereich somit keine Abweichung von der Proportionalität zur Versetzungsdichte festgestellt wird.

Die Proportionalität läßt sich so interpretieren [26], daß die Streuung lokalisiert ist und hauptsächlich in einem zylindrischen Bereich mit Radius $R_{\text{cut}}^{\text{max}}$ um die Versetzungslinie erfolgt.

Das Fernfeld trägt also nicht wesentlich zur Streuung bei.

Für niedrige Versetzungsdichten gilt $R_{\text{cut}} = 1/\sqrt{\pi n_{\text{disl}}} > R_{\text{cut}}^{\text{max}}$. Der zylindrische Bereich, der jeder Versetzung zugeordnet ist, umschließt den wirksamen Zylinder; ihre Anzahl ist streng proportional zur Versetzungsdichte. Bei höheren Versetzungsdichten gilt $R_{\text{cut}} < R_{\text{cut}}^{\text{max}}$, die Versetzungen können ihre Streuwirkung nicht mehr voll entfalten, die Übergangswahrscheinlichkeiten $\langle n' \vec{k}' | \Delta V | n \vec{k} \rangle$ nehmen ab, und der resultierende Widerstand wird geringer (siehe Tabelle 5.1). Für solche Versetzungsdichten sind auch Wechselwirkungen zwischen den Versetzungen zu erwarten.

Auf die Tatsache, daß das Fernfeld einer Versetzung für die Streuwirkung unwesentlich ist, hat auch *Watts* [29] hingewiesen. Die Diplomarbeiten von *Häberlen* [16] und *Schindler* [25] konnten diesen Sachverhalt ebenfalls reproduzieren.

¹ Die berechneten Werte dieser Komponenten sind um 13 Größenordnungen kleiner als die Diagonalkomponenten, also ≈ 0 im Rahmen der Rechengenauigkeit.

5.1 Zur Behandlung der Transportgleichung

Da die Proportionalität bei etwa $n_{\text{disl}} = 10^{13}/\text{cm}^2$ endet, ergibt sich $R_{\text{cut}}^{\text{max}} \approx 18 \text{ \AA}$, was ungefähr fünf Gitterkonstanten entspricht.

Die Streuung würde also hauptsächlich in einem Zylinder mit einem Radius von fünf Gitterkonstanten um die Versetzungslinie erfolgen.

Dieser Wert für $R_{\text{cut}}^{\text{max}}$ ist jedoch deutlich zu niedrig, da in so geringem Abstand von der Versetzungslinie die Verzerrung zu stark ist, um mit den getroffenen, linearen Näherungen behandelt zu werden. Die Annahme, der Versetzungskern dürfe vernachlässigt werden, wäre unhaltbar.

Auch die extrem geringen Abweichungen² von der Linearität zwischen 10^7 und 10^{12} Versetzungen pro cm^2 sind ungewöhnlich und stehen im Widerspruch zu *Häberlen* [16] und *Schindler* [25].

Dieses Verhalten liegt an den Gittersummen $\sigma_{xx}(\vec{q}, \nu)$ bzw. $\sigma_{xz}(\vec{q}, \nu)$ aus (4.62), wie im folgenden gezeigt wird.

Für alle Richtungen \vec{q}^o haben die Gittersummen für $|\vec{q}| \approx 0$ qualitativ das gleiche Verhalten. Ausgehend von $\sigma(\vec{q} = 0) = 0$ steigt ihr Wert etwa linear mit $|\vec{q}|$ zu einem Extremum an, das bei $|\vec{q}_{\text{max}}| \sim \sqrt{n_{\text{disl}}}$ liegt und dessen Höhe $\sigma(\vec{q}_{\text{max}})$ proportional zu $1/\sqrt{n_{\text{disl}}}$ ist. Nach dem Maximum fallen die Gittersummen etwa wie $1/|\vec{q}|^2$ ab.

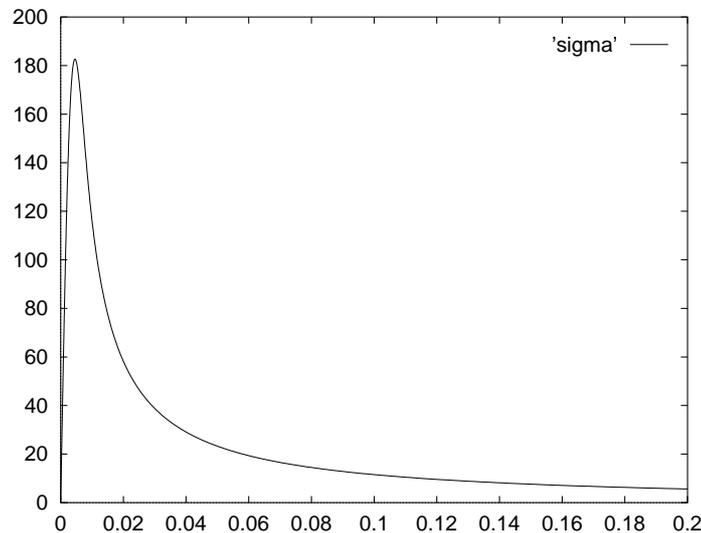


Abbildung 5.1 Charakteristischer Verlauf von $\sigma(\vec{q})$ gegen $|\vec{q}|$ in der Umgebung von $\vec{q} = 0$.

Für $\sigma_{xx}(\vec{q}, \nu)$ und $\sigma_{xz}(\vec{q}, \nu)$ $\nu = 0, 1$ erhält man das gleiche Verhalten :

ein ausgeprägtes Extremum der Höhe $\sigma(\vec{q}_{\text{max}}) \sim 1/\sqrt{n_{\text{disl}}}$ bei $|\vec{q}_{\text{max}}| \sim \sqrt{n_{\text{disl}}}$.

² erst in der 7. Dezimalstelle

Das Auftreten des Extremums verursacht Probleme, wenn die Übergangswahrscheinlichkeiten und damit die Gittersummen auf einem diskreten \vec{k}_i -Raster ausgewertet werden.

Für $\vec{k}_j = \vec{k}_i$ erhält man $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}' = \vec{k}_i - \vec{k}_j = 0$, was zu $\sigma(\vec{q} = 0) = 0$ führt. Da das Netz eine gewisse Maschenweite hat, liegen die Punkte $\vec{k}_j \neq \vec{k}_i$ in einem nicht verschwindenden Abstand von \vec{k}_i , so daß die unmittelbare Umgebung von $\vec{q} = 0$ nicht abgetastet wird. Man kann ein $q_{\min} := \min_{i \neq j} |\vec{k}_i - \vec{k}_j| > 0$ definieren, welches darüber entscheidet, ob das \vec{k}_i -Raster fein genug für eine bestimmte Versetzungsdichte ist.

Für $q_{\min} \ll q_{\max}$ wird der Verlauf des Extremums von den \vec{k}_i -Punkten gut erfaßt, für $q_{\min} > q_{\max}$ liegt der Peak gänzlich innerhalb der ersten Masche, wird dadurch übersehen und durch $\sigma(\vec{q} = 0) = 0$ ersetzt. Da die Lage des Peaks mit sinkender Versetzungsdichte immer näher an $\vec{q} = 0$ heranrückt, gibt es für jedes \vec{k}_i -Raster eine minimale Versetzungsdichte unterhalb derer die Maschenweite zu grob wird, um die Gittersummen korrekt wiederzugeben.

Die Rechenergebnisse deuten darauf hin, daß diese Grenze schon bei $n_{\text{disl}} = 10^{12}/\text{cm}^2$ erreicht ist. Bei niedrigeren Versetzungsdichten werden die Peaks gänzlich ignoriert.

Häberlen [16] und *Schindler* [25] benutzten das Variationverfahren von *Enskog* und *Kohler* [20] zur Lösung der Transportgleichung. Der damit verbundene Rechenaufwand ist etwa 500-mal größer³ als bei der diskreten Lösung der Transportgleichung nach Abschnitt 3.2 bzw. 4.6, dafür können jedoch die Peaks der Gittersummen relativ einfach analytisch approximiert werden.

Eine entsprechende Behandlung der Gittersummen im hier verwendeten Verfahren wäre sehr aufwendig; z.B. müßte man auf der Fermifläche ein Stützstellenraster einführen, das von der Versetzungsdichte abhängt.

Während sich, durch das Abschneiden der Peaks, bei den hier durchgeführten Rechnungen die Widerstands- und Leitfähigkeitswerte zwischen $n_{\text{disl}} = 10^7/\text{cm}^2$ und $n_{\text{disl}} = 10^{12}/\text{cm}^2$ nicht mehr ändern, variieren sie bei *Häberlen* [16] und *Schindler* [25] noch um etwa 25%. Dadurch gibt *Häberlen* die Versetzungsdichte, unterhalb der keine Abweichung von der Proportionalität auftritt, nicht mit $n_{\text{disl}} = 10^{13}/\text{cm}^2$, sondern mit $n_{\text{disl}} = 10^{11}/\text{cm}^2$ an, was zu einem wirksamen Zylinderradius von $R_{\text{cut}}^{\text{max}} \approx 45$ Gitterkonstanten führt. Dieser Wert ist realistischer und läßt eine Vernachlässigung des Versetzungskerns zu.

³ ohne analytische Approximation der Peaks der Gittersummen

5.2 Vergleich mit dem Experiment

In den experimentellen Arbeiten wird i.a. nicht zwischen Schrauben- und Stufenversetzungen unterschieden. Um den Anteil des elektrischen Restwiderstands zu bestimmen, der von Versetzungen verursacht wird, untersucht man die Änderung des Widerstands, wenn sich durch Kaltverformung oder bei der Erholung nach Kaltverformung die Versetzungsdichte ändert. Man erhält dadurch einen Wert für die Ableitung $\partial\bar{\rho}/\partial n_{\text{disl}}$, die im Proportionalitätsbereich annähernd konstant ist.

Die wesentliche Quelle von Ungenauigkeiten bei diesem Verfahren ist die Bestimmung der Versetzungsdichten [3].

Während für die Berechnung von einer Temperatur von 0 K ausgegangen wurde, fanden die Messungen in der Regel bei 4.2 K statt. Die Widerstandsänderung aufgrund dieser Temperaturdifferenz ist jedoch unwesentlich.

n_{disl}	$\bar{\rho}$ in $10^{-19} \Omega \text{ cm}^3$	Quelle
$10^9 \dots 10^{10}/\text{cm}^2$	1.3 ± 0.1	Rider, Foxon [24]
$2 \dots 4 \cdot 10^7/\text{cm}^2$	3.0 ± 1.5	Basinski, Dugdale [3]
$3.69 \cdot 10^8/\text{cm}^2$	5.88	Yoshinaga ⁴ [30]

Tabelle 5.2 : Überblick über einige experimentelle Werte für den spezifischen, versetzungsbezogenen Widerstand

Die Mehrheit der Messungen ergeben für den versetzungsbezogenen, mittleren Widerstand einen Wert von $\bar{\rho} = 1 \dots 2 \cdot 10^{-19} \Omega \text{ cm}^3$, bzw. für die versetzungsbezogene, mittlere Leitfähigkeit $\bar{\sigma} = 5 \dots 10 \cdot 10^{18} \Omega^{-1} \text{ cm}^{-3}$.

Obwohl eine Versetzung ein stark anisotroper Gitterfehler ist, wurde in der Regel $\alpha \leq 2$ gefunden [3, 28], falls das Experiment eine Bestimmung der Anisotropie α der Tensoren erlaubte.

Es bestehen also beträchtliche Abweichung zwischen den in dieser Arbeit berechneten Werten und den experimentell gefundenen.

Die hier festgestellte, unendlich hohe Anisotropie α (siehe (4.100)) wurde auch von anderen theoretischen Berechnungen gefunden [28]. Andererseits ist es experimentell schwierig, eine Probe mit gesichert anisotroper Verteilung der Versetzungen zu erzeugen.

⁴ keine Angabe von Fehlergrenzen

Die deutliche Abweichung der berechneten Widerstands- und Leitfähigkeitswerte von den experimentell gefundenen (vgl. Tabellen 5.1 und 5.2), kann zum Teil auf der fehlenden experimentellen Trennung von Schrauben- und Stufenversetzungen beruhen.

Ein sicherer Grund für eine Überschätzung des Widerstands in den vorliegenden Berechnungen ist die Vernachlässigung der Peaks der Gittersummen.

Kleine Werte des Vektors $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ entsprechen der Vorwärtsstreuung der Elektronen; ihre Ausbreitungsrichtung im Kristall ändert sich nicht wesentlich. Da die Gittersummen für diese \vec{q} -Werte einen Peak aufweisen, treten solche Übergänge mit größerer Wahrscheinlichkeit ein.

Wenn diese Peaks vom \vec{k}_i -Gitter nicht erfaßt werden, und nur der Fall $\vec{q} = 0$ ausgewertet wird, der wegen $\sigma(\vec{q} = 0) = 0$ mit der Wahrscheinlichkeit Null eintritt, wird die Möglichkeit der Vorwärtsstreuung in der Transportgleichung unterschlagen.

Da deswegen nur größere Werte von $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ wahrscheinlich sind, wird die Streuwirkung der Schraubenversetzung und damit auch deren spezifischer Widerstand überschätzt.

Die Vernachlässigung nicht-sphärischer Anteile des effektiven Ein-Teilchen-Potentials im Inneren der APW-Kugel, die dazu führt, daß der Innenraum zur Streuung nicht beiträgt (siehe Abschnitt 4.2), dürfte eher zu einer Unterschätzung der Übergangswahrscheinlichkeiten führen, wodurch bei Berücksichtigung nicht-sphärischer Anteile ein höherer Widerstand zu erwarten ist.

6 Zusammenfassung

Obwohl die Berechnung des spezifischen Widerstands von Schraubenversetzungen zu keiner guten Übereinstimmung mit dem Experiment führte, gelang es in dieser Arbeit, einige neue Erkenntnisse über die Streuung von Blochelektronen an Schraubenversetzungen zu gewinnen.

Während in früheren Arbeiten [16, 25] das Deformationspotential aus effektiven Ein-Teilchen-Potentialen zu Verzerrungsstärken von $\epsilon = O(10^{-2})$ berechnet wurde, konnte gezeigt werden, daß Ein-Teilchen-Potentiale mit Verzerrungen von $\epsilon = O(10^{-4})$ genauere Werte für das Deformationspotential liefern, ohne daß Stellenschwund eintritt. Zudem sind diese schwach verzerrten Potentiale schneller selbstkonsistent zu bestimmen, da man durch Interpolation vorhandener Potentiale bereits gute Startdaten erhält.

Der Anzahl ebener Wellen im Ansatz der MAPW-Wellenfunktionen konnte entscheidende Bedeutung bei der Bestimmung des Deformationspotentials zugeschrieben werden. Es wurde gezeigt, daß es unerlässlich ist, diese Anzahl bei allen zu vergleichenden Potentialen konstant zu halten.

Andernfalls würde die Änderung des Ansatzraums die selbstkonsistenten Potentiale so sehr beeinflussen, daß die Bestimmung des Deformationspotentials als Ableitung $\partial V(\epsilon, \vec{r})/\partial \epsilon$ nach der Verzerrung jede Genauigkeit eingebüßt hätte.

Unter diesem Gesichtspunkt ist das von *Schindler* [25] verwendete Deformationspotential höchst fragwürdig, da er zu dessen Bestimmung von Potentialen mit einem Prozent Verzerrung ausging und die Zahl ebener Wellen nicht beachtete.

Es ist anzunehmen, daß Potentialänderungen aufgrund unterschiedlicher Ansatzräume klein gegenüber den Potentialänderungen aufgrund einer Dilatation des Kristalls sind. Das von *Häberlen* [16] durch Vergleich verschieden dilatierter Kristalle gewonnene Deformationspotential dürfte daher im wesentlichen korrekt sein.

Die diskretisierte Lösungsmethode für die Transportgleichung, die anstelle des herkömmlichen Variationsverfahrens von *Enskog* und *Kohler* [20] verwendet wurde, zeigte neben einer übersichtlicheren Argumentation einen deutlichen Geschwindigkeitsvorteil gegenüber dem Variationsverfahren.

Auch gelang es, mit der Fredholmschen Alternative die Divergenz gewisser Komponenten des Leitfähigkeitstensors exakt zu begründen, so daß dieses Verfahren als vielversprechend zu bezeichnen ist.

Das kritische Verhalten der Gittersummen für $\vec{q} \approx 0$ konnte leider nicht berücksichtigt werden, was zu den überhöhten Widerstandswerten führte.

Es sollte aber in Zukunft möglich sein, diesen Mangel zu beheben.

Die Parametrisierung der Fermifläche in Schnitten senkrecht zur Versetzungslinie macht besonders deutlich, daß nur ein geringer Teil der Elektronen an Umklapp-Prozessen beteiligt ist.

Für die meisten Zustände ändert sich bei einer Streuung die Komponente \vec{k}_{\parallel} des Quasiimpulses in Richtung der Versetzungslinie nicht. Die diskretisierte Lösungsmethode für die Transportgleichung zeigt, daß dies zu unendlicher Leitfähigkeit in Versetzungsrichtung führt – trotz der vorhandenen Umklapp-Prozesse.

Anhang

A Wahl der APW-Radien

Geht man von einer unverzerrten Wigner-Seitz-Zelle mit einer APW-Kugel maximaler Größe aus und unterwirft das Gebilde einer rhomboedrischen oder tetragonalen Verzerrung, so geht die APW-Kugel in ein Ellipsoid über, welches genau in die deformierte Zelle hineinpaßt.



Symbolische Darstellung der Deformation einer Elementarzelle mit APW-Kugel :

1. Fall :

Die APW-Kugel wird zum Ellipsoid verzerrt.

Ein Ellipsoid ist aber, im Gegensatz zu einer Kugel, zur Trennung von Außen- und Innenraum ungeeignet, da seine Verwendung alle Berechnungen deutlich verkomplizieren würde.

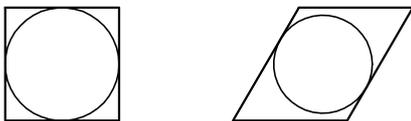
Andererseits kann man die alte APW-Kugel nicht beibehalten, da sie in die deformierte Elementarzelle nicht mehr hineinpaßt.



2. Fall :

Die unverzerrte APW-Kugel ist zu groß.

Eine Möglichkeit das Problem zu lösen besteht darin, in die verformte Zelle eine Kugel maximaler Größe einzupassen, was zu einem ϵ -abhängigen APW-Radius führt.



3. Fall :

Der APW-Radius hängt von ϵ ab.

Unterschiedlich große APW-Kugeln bei konstantem Zellenvolumen verschieben aber die Anteile von Innen- und Außenraum. Da es bei der Berechnung des modifizierten Deformationspotentials als Ableitung des Außenraumpotentials auf die kleinen Potentialveränderungen durch die Verzerrung ankommt, würden dadurch die selbstkonsistenten Potentiale verfälscht.

Um dies zu vermeiden, wurde die kleinste auftretende APW-Kugel – also jene, die zur stärksten Verzerrung gehört – auch für alle anderen Verzerrungsstärken übernommen.



4. Fall :

Der kleinste APW-Radius wird beibehalten.

Für schwächere Verzerrungen berührt sie dann zwar nicht mehr die Wände der Wigner-Seitz-Zelle; dies wurde aber auch nirgendwo gefordert.

B Herleitung des Außenraumpotentials

Nachdem im normalen MAPW-Selbstkonsistenz-Zyklus eine Ortsraum-Darstellung des Außenraumpotentials nicht benötigt wird, da man die Fourierkoeffizienten direkt berechnet, sei hier noch eine kurze Herleitung der Formel (4.7) gegeben, wie sie z.B. auch bei *Bross* und *Eder* [9] zu finden ist.

Ausgangspunkt für die Potentialberechnung ist die Ladungsdichte $\rho_{\text{tot}}(\vec{r})$ der Elektronen, die man aus den Blochzuständen mittels

$$\rho_{\text{tot}}(\vec{r}) := 2 \sum_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (\text{B.1})$$

erhält, wobei die Summe nur über die besetzten Zustände geht ($\mathcal{E}_{n\vec{k}} \leq \mathcal{E}_{\text{F}}$), und der Faktor 2 die Spin-Entartung berücksichtigt.

Im Außenraum II existiert von den Wellenfunktionen $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ nach (4.1) nur der Anteil der ebenen Wellen, womit sich die Dichte zu

$$\begin{aligned} \rho_{\text{PW}}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} 2 \sum_{n\vec{k}, \vec{K}'} v^*(n\vec{k}, \vec{K}') v(n\vec{k}, \vec{K} + \vec{K}') \\ &=: \sum_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \rho_{\text{PW}}(\vec{K}) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

ergibt. Im Innenraum kommt zu $\rho_{\text{PW}}(\vec{r})$ noch der Anteil $\rho_{\text{rad}}(r)$ von $\chi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ hinzu. Dieser ist radialsymmetrisch, so daß $\rho_{\text{rad}}(r)$, zusammen mit dem punktförmigen Atomkern, von außen gesehen wie eine einzige Punktladung wirkt.

Die Stärke dieser Punktladung ergibt sich aus der Ladungsneutralität der Wigner-Seitz-Zelle. Man erhält

$$\begin{aligned} -Q_{\text{PW}} - Q_{\text{rad}} &\stackrel{!}{=} Q_{\text{Kern}}, \\ e \int_{\text{WSZ}} \rho_{\text{PW}}(\vec{r}) d^3 r - Q_{\text{rad}} &= e Z_{\text{Kern}}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned} Q_{\text{Punkt}} &:= Q_{\text{Kern}} + Q_{\text{rad}} = e \int_{\text{WSZ}} \rho_{\text{PW}}(\vec{r}) d^3 r \\ \Rightarrow Q_{\text{Punkt}} &= e \sum_{\vec{K}} \rho_{\text{PW}}(\vec{K}) \int_{\text{WSZ}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} d^3 r = e V_{\text{C}} \rho_{\text{PW}}(\vec{K} = 0). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Der Fourierkoeffizient $\rho_{\text{PW}}(\vec{K} = 0)$ ist der Mittelwert der Ladungsdichte der ebenen Wellen und wird im folgenden mit ρ_0 abgekürzt.

Das elektrostatische Potential dieser Ladungen lässt sich im Außenraum in zwei Anteile zerlegen, deren Quellen jeweils ladungsneutral sind :

- $V_C(\vec{r})$: das Potential der ebenen Wellen ohne den Term zu $\rho_{PW}(\vec{K} = 0)$,
- $V_E(\vec{r})$: das Potential des Gitters der Punktladungen zusammen mit dem kompensierenden Ladungshintergrund des Terms $\rho_{PW}(\vec{K} = 0)$.

Aus der Poissongleichung

$$\Delta V(\vec{r}) = -4\pi e^2 \rho(\vec{r}) \quad (\text{B.5})$$

folgt mit (B.2) für den ersten Potentialanteil

$$V_C(\vec{r}) = 4\pi e^2 \sum_{\vec{K} \neq 0} \frac{\rho_{PW}(\vec{K})}{K^2} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}. \quad (\text{B.6})$$

Die allgemeine Formel

$$V(\vec{r}) = e^2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \quad (\text{B.7})$$

ergibt mit (B.4) für den zweiten Potentialanteil

$$\begin{aligned} V_E(\vec{r}) &= e^2 \rho_0 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - e^2 V_C \rho_0 \sum_{\vec{R}} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} \\ &= e^2 V_C \rho_0 \left[\frac{1}{V_C} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \sum_{\vec{R}} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Mit der Identität

$$\sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r}' - \vec{R}) = \frac{1}{V_C} \sum_{\vec{K}} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}'} \quad (\text{B.9})$$

findet man

$$\begin{aligned} &\left[\frac{1}{V_C} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \sum_{\vec{R}} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} \right] \\ &= \frac{1}{V_C} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r}' - \vec{R}) d^3 r' \\ &= \frac{1}{V_C} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{1}{V_C} \sum_{\vec{K}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \\ &= -\frac{1}{V_C} \sum_{\vec{K} \neq 0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r'. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Um die Darstellung (4.7) zu erhalten, bleibt zu zeigen, daß

$$-\frac{1}{V_C} \sum_{\vec{K} \neq 0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' = -\frac{4\pi}{V_C} \sum_{\vec{K} \neq 0} \frac{e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}}{K^2} \quad \forall \vec{r} \in \mathbb{R}^3 \quad (\text{B.11})$$

erfüllt ist.

Die letzte Summe ist nicht absolut konvergent, weswegen wir einen konvergenzerzeugenden Faktor $e^{-\vec{K}^2 \eta}$ mit $\eta > 0$ einführen und dessen Grenzwert $\lim \eta \rightarrow 0$ betrachten, der gerade die ursprüngliche Summe ergibt. Mit diesem Faktor läßt sich ein Potential

$$V_\eta(\vec{r}) := e^2 V_C \rho_0 \left[-\frac{4\pi}{V_C} \sum_{\vec{K} \neq 0} \frac{e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}}{K^2} e^{-\vec{K}^2 \eta} \right] \quad (\text{B.12})$$

definieren, dessen zugehörige Ladungsdichte $\rho_\eta(\vec{r})$ man aus der Poissongleichung (B.5) zu

$$\rho_\eta(\vec{r}) = -\rho_0 \sum_{\vec{K} \neq 0} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} e^{-\vec{K}^2 \eta} \quad (\text{B.13})$$

bestimmt. Berechnet man aber mit (B.7) das Potential \hat{V}_η dieser Ladungsdichte, ergibt sich

$$\hat{V}_\eta(\vec{r}) = -e^2 \rho_0 \sum_{\vec{K} \neq 0} e^{-\vec{K}^2 \eta} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \quad (\text{B.14})$$

und daraus im Grenzwert

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \hat{V}_\eta(\vec{r}) =: \hat{V}_0(\vec{r}) = e^2 V_C \rho_0 \left[-\frac{1}{V_C} \sum_{\vec{K} \neq 0} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \right]. \quad (\text{B.15})$$

Mit der Darstellung (B.10) von [...] gilt somit $V_E(\vec{r}) \equiv \hat{V}_0(\vec{r})$, also

$$V_E(\vec{r}) = -4\pi e^2 \rho_0 \sum_{\vec{K} \neq 0} \frac{e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}}{K^2}. \quad (\text{B.16})$$

$V_E(\vec{r})$ ist gerade das Ewaldpotential, das in Formel (4.7) eingeht.

Zusätzlich zu den Austausch- und Korrelationseffekten ist im verzerrten Fall auch noch die Verzerrungsabhängigkeit der Fermienergie zu berücksichtigen. Damit erhält man aus (B.6) und (B.16) die Gleichung (4.8)

$$V_{II}(\epsilon, \vec{r}) = 4\pi e^2 \sum_{\vec{K}_\epsilon \neq 0} \frac{\rho_{\text{PW}}(\epsilon, \vec{K}_\epsilon)}{K_\epsilon^2} e^{i\vec{K}_\epsilon \cdot \vec{r}} - 4\pi e^2 \rho_0(\epsilon) \sum_{\vec{K}_\epsilon \neq 0} \frac{1}{K_\epsilon^2} e^{i\vec{K}_\epsilon \cdot \vec{r}} + \mu_{xc} \left[\sum_{\vec{K}_\epsilon} \rho_{\text{PW}}(\epsilon, \vec{K}_\epsilon) e^{i\vec{K}_\epsilon \cdot \vec{r}} \right] - \mathcal{E}_F(\epsilon). \quad (\text{B.17})$$

C Fermischnitte

C.1 Lage der Schnitte in der 1. Brillouin-Zone

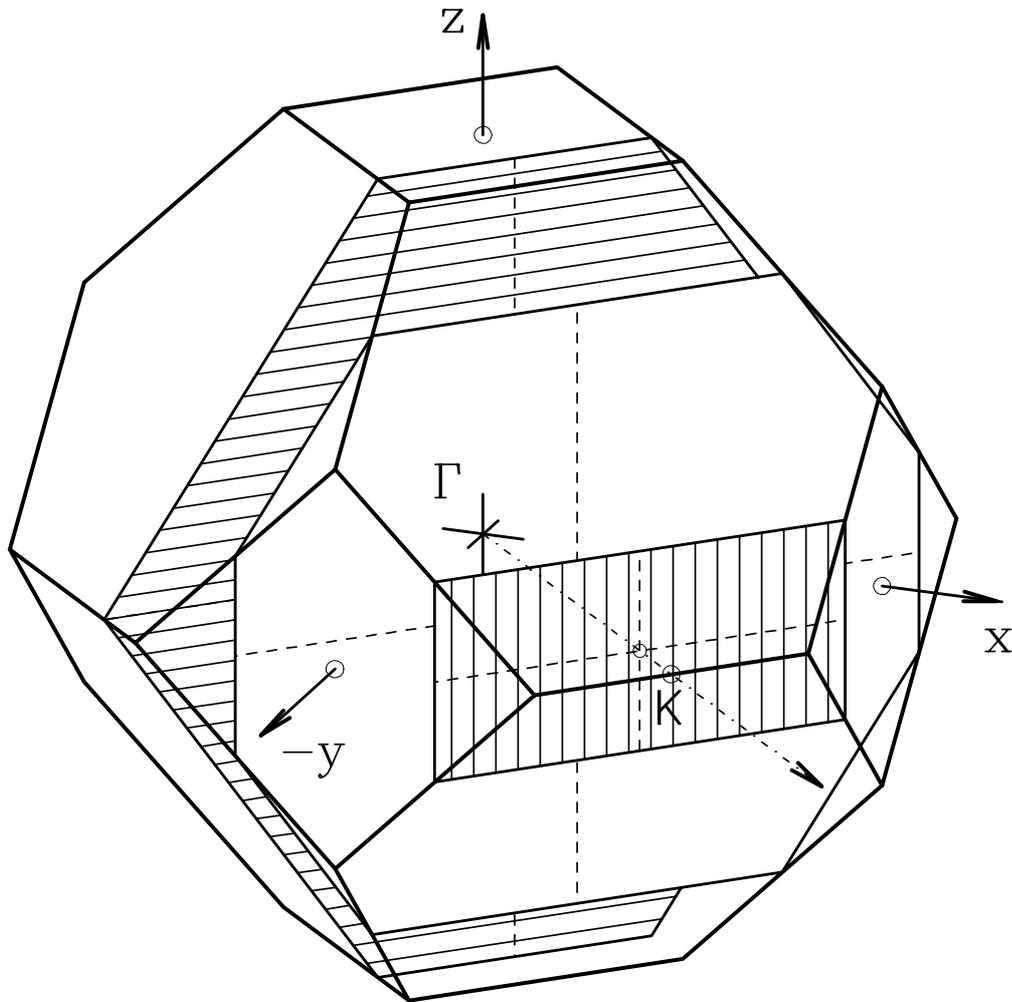


Abb C.1 : 1. Brillouin-Zone eines fcc-Kristalls mit drei exemplarischen Schnitten senkrecht zur Versetzungsrichtung (K -Richtung, strichpunktiert).

Man beachte die verschiedenen Formen der Schnittflächen (Sechseck, Achteck, Rechteck) für unterschiedliche Scharparameter $\vec{k} \cdot \vec{b}$ der Ebene.

Innerhalb jeder Schnittebene gibt es zwei Spiegelsymmetrien (gestrichelt).

Die Achsen x, y, z gehören zu dem versetzungsbezogenen, kartesischen Koordinatensystem aus (4.97).

C.2 Auswahl und Berechnung der Schnitte

Die Schnittebenen lassen sich durch den Scharparameter $\vec{k} \cdot \vec{b}$ beschreiben.

Da $\vec{k}_{\max} \cdot \vec{b} \approx 1.033\pi$ gilt (siehe Abschnitt 4.5.1), wurde als größter Scharparameter $\vec{k} \cdot \vec{b} = \pi$ gewählt. Wegen $\vec{q} \cdot \vec{b} \in 2\pi\mathbb{Z}$ kann von dieser Ebene aus Streuung in sich selbst und in die Ebene $\vec{k}' \cdot \vec{b} = -\pi$ erfolgen. Letztere geht aus $\vec{k} \cdot \vec{b} = \pi$ durch Inversion hervor.

Da die Fermifläche und die Blochzustände auf ihr für den unverzerrten Fall berechnet wurden (Störungsrechnung 1. Ordnung), haben sie die volle kubische Symmetrie. Jeweils vier der 48 zueinander symmetrischen \vec{k} -Punkte liegen in derselben Ebene. Sie gehen auseinander durch Spiegelung an den in Anhang C.1 eingezeichneten Achsen hervor. Man kann die Berechnung des Schnittverlaufs daher auf den ersten Quadranten jeder Ebene beschränken. Zudem kann man die Inversion ausnützen und nur Ebenen mit Scharparameter $\vec{k} \cdot \vec{b} \geq 0$ betrachten.

Zur numerischen Lösung der Transportgleichung erwies sich eine Aufteilung des Bereichs $\vec{k} \cdot \vec{b} = 0 \dots \pi$ in 13 Schnittebenen $\{\vec{k} \cdot \vec{b} = \frac{0}{12}\pi \dots \frac{12}{12}\pi\}$ als ausreichend.

Bei dieser Aufteilung können Umklapp-Prozesse (d.h. $\vec{q} \cdot \vec{b} \neq 0$) nur in der äußersten (13.) Schnittebene auftreten, denn für \vec{k} in der 12. Ebene würden mit

$$\vec{k} \cdot \vec{b} - \vec{k}' \cdot \vec{b} = \frac{11}{12}\pi - \vec{k}' \cdot \vec{b} \stackrel{!}{=} 2\pi \quad \Rightarrow \quad \vec{k}' \cdot \vec{b} = -\frac{13}{12}\pi < -1.033\pi \quad (\text{C.1})$$

die Zustände \vec{k}' schon außerhalb der Fermifläche liegen.

Die iterative Bestimmung der Punkte auf der Fermifläche sei noch kurz erläutert.

In den Zylinderkoordinaten, die in Abschnitt 4.6.2 eingeführt wurden, beschreiben die in Abschnitt 4.6.1 angegebenen Schnitte eine Parametrisierung der Fermifläche als $\rho = \rho(\hat{z}, \varphi)$.

Die Schnittebenen sind darin durch $\hat{z} = \text{const.}$ ausgezeichnet.

Auf einer bestimmten Schnittebene sei \vec{k}_{alt} im ersten Quadranten zum Winkel $\varphi \in [0; \frac{\pi}{2}]$ ein Punkt in der Nähe der Fermifläche.

Zu \vec{k}_{alt} berechnet man mit Hilfe des MAPW-Verfahrens die Energie $\mathcal{E}_{\vec{k}_{\text{alt}}}$ und den Energiegradienten $\vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_{\text{alt}}}$ für das Band n , welches der Fermi-Energie am nächsten ist.

Daraus gewinnt man mittels

$$\vec{k}_{\text{neu}} := \vec{k}_{\text{alt}} + \vec{n}_{\varphi}^o \cdot \Delta k \quad \text{mit} \quad \Delta k := \frac{\mathcal{E}_{\text{F}} - \mathcal{E}_{\vec{k}_{\text{alt}}}}{\vec{\text{grad}}_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}_{\text{alt}}} \cdot \vec{n}_{\varphi}^o} \quad (\text{C.2})$$

eine verbesserte Approximation der Fermifläche in der gesuchten Richtung. \vec{n}_φ^o ist dabei der Einheitsvektor vom Mittelpunkt der Schnittebene in Richtung des vorgegebenen Winkels φ . Dies garantiert, daß \vec{k}_{neu} und \vec{k}_{alt} auf derselben Schnittebene liegen.

Dieser \vec{k}_{neu} -Vektor geht nun wieder in die Iteration ein, und man gelangt schon nach wenigen Iterationsschritten mit hoher Genauigkeit auf die Fermifläche.

In den Zylinderkoordinaten betrachtet, wird zu vorgegebenem \hat{z} und φ der Radius $\rho(\hat{z}, \varphi)$ iterativ bestimmt.

D Behandlung der Transportgleichung als lineares Gleichungssystem

Ausgehend von (3.32) kann man die diskretisierte Transportgleichung auch als drei lineare Gleichungssysteme

$$\underline{\psi}_\kappa - \mathbf{V}\underline{\psi}_\kappa = \mathbf{V}'\underline{\psi}_\kappa = \underline{R}_\kappa \quad \text{mit} \quad \mathbf{V}' := \mathbf{1} - \mathbf{V} \quad \kappa = 1, 2, 3 \quad (\text{D.1})$$

auffassen. Dies entspricht dem eigentlichen Nyströmschen Verfahren [2].

Die Unterscheidung der drei \vec{E} -Richtungen $\kappa = 1, 2, 3$ soll einstweilen entfallen.

Die Eigenschaft von \mathbf{V} , in NZ einzelne Blöcke zu zerfallen (siehe Abschnitt 4.6), überträgt sich auch auf \mathbf{V}' . Damit kann man das lineare Gleichungssystem (D.1) in NZ lineare Gleichungssysteme

$$\mathbf{V}'^{\alpha\alpha} \underline{\psi}^\alpha = \underline{R}^\alpha \quad \alpha = 1, \dots, NZ \quad (\text{D.2})$$

mit entsprechend niedrigerer Dimension zerlegen. Die Lösung $\underline{\psi}$ der Transportgleichung (D.1) ist dann über die $\underline{\psi}^\alpha$ aus (D.2) abschnittsweise definiert.

Der Versuch, diese Gleichungssysteme numerisch zu lösen, scheitert zuerst an der Singularität der Matrizen $\mathbf{V}'^{\alpha\alpha}$, da jede einen Rangdefekt von 1 aufweist.

Die Lösungen $\underline{\psi}^\alpha$ von (D.2) sind nicht eindeutig, sondern mit den Lösungen $\underline{\phi}_0^\alpha$ der homogenen Gleichungssysteme

$$\mathbf{V}'^{\alpha\alpha} \underline{\phi}_0^\alpha = 0 \quad \alpha = 1, \dots, NZ \quad (\text{D.3})$$

ist der ganze eindimensionale, affine Unterraum

$$\left\{ \underline{\psi}^\alpha \mid \underline{\psi}^\alpha = \underline{\psi}_0^\alpha + \mu \cdot \underline{\phi}_0^\alpha, \quad \mu \in \mathbb{R} \right\} \quad (\text{D.4})$$

Lösungsraum von (D.2).

Für den Leitfähigkeitstensor erhält man mit dem N -dimensionalen Skalarprodukt $\underline{a} \bullet \underline{b}$ aus (3.33)

$$\sigma_{ij} \sim \underline{\psi}_j \bullet \underline{R}_i. \quad (\text{D.5})$$

Wenn die Addition der homogenen Lösung $\underline{\phi}_0$ zur inhomogenen Lösung $\underline{\psi}_j$ den Wert einer Komponente des Leitfähigkeitstensors ändert, so divergiert diese Komponente, da durch Addition eines beliebigen Vielfachen von $\underline{\phi}_0$ zu $\underline{\psi}_j$ die Komponente jede Grenze übersteigen kann.

Wegen

$$\underline{\phi}_0 \bullet \underline{R}_1 = \underline{\phi}_0 \bullet \underline{R}_2 = 0 \quad \text{und} \quad \underline{\phi}_0 \bullet \underline{R}_3 \neq 0 \quad (\text{D.6})$$

haben nur die Tensorkomponenten σ_{ij} endliche Werte, für die $i, j \neq 3$ gilt, also $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{21}$ und σ_{22} , bzw. $\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{yx}$ und σ_{yy} .

Um diese Komponenten berechnen zu können, ist der Rangdefekt der Matrizen $\mathbf{V}^{\alpha\alpha}$ zu beheben.

Dazu kann man z.B. die Forderung

$$\underline{\psi}^\alpha \bullet \underline{\phi}_0^\alpha \stackrel{!}{=} 0 \quad (\text{D.7})$$

stellen, die aus dem Unterraum (D.4) ein eindeutiges Element $\underline{\psi}_0^\alpha$ herausgreift. Mit dieser zusätzlichen Bedingung läßt sich die singuläre $N \times N$ -Matrix $\mathbf{V}^{\alpha\alpha}$ zu einer regulären $(N-1) \times (N-1)$ -Matrix $\mathbf{V}'^{\alpha\alpha}$ reduzieren, mit der das Gleichungssystem (D.2) gelöst werden kann.

Da ein homogener Lösungsanteil keinen Einfluß auf die betrachteten Tensorkomponenten hat, genügt die so gewonnene Lösung $\underline{\psi}_0^\alpha$ zur Festlegung des Leitfähigkeitstensors.

Zur Bestimmung der homogenen Lösung $\underline{\phi}_0^\alpha$ formt man (D.3) zu

$$\begin{aligned} \mathbf{V}'^{\alpha\alpha} \underline{\phi}_0^\alpha &= (\mathbf{1} - \mathbf{V}^{\alpha\alpha}) \underline{\phi}_0^\alpha = 0 \\ \Rightarrow \underline{\phi}_0^\alpha &= \mathbf{1} \cdot \mathbf{V}^{\alpha\alpha} \underline{\phi}_0^\alpha \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

um und erhält $\underline{\phi}_0^\alpha$ als Eigenvektor der Matrix $\mathbf{V}^{\alpha\alpha}$ zum Eigenwert $\lambda = 1$, d.h.

$$\underline{\phi}_0^\alpha \equiv \underline{\varphi}_1^\alpha \quad \text{mit } \underline{\varphi}_\lambda^\alpha \text{ aus (4.96)}. \quad (\text{D.9})$$

Dies stellt die Verbindung zu dem Verfahren her, das in den Abschnitten 3.2 und 4.6 beschrieben wurde.

Die Fredholmsche Alternative besagt nämlich, daß die Transportgleichung, da es Eigenvektoren $\underline{\varphi}_1$ zum Eigenwert $\lambda = 1$ gibt, nur für solche Inhomogenitäten \underline{R}_K lösbar ist, die dazu orthogonal sind, d.h.

$$\underline{\varphi}_1 \bullet \underline{R}_K \stackrel{!}{=} 0, \quad (\text{D.10})$$

und führt damit genau auf die Gleichung (D.6).

Da zu Lösung von (D.3) die Eigenvektoren von $\mathbf{V}^{\alpha\alpha}$ zu bestimmen sind, bietet hier das Nyströmsche Verfahren keinen Rechenzeitvorteil gegenüber dem Weg, der in Abschnitt 3.2 und 4.6 beschritten wurde. Die Fredholmsche Alternative als Kriterium für die Lösbarkeit der Transportgleichung erscheint jedoch eleganter und klarer als die Behandlung der Singularitäten der Matrizen $\mathbf{V}^{\alpha\alpha}$.

Beide Verfahren reduzieren den Rechenaufwand gegenüber dem Variationsverfahren von *Enskog* und *Kohler* [20] um mindestens zwei Größenordnungen, bei einer potentiell höheren Genauigkeit, falls es gelingt, das in Abschnitt 5.1 besprochene Verhalten der Gittersummen auch hier zu berücksichtigen.

Literatur

- [1] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin : *Solid State Physics*
Holt, Rinehart and Winston (1976).
- [2] K.E. Atkinson : *A Survey of Numerical Methods for the Solution of Fredholm Integral Equations of the Second Kind*
Philadelphia PA : Society for Industrial and Applied Mathematics (1976).
- [3] Z.S. Basinski, J.S. Dugdale : *Electrical resistivity due to dislocations in highly purified copper*
Phys. Rev. B **32**, Nr. 4 S. 2149 (1984).
- [4] H. Bross : *Ein neues Verfahren zur Berechnung von Einelektronenzuständen in Kristallen*
Phys. kondens. Materie **3** S. 119 (1964).
- [5] H. Bross : *Theorie der galvanometrischen Erscheinungen bei beliebigen Energieflächen und anisotroper Streuung der Leitungselektronen*
Phys. kondens. Materie **3** S. 349 (1965).
- [6] H. Bross : *Verallgemeinerung der MAPW-Methode für ein beliebiges Potential*
Helv. Phys. Acta **41** S. 717 (1968).
- [7] H. Bross : *Special directions for surface integrals in cubic lattices*
(in Vorbereitung)
- [8] H. Bross, G. Bohn : *On the Theory of Electrical Resistivity of Polyvalent Metals*
Phys. Stat. Sol. **20** S. 277 (1967).
- [9] H. Bross, R. Eder : *Self-Consistent MAPW Calculation with a Warped Muffin-Tin Potential*
Phys. Stat. Sol. (b) **144** S. 175 (1987).
- [10] H. Bross, O. Häberlen : *The scattering of electrons by dislocations in Al*
J. Phys.: Condensed Matter **5** S. 7687 (1993).
- [11] R. Courant, D. Hilbert : *Methoden der Mathematischen Physik I*
Springer-Verlag (1968).
- [12] A.O. Donghol-Diallo, E. Mrosan, P. Ziesche : *Model Calculation of the Dislocation Resistivity for Copper*
Phys. Stat. Sol. (b) **162** S. 237 (1990).

- [13] P.P. Ewald : *Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale*
Ann. Phys. **64**, Nr. 4 S. 253 (1920).
- [14] S. Flügge : *Handbuch der Physik; Band VII, Teil 1 Kristallphysik I*
Springer-Verlag (1955).
- [15] O. Gunnarson, B.I. Lundqvist : *Exchange and correlation in atoms, molecules, and solids by the spin-density-functional formalism*
Phys. Rev. B **13**, Nr. 10 S. 4274 (1976).
- [16] O. Häberlen : *Elektronenstreuung an Kristalldilatationen*
Diplomarbeit an der LMU München (1989).
- [17] L. Hedin, B.I. Lundqvist : *Explicit local exchange-correlation potentials*
J. Phys. C : Solid St. Phys. **4** S. 2064 (1971).
- [18] H. Ibach, H. Lüth : *Festkörperphysik*
Springer-Verlag (1990).
- [19] C. Kittel : *Einführung in die Festkörperphysik*
R. Oldenbourg Verlag (1973).
- [20] M. Kohler : *Behandlung von Nichtgleichgewichtsvorgängen mit Hilfe eines Extremalprinzips*
Z. Physik **124** S. 772 (1948).
- [21] E. Kröner : *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*
Springer-Verlag (1958).
- [22] A. Messiah : *Quantum Mechanics II*
North-Holland Publishing Company (1964).
- [23] J. Rammer, H. Smith : *Quantum field-theoretical methods in transport theory of metals*
Rev. Mod. Phys. **58**, Nr. 2 S. 323 (1986).
- [24] J.G. Rider, C.T.B. Foxon : *An Experimental Determination of the Electrical Resistivity of Dislocations in Copper*
Phil. Mag. **16** S. 1133 (1967).
- [25] F.J. Schindler : *Streuung von Elektronen an Schraubenversetzungen*
Diplomarbeit an der LMU München (1991).
- [26] A. Seeger, H. Bross : *Elektronentheoretische Untersuchungen über Fehlstellen in Metallen; IX. Der elektrische Widerstand von Stufenversetzungen*
Z. Naturf. **15a**, Nr. 8 S. 663 (1960).

- [27] A. Sommerfeld : *Mechanik der deformierbaren Medien*
Akademische Verlagsgesellschaft Leipzig (1964).
- [28] B.R. Watts : *The structure factor of a dislocated metal and why its electrical resistivity may be approximately isotropic*
J. Phys. F : Met. Phys. **17** S. 1703 (1987).
- [29] B.R. Watts : *Calculation of electrical resistivity produced by dislocations in various metals*
J. Phys. F : Met. Phys. **18** S. 1197 (1988).
- [30] H. Yoshinaga : *Measurements of the Anisotropy of the Dislocation Resistivity in Au, Ag, and Cu*
Phys. Stat. Sol. **18**, Nr. 1 S. 625 (1966).

Danksagung

An erster Stelle möchte ich meinen Eltern danken, die mir das Studium der Physik ermöglicht haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. Bross, der meine Arbeit ausgezeichnet betreute, sich jederzeit für Gespräche Zeit nahm und mir neben den selbstkonsistenten Potentialdaten auch diverse Computerprogramme zur Verfügung stellte.

Weiter danke ich Herrn Dr. H. Stöhr, der während des Auslandsaufenthalts von Herrn Prof. Dr. H. Bross die Betreuung meiner Diplomarbeit vor Ort übernahm, für viele hilfreiche und interessante Diskussionen.

Bei allen Angehörigen des Lehrstuhls möchte ich mich für die freundliche und hilfsbereite Arbeitsatmosphäre bedanken.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Diplomarbeit selbständig angefertigt und keine anderen Hilfsmittel und Quellen als die angegebenen verwendet zu haben.

München, den 20.03.1995
