

**Elektron-Phonon-Wechselwirkung
und
der temperaturabhängige elektrische
Widerstand von Kupfer**

Dissertation
der Fakultät für Physik
der
Ludwig Maximilians Universität
München

vorgelegt von
Alexander Dunaevskiy
aus Moskau

München, den 1. Oktober 2002

1. Gutachter: Prof.Dr. H.Bross
2. Gutachter: Prof.Dr. J.von Delft

Tag der mündlichen Prüfung: 19.12.2002

Zusammenfassung

In dieser Arbeit ist die Temperaturabhängigkeit des spezifischen elektrischen Widerstandes von Kupfer theoretisch untersucht worden und mit den theoretischen Ergebnissen anderer Autoren und den vorliegenden experimentellen Daten verglichen worden.

Der spezifische elektrische Widerstand ist durch die Lösung der linearisierten Boltzmann-Gleichung mit anisotropen Übergangswahrscheinlichkeiten nach dem Kohlerschen Variationsprinzip berechnet worden. Für die Berechnung ist ein originärer gitterperiodischer und Raumgruppen-symmetrischer Ansatz verwendet worden.

Zur Bestimmung der anisotropen Übergangswahrscheinlichkeiten sind die MAPW-Wellenfunktionen und Einteilchenenergien im Rahmen der zeitabhängigen Störungsrechnung erster Ordnung herangezogen worden.

Die Vielteilchenabschirmung ist über ein selbstkonsistentes Lösungsverfahren der Integralgleichung nach der LDA-Näherung berücksichtigt worden. Ihre Bedeutung für den Tieftemperaturbereich ist gezeigt worden.

Informationen über Phononen sind mittels harmonischer Näherung und gemessener mechanischer Kopplungskonstanten zwischen den Gitterbausteinen (Gitterdynamik) gewonnen worden.

Die komplexe Form der Fermi-Oberfläche von Kupfer ist bei der Lösung der Boltzmann-Gleichung berücksichtigt worden.

Die Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen	3
1.1 Die adiabatische zeitabhängige Störung	3
1.2 Der MAPW-Ansatz für $\langle \vec{r} n\vec{k} \rangle_0$ innerhalb der zentralen Wigner-Seitz-Zelle	9
1.3 Phononen- und effektive Elektron-Phonon-Wechselwirkung	13
2 Nackte Elektron-Phonon-Wechselwirkungsmatrixelemente	19
2.1 Reduktion der Matrixelemente auf die Integrationen über die zentrale WSZ	19
2.2 Berechnungsstruktur der $\langle n'\vec{k}' \delta V^{\vec{q}} n\vec{k} \rangle$ - Matrixelemente	21
2.3 Die Potentialtheorie und die Berechnung der Teilmatrixelemente I_{i1}	23
2.4 Berechnung der APW-Teilmatrixelemente	25
2.4.1 Explizite Darstellung der MAPW-Wellenfunktion außerhalb des irreduziblen Keils	25
2.4.2 Die Berechnung des APW-Anteils von \vec{I}_1	26
2.4.3 Die Berechnung des APW-Anteils von \vec{I}_2	29
2.4.4 Berechnung des APW-Anteils von I_3	30
3 Austausch-Korrelationseffekte in der Abschirmung	35
3.1 Integralgleichungen der Austausch-Korrelationsabschirmung	35
3.2 Darstellung von $\mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)}$ und $\delta V_c^{\vec{q}(\pm)}$	41
3.3 Die selbstkonsistente Lösung der Abschirmungsgleichungen	43
4 Transporttheorie	75
4.1 Die Boltzmann-Gleichung der Leitungselektronen und die begrenzte Gültigkeit der Relaxationszeitnäherung	75
4.2 Linearisierung der Boltzmann-Gleichung für Leitungselektronen	78
4.3 Lösung der linearisierten Boltzmann-Gleichung und Verknüpfung mit der makroskopischen Physik	83

4.4	Die Enskogsche Lösungsmethode für die linearisierte Boltzmann-Gleichung	86
5	Diskussion der Ergebnisse	91
5.1	Übersicht über die experimentellen Daten	91
5.2	Übersicht über die theoretischen Arbeiten	107
5.3	Ergebnisse der Arbeit	117
	Resumé	127
A	Mathematische Details	129
A.1	Reellwertige Kugelflächenfunktionen	129
A.2	Verallgemeinertes Ewald-Verfahren	130
A.3	Die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion	136
B	Organisation der Berechnungen	137
C	Tabellarische Werte	141
D	Phononen-Paar-Numerierung	153

Einleitung

Thema der Arbeit

Die Elektron–Phonon–Wechselwirkung in Metallen ist trotz der großen Bedeutung für die Theorie der kondensierten Materie unter realistischen Annahmen bis heute nicht vollständig verstanden, da die entsprechenden Berechnungsverfahren mit großen mathematischen und technischen Schwierigkeiten verbunden sind. Wesentliche Phänomene im Festkörper stehen mit der Elektron–Phonon–Wechselwirkung im engen Zusammenhang. Dazu zählen die elektrische Leitfähigkeit, die Wärmeleitfähigkeit, der Peltier–Effekt, die konventionelle Supraleitung und möglicherweise die Hochtemperatur–Supraleitung.

Das Anliegen dieser Arbeit ist es daher, möglichst präzise die Matrixelemente der Elektron–Phonon–Wechselwirkung in einem realen fcc–Metall (Kupfer) unter dem Aspekt der Anisotropie der Elektron–Phonon–Wechselwirkung und der Berücksichtigung der Vielteilcheneffekte zu berechnen. Die Matrixelemente werden anschließend verwendet, um die Boltzmann–Gleichung zur Bestimmung des Temperaturverlaufs der elektrischen Widerstands– bzw. Leitfähigkeitskurve zu lösen¹.

Als Eingangsdaten werden die effektiven nichtrelativistischen Einteilchen–Wellenfunktionen und die Energien des *modified–augmented–plane–waves*–Verfahrens (MAPW) herangezogen.

Die Matrixelemente der „nackten“ Elektron–Phonon–Wechselwirkung werden im Rahmen der linearen Antworttheorie bestimmt. Die Berücksichtigung der Vielteilcheneffekte erfolgt in der *local density approximation*, kurz LDA.

Vorgehensweise

In Kapitel 1 wird aufbauend auf dem Nordheimschen Modell der starren Ionen das in der Arbeit verwendete Modell zur Berechnung der Elektron–Phonon–Wechselwirkung vorgestellt. Mit dem MAPW–Bandstruktur–Berechnungsverfahren erhält man Information über die Elektronen in der Einteilchennäherung. Die Phononen werden in der harmonischen Näherung beschrieben, die wesentliche Ab-

¹ohne Relaxationszeitnäherung

schirmungseffekte beinhaltet. Die Matrixelemente der „nackten“ Elektron–Phonon–Wechselwirkung werden in Kapitel 2 hergeleitet und berechnet. Das Kapitel 3 ist der Abschirmung der Elektronen durch Austausch– und Korrelationseffekte gewidmet. Zudem wird die Selbstkonsistenzberechnung der damit verbundenen Matrixelemente erklärt. In Kapitel 4 wird die Transporttheorie im allgemeinen und der spezifische elektrische Widerstand im speziellen behandelt. Ein ausführlicher Überblick über experimentelle und theoretische Arbeiten zum spezifischen elektrischen Widerstand von Kupfer ist in Kapitel 5 zu finden. Es werden die wichtigsten Aspekte der Theorie des elektrischen Widerstandes in Metallen zusammengefaßt, die Ergebnisse der Arbeit dargestellt und im Vergleich zu den anderen theoretischen Ergebnissen und experimentellen Daten diskutiert. Weiter wird ein Ausblick für die zukünftigen Verwendungsmöglichkeiten der Methoden, der Teilergebnisse und der Aussagen in dieser Arbeit gegeben.

In Anhang A sind die wichtigen Eigenschaften der reellwertigen Kugelflächenfunktionen, das verallgemeinerte Ewald–Verfahren und einige Eigenschaften der Diracschen Verteilungsfunktion explizit zusammengestellt. Die Computer–Realisierung der Berechnungen ist in Anhang B zusammengefaßt. In Anhang C sind die Werte zum spezifischen elektrischen Widerstand von Kupfer und seine doppeltlogarithmischen Ableitungen tabellarisch aufgelistet. Anhang D ist der Phononen–Paar–Numerierung des verwendeten diskreten Ansatzes gewidmet.

Kapitel 1

Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen

1.1 Die adiabatische zeitabhängige Störung

Ausgangspunkt aller Betrachtungen ist die Bornsche Gitterdynamik. Darunter wird die formale Entwicklung der potentiellen Energie um die Gleichgewichtslage in der harmonischen Näherung verstanden. Die Entwicklung ist eine quadratische Form der Auslenkungen. Sie ist durch die Kristallsymmetrie wesentlich eingeschränkt. Die Koeffizienten der quadratischen Form, die Bornschen Koppelungskonstanten, werden aus den Experimenten gewonnen. In der harmonischen Näherung läßt sich die Auslenkung \vec{s}^m eines Ions am m ten Gitterplatz in Normalkoordinaten allgemein schreiben als

$$\vec{s}^m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}, j} \eta(\vec{q}, j) \left\{ \vec{e}(\vec{q}, j) e^{i\vec{q}\vec{R}^m} a_{\vec{q}}^j(t) + \vec{e}^*(\vec{q}, j) e^{-i\vec{q}\vec{R}^m} a_{\vec{q}}^{j\dagger}(t) \right\}. \quad (1.1)$$

Die Vektoren $\vec{e}(\vec{q}, j)$ und $\vec{e}^*(\vec{q}, j)$ sind die Polarisationsvektoren der Phonon-Moden. Phononen sind Quasiteilchen mit dem Impuls \vec{q} und Energie $\hbar\omega(\vec{q}, j)$, wobei $j = 1, 2, 3$ ist. $a_{\vec{q}}^{j\dagger}(t)$ und $a_{\vec{q}}^j(t)$ sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die jeweiligen Phonon-Moden zu einer Zeit t . \vec{R}^m ist der Gittervektor und $\eta(\vec{q}, j)$ eine Konstante, die wie folgt definiert ist

$$\eta(\vec{q}, j) = \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega(\vec{q}, j)}}. \quad (1.2)$$

M ist dabei die Masse der Ionen und N die Anzahl der Zellen in einem Makroblock. Das Störpotential am Ort \vec{r} ist durch

$$\delta V = \sum_{\vec{R}^m} V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}^m - \vec{s}^m) - \sum_{\vec{R}^m} V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}^m) \quad (1.3)$$

gegeben. V_{ion} bezeichnet das Potential eines Ions am Gitterplatz \vec{R}^m . In der linearen Antworttheorie ist

$$\begin{aligned}
\delta V &= - \sum_{\vec{R}^m} \vec{s}^m \vec{\nabla} V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}^m) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}, j, \vec{R}^m} \eta(\vec{q}, j) \left\{ \vec{e}(\vec{q}, j) e^{i\vec{q}\vec{R}^m} a_q^j(t) \vec{\nabla} V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}^m) \right. \\
&\quad \left. + \vec{e}^*(\vec{q}, j) e^{-i\vec{q}\vec{R}^m} a_q^{j\dagger}(t) \vec{\nabla} V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}^m) \right\} . \quad (1.4)
\end{aligned}$$

In einem realen Metall wäre Gleichung (1.4) als Störpotential nicht vollständig. Es müssen zusätzlich die Abschirmungseffekte aufgrund der reinen Coulombschen Elektron–Elektron–Wechselwirkung sowie die quantenstatistisch bedingten Vielteilchen–Effekte, die durch den Austausch und die Korrelation der Elektronen entstehen, berücksichtigt werden. Die Struktur eines Störoperators mit Abschirmungseffekten hat in Analogie zu Gleichung (1.4) die Gestalt

$$\begin{aligned}
\delta V^{tot} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}, j, \vec{R}^m} \eta(\vec{q}, j) \left\{ \vec{e}(\vec{q}, j) e^{i\vec{q}\vec{R}^m} a_q^j(t) \vec{V}_{screen}(\vec{r} - \vec{R}^m) \right. \\
&\quad \left. + \vec{e}^*(\vec{q}, j) e^{-i\vec{q}\vec{R}^m} a_q^{j\dagger}(t) \vec{V}_{screen}^*(\vec{r} - \vec{R}^m) \right\} . \quad (1.5)
\end{aligned}$$

Im physikalischen Sinne sind \vec{V}_{screen} und \vec{V}_{screen}^* effektive Gradienten des Potentials am Gitterplatz \vec{r} in der Wigner–Seitz–Zelle Nummer m . Die Berechnungsverfahren für die neuen Potentiale $\vec{V}_{screen}(\vec{r} - \vec{R}^m)$ und $\vec{V}_{screen}^*(\vec{r} - \vec{R}^m)$ werden in Kapitel 3 beschrieben¹.

Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten mit Hilfe der Elektron–Phonon–Wechselwirkung

Schaltet man das Störpotential δV^{tot} adiabatisch ein, d.h. ist bei der Zeit $t' = -\infty$ nur das ungestörte periodische Potential vorhanden und für jede andere Zeit t das Störpotential eingeschaltet, so ist

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \delta V^{tot} e^{\eta t} \quad , \quad \eta \rightarrow 0 \quad . \quad (1.6)$$

η ist hier der adiabatische Einschaltparameter und nicht zu verwechseln mit der Konstanten $\eta(\vec{q}, j)$ aus Gleichung (1.2). Die Einteilchenwellenfunktion χ genügt der Schrödinger–Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \hat{H} \chi \quad . \quad (1.7)$$

¹Siehe insbesondere Abschnitt 3.3

Der Ansatz

$$\chi = \langle \vec{r}' | n\vec{k} \rangle e^{-i\frac{E_{n\vec{k}}t}{\hbar}} + \sum_{(n\vec{k}) \neq (n'\vec{k}')} \Phi_{n'\vec{k}', n\vec{k}}(t) \langle \vec{r}' | n'\vec{k}' \rangle e^{-i\frac{E_{n'\vec{k}'}}{\hbar}t}, \quad (1.8)$$

mit den Lösungen der ungestörten Schrödinger-Gleichung $\langle \vec{r}' | n\vec{k} \rangle$ und den Eigenwerten $E_{n\vec{k}}$, führt in nullter Ordnung der Störungsrechnung zu

$$i\hbar \sum_{n'\vec{k}'} \dot{\Phi}_{n'\vec{k}', n\vec{k}}(t) \langle \vec{r}' | n'\vec{k}' \rangle e^{-i\frac{E_{n'\vec{k}'}}{\hbar}t} = \delta V^{tot} e^{\eta t} \langle \vec{r}' | n\vec{k} \rangle e^{-i\frac{E_{n\vec{k}}t}{\hbar}}. \quad (1.9)$$

Da die Menge aller $\{\langle \vec{r}' | n\vec{k} \rangle\}$ einen vollständigen Funktionensatz bildet, gilt

$$i\hbar \dot{\Phi}_{n'\vec{k}', n\vec{k}}(t) = \langle n'\vec{k}' | \delta V^{tot} e^{\eta t} | n\vec{k} \rangle e^{-i\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})t}{\hbar}} \quad (1.10)$$

oder explizit geschrieben

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\Phi}_{n'\vec{k}', n\vec{k}}(t) &= -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}, j, \vec{R}^m} \eta(\vec{q}, j) \cdot \\ \left\{ \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r}' - \vec{R}^m) | n\vec{k} \rangle e^{\eta t} \vec{e}(\vec{q}, j) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}^m} a_q^j(t) e^{-i\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})t}{\hbar}} + \right. \\ \left. \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r}' - \vec{R}^m) | n\vec{k} \rangle e^{\eta t} \vec{e}^*(\vec{q}, j) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}^m} a_q^{j\dagger}(t) e^{-i\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})t}{\hbar}} \right\}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Aufgrund der harmonischen Näherung folgt, daß die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a_q^j(t) = a_q^j(0) e^{-i\omega(\vec{q}, j)t} \quad (1.12)$$

in nichttrivialer Weise von der Zeit abhängen. Für die Lösung der Gleichung (1.11) ergibt sich

$$\begin{aligned} \Phi_{n'\vec{k}', n\vec{k}}(t) &= \frac{i}{\hbar\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}, j, \vec{R}^m} \eta(\vec{q}, j) \cdot \\ \left\{ \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r}' - \vec{R}^m) | n\vec{k} \rangle \frac{\vec{e}(\vec{q}, j) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}^m} a_q^j(t) e^{\eta t} e^{-i\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})t}{\hbar}}}{-i \left(\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})}{\hbar} + \omega(\vec{q}, j) + i\eta \right)} + \right. \\ \left. \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r}' - \vec{R}^m) | n\vec{k} \rangle \frac{\vec{e}^*(\vec{q}, j) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}^m} a_q^{j\dagger}(t) e^{\eta t} e^{-i\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})t}{\hbar}}}{-i \left(\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})}{\hbar} - \omega(\vec{q}, j) + i\eta \right)} \right\}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Der erste Term beschreibt die Absorption, der zweite die Emission eines Phonons. Die Summe $\sum_{\vec{R}^m}$ läßt sich unter Verwendung der Gitterperiodizität auf die Ausdrücke

$$\begin{aligned}
& \sum_{\vec{R}^m} \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r} - \vec{R}^m) | n \vec{k} \rangle e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}^m} \\
&= \sum_{\vec{R}^m} e^{i(\vec{k} - \vec{k}' + \vec{q}) \cdot \vec{R}^m} \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r}') | n \vec{k} \rangle \\
&= N \delta_{\vec{k} - \vec{k}' + \vec{q} + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r}') | n \vec{k} \rangle
\end{aligned} \tag{1.14}$$

und

$$\begin{aligned}
& \sum_{\vec{R}^m} \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r} - \vec{R}^m) | n \vec{k} \rangle e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}^m} \\
&= \sum_{\vec{R}^m} e^{i(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{q}) \cdot \vec{R}^m} \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r}') | n \vec{k} \rangle \\
&= N \delta_{\vec{k} - \vec{k}' - \vec{q} + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r}') | n \vec{k} \rangle
\end{aligned} \tag{1.15}$$

reduzieren. N ist die Anzahl der Zellen im Makroblock. \vec{K} ist ein reziproker Gittervektor, der so gewählt wird, daß \vec{k}' , \vec{k} und \vec{q} jeweils in der ersten Brillouin-Zone liegen. Die Relationen schränken alle Übergänge auf die Bedingung

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} + \vec{K} \tag{1.16}$$

ein. Konstruiert man ein System mit einem diskreten Wellenfunktions-Ansatz im reziproken Raum, so können geeignete Phononen als die Menge der unterscheidbaren Differenzen der Ansatzvektoren bis auf einen reziproken Gittervektor bestimmt werden. Man hat

$$\{\vec{q}\} = \{\vec{k} \pm \vec{k}' + \vec{K}\} \quad . \tag{1.17}$$

Aus den Vertauschungsrelationen

$$[a_q^{j'}(t), a_q^{j\dagger}(t)] = \delta_{j,j'} \tag{1.18}$$

der phononischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren folgt für die Erwartungswerte im Grundzustand der harmonischen Näherung

$$\langle a_q^{j\dagger}(t) a_q^{j'}(t) \rangle = \delta_{j,j'} \langle n_{j,\vec{q}} \rangle \tag{1.19}$$

$$\langle a_q^{j'}(t) a_q^{j\dagger}(t) \rangle = \delta_{j,j'} (1 + \langle n_{j,\vec{q}} \rangle) \quad . \tag{1.20}$$

In dieser Näherung ist der Erwartungswert des phononischen Teilchenoperators die Bose–Einstein–Funktion

$$\langle n_{j,\vec{q}} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega(\vec{q},j)}{k_b T}} - 1} . \quad (1.21)$$

Im Rahmen der linearen Antworttheorie ergibt sich unter dem Einfluß der Elektron–Phonon–Wechselwirkung daraus die Ladungsdichte

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) = \sum_{n\vec{k}} f_{n\vec{k}} \left[\right. & |\langle \vec{r} | n\vec{k} \rangle|^2 \\ & + \sum_{n'\vec{k}'} \Phi_{n'\vec{k}', n\vec{k}}(t) \langle n\vec{k} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | n'\vec{k}' \rangle e^{-i(E_{n'\vec{k}'} - E_{n\vec{k}})\frac{t}{\hbar}} \\ & \left. + \sum_{n'\vec{k}'} \Phi_{n'\vec{k}', n\vec{k}}^*(t) \langle n'\vec{k}' | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | n\vec{k} \rangle e^{+i(E_{n'\vec{k}'} - E_{n\vec{k}})\frac{t}{\hbar}} \right] . \end{aligned} \quad (1.22)$$

Sie gestattet die Berechnung des Coulomb–Potentials sowie der Austausch– und Korrelationspotentiale im gestörten Zustand. Das Betragsquadrat von Φ führt nach den Gleichungen (1.13), (1.14), (1.15) zu

$$\begin{aligned} |\Phi_{n'\vec{k}', n\vec{k}}(t)|^2 = \frac{N}{\hbar^2} \sum_{\vec{q}, j} |\eta(\vec{q}, j)|^2 \cdot \\ \left\{ |\vec{e}(\vec{q}, j) \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r}') | n\vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \frac{e^{2\eta t} \langle n_{j,\vec{q}} \rangle \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}+\vec{K}}}{\left(\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})}{\hbar} + \omega(\vec{q}, j)\right)^2 + \eta^2} + \right. \\ \left. |\vec{e}^*(\vec{q}, j) \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r}') | n\vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \frac{e^{2\eta t} (\langle n_{j,\vec{q}} \rangle + 1) \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{K}}}{\left(\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})}{\hbar} - \omega(\vec{q}, j)\right)^2 + \eta^2} \right\} . \end{aligned} \quad (1.23)$$

In der Transporttheorie spielen die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$W(n\vec{k}, n'\vec{k}') = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{d}{dt} |\Phi_{n'\vec{k}', n\vec{k}}(t)|^2 \quad (1.24)$$

aus dem Zustand $|n\vec{k}\rangle$ in den Zustand $|n'\vec{k}'\rangle$ eine entscheidende Rolle. Nach Gleichung (1.23) gilt

$$\begin{aligned}
W(n \vec{k}, n' \vec{k}') &= \frac{2N}{\hbar^2} \sum_{\vec{q}, j} |\eta(\vec{q}, j)|^2 \cdot \\
&\left\{ |\vec{e}(\vec{q}, j) \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r}') | n \vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \langle n_{j, \vec{q}} \rangle \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}+\vec{K}} \right. \\
&\quad \cdot \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{\left(\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})}{\hbar} + \omega(\vec{q}, j) \right)^2 + \eta^2} + \\
&\quad |\vec{e}^*(\vec{q}, j) \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r}') | n \vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 (\langle n_{j, \vec{q}} \rangle + 1) \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{K}} \\
&\quad \left. \cdot \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{\left(\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})}{\hbar} - \omega(\vec{q}, j) \right)^2 + \eta^2} \right\}. \tag{1.25}
\end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung der Sokozkij-Identität (siehe [89] bzw. [87])

$$\frac{1}{x \pm i0} = \mp i\pi \delta(x) + \mathcal{P} \frac{1}{x} \tag{1.26}$$

erhält man

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = \frac{1}{2i} \lim_{\eta \rightarrow 0} \left(\frac{1}{x - i\eta} - \frac{1}{x + i\eta} \right) = \pi \delta(x) \quad . \tag{1.27}$$

Dies führt zu

$$\begin{aligned}
W(n \vec{k}, n' \vec{k}') &= \frac{2\pi N}{\hbar^2} \sum_{\vec{q}, j} |\eta(\vec{q}, j)|^2 \cdot \\
&\left\{ |\vec{e}(\vec{q}, j) \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r}') | n \vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \langle n_{j, \vec{q}} \rangle \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}+\vec{K}} \right. \\
&\quad \cdot \delta\left(\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})}{\hbar} + \omega(\vec{q}, j) \right) + \\
&\quad |\vec{e}^*(\vec{q}, j) \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r}') | n \vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 (\langle n_{j, \vec{q}} \rangle + 1) \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{K}} \\
&\quad \left. \cdot \delta\left(\frac{(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})}{\hbar} - \omega(\vec{q}, j) \right) \right\} \tag{1.28}
\end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
W(n\vec{k}, n'\vec{k}') &= \frac{2\pi N}{\hbar} \sum_{\vec{q}, j} |\eta(\vec{q}, j)|^2 \cdot \\
&\left\{ |\vec{e}(\vec{q}, j)\langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{screen}(\vec{r}') | n\vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \langle n_{j,\vec{q}} \rangle \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}+\vec{k}} \right. \\
&\quad \cdot \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) + \\
&\quad |\vec{e}^*(\vec{q}, j)\langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{screen}^*(\vec{r}') | n\vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 (\langle n_{j,\vec{q}} \rangle + 1) \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{k}} \\
&\quad \left. \cdot \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} - \hbar\omega(\vec{q}, j)) \right\}. \tag{1.29}
\end{aligned}$$

In diesem Abschnitt wurde somit gezeigt, daß die Kenntnis der Bandstruktur (Energien und Wellenfunktionen) und der Gitterdynamik (Polarisationen und Frequenzen der Phononen) einerseits sowie ein Verfahren zum Berechnen der Abschirmung der Elektronen-Zustände in einem Metall andererseits ausreichen, um die Übergangswahrscheinlichkeiten aus Gleichung (1.24) zu bestimmen. Dies ist der Ausgangspunkt der Boltzmannschen Transporttheorie in Abschnitt vier.

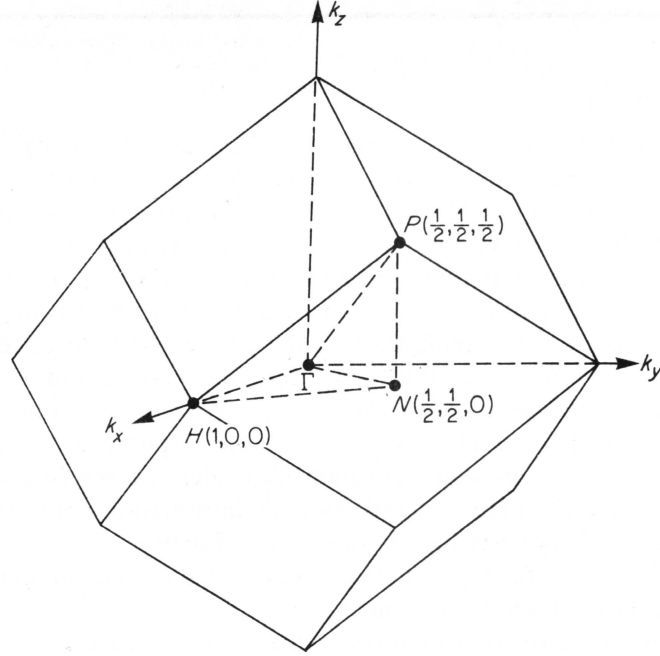
1.2 Der MAPW-Ansatz für $\langle \vec{r} | n\vec{k} \rangle_0$ innerhalb der zentralen Wigner-Seitz-Zelle

Durch das MAPW-Verfahren lassen sich die effektiven Ein-Elektron-Wellenfunktionen und die Einteilchenenergien in einem kristallinen Medium mit hoher Präzision gewinnen. In diesem Verfahren wird die reine Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen und den Gitterionen berücksichtigt. Die individuelle Wechselwirkung zwischen den Elektronen wird vernachlässigt. Im Sinne der Hartree'schen Näherung wird angenommen, daß sich ein einzeln betrachtetes Elektron im Potential aller anderen befindet. Darüber hinaus werden Austausch und Korrelation zwischen den Elektronen im Rahmen der LDA-Näherung berücksichtigt. Die Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) wird in zwei Bereichs-Typen, in die Kugel $K(0, r_{apw_i})$ mit den Radien r_{apw_i} und in den Außenraum $WSZ \setminus \cup K(0, r_{apw_i})$, unterteilt. In diesen beiden Teilbereichen werden die Wellenfunktionen unterschiedlich dargestellt.

Genauer spezifiziert besteht eine MAPW-Wellenfunktion aus einer Hyperposition von ebenen Wellen im Außenraum und einem Anteil geeigneter gewählter Radialfunktionen innerhalb der APW-Kugel.

Für Medien mit einem Atom in der Basis läßt sich innerhalb der zentralen WSZ

Abbildung 1.1: WSZ eines fcc- bzw. Brillouin-Zone eines bcc-Materials



die MAPW–Wellenfunktion schreiben als

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | n\vec{k} \rangle_0 &\equiv \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \Theta(r - r_{apw}) \psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) + \Theta(r_{apw} - r) \psi_{n\vec{k}}^{APW}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (1.30)$$

$$\psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} U(n\vec{k}, \vec{K}) e^{i(\vec{k} + \vec{K})\vec{r}} \quad (1.31)$$

$$\psi_{n\vec{k}}^{APW}(\vec{r}) = \sum_{\substack{l=0, L \\ \nu=1, 2l+1}} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}) g_{n\vec{k}}^{l\nu}(r) \quad (1.32)$$

$$g_{n\vec{k}}^{l\nu}(\vec{r}) = \sum_s A_{sl\nu}(n\vec{k}) R_{sl}(r) \quad (1.33)$$

$A_{sl\nu}(n\vec{k})$ und $U(n\vec{k}, \vec{K})$ sind die aus der MAPW–Berechnung bekannten Koeffizienten, $R_{sl}(r)$ sind geeignet gewählte Lösungen der Radial–Differentialgleichung mit einem sphärisch symmetrischen Potential, die Koeffizienten $\eta_{l\nu}$ werden durch den Ausdruck (A.4) bestimmt. An der APW–Sphäre müssen die Stetigkeitsbedingungen sowohl für die Wellenfunktionen als auch für ihre Ableitungen erfüllt sein. Die Einzelheiten des Verfahrens können der Arbeit [20] entnommen werden. Für die Berechnung spezifischer Matrixelemente mit den MAPW–Wellenfunktionen ist es oft sinnvoll, eine zu Gleichung (1.30) äquivalente Darstellung

$$\langle \vec{r} | n\vec{k} \rangle_0 \equiv \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) + \Theta(r_{apw} - r) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) \quad (1.34)$$

$$\psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} U(n\vec{k}, \vec{K}) e^{i(\vec{k} + \vec{K})\vec{r}} \quad (1.35)$$

$$\psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) = \sum_{\substack{l=0,L \\ \nu=1,2l+1}} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}) f_{n\vec{k}}^{\nu}(r) \quad (1.36)$$

$$f_{n\vec{k}}^{\nu}(r) = \sum_s A_{sl\nu}(n\vec{k}) R_{sl}(r) - \sum_{\vec{K}} U(n\vec{k}, \vec{K}) Y_{l\nu}(\vec{k} + \vec{K}) j_l(|\vec{k} + \vec{K}| r) \quad (1.37)$$

zu wählen. Dabei wird der ebene Wellen-Anteil (EW-Anteil) auf die ganze WSZ erweitert. Bei den Radialfunktionen wird ein bestimmter äquivalenter Anteil innerhalb der APW-Kugel nach der Kugelflächenfunktionen-Zerlegung der ebenen Wellen aus Gleichung (A.6) des Anhangs A.1 abgezogen.

Die MAPW-Wellenfunktion hat die Blochsche Eigenschaft. Für ein Gittervektor \vec{R}^m gilt

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}^m) = e^{i\vec{k}\vec{R}^m} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.38)$$

Die MAPW-Wellenfunktion hat bei einem Kristall mit symmorpher Raumgruppe die Eigenschaft

$$\psi_{n\hat{\alpha}\vec{k}}(\hat{\alpha}\vec{r}) = \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.39)$$

wobei $\hat{\alpha}$ ein Element der zugehörigen Raumgruppe ist. Die äquivalente Darstellung dieser Symmetrie-Eigenschaft ist

$$\psi_{n\hat{\alpha}\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{n\hat{\alpha}\vec{k}}(\hat{\alpha}(\hat{\alpha}^{-1}\vec{r})) = \psi_{n\vec{k}}(\hat{\alpha}^{-1}\vec{r}) \quad (1.40)$$

Für ein Matrixelement eines hermiteschen Operators \hat{V} , welcher gegenüber der Punktgruppensymmetrie invariant ist, d.h. $\hat{V}(\hat{\alpha}\vec{r}) = \hat{V}(\vec{r})$, hat man

$$\langle n' \hat{\alpha}\vec{k}' | \hat{V} | n\hat{\alpha}\vec{k} \rangle = \langle n' \vec{k}' | \hat{V} | n\vec{k} \rangle \quad (1.41)$$

Im Fall eines kubisch-symmetrischen Kristalls gibt es insgesamt achtundvierzig mögliche Symmetrie-Operatoren $\hat{\alpha}$, welche die Abbildungen $x_i \rightarrow \pm x_j$ realisieren, wobei x_i und x_j die Koordinaten des zu transformierenden Vektors sind.

Die Symmetrie-Eigenschaften in den Gleichungen (1.39) bzw. (1.40) ermöglicht es, nur einen Bruchteil der Daten zu benutzen, um die MAPW-Wellenfunktionen wohl zu definieren. Man verwendet die MAPW-Wellenfunktionen mit den \vec{k} -Vektoren aus dem $\frac{1}{48}$ tel der gesamten Brillouin-Zone, dem sogenannten irreduziblen Keil. Diese Eigenschaft erlaubt es, allein die Matrixelemente vom Typ

$\langle n' \hat{\alpha} \vec{k}' | \hat{V} | n \vec{k} \rangle$ mit \vec{k}' und \vec{k} aus dem irreduziblen Keil zu bestimmen. Die restliche Information kann dann über die Symmetrie-Eigenschaften gewonnen werden. Das Berechnungsverfahren für eine MAPW-Wellenfunktion führt zu der wichtigen Eigenschaft, daß eine MAPW-Wellenfunktion die richtige Wellenfunktion nullter Ordnung im Rahmen einer ggf. entarteten Störungstheorie ist.

Abbildung 1.2: *Bandstruktur von fcc-Kupfer nach [41]*

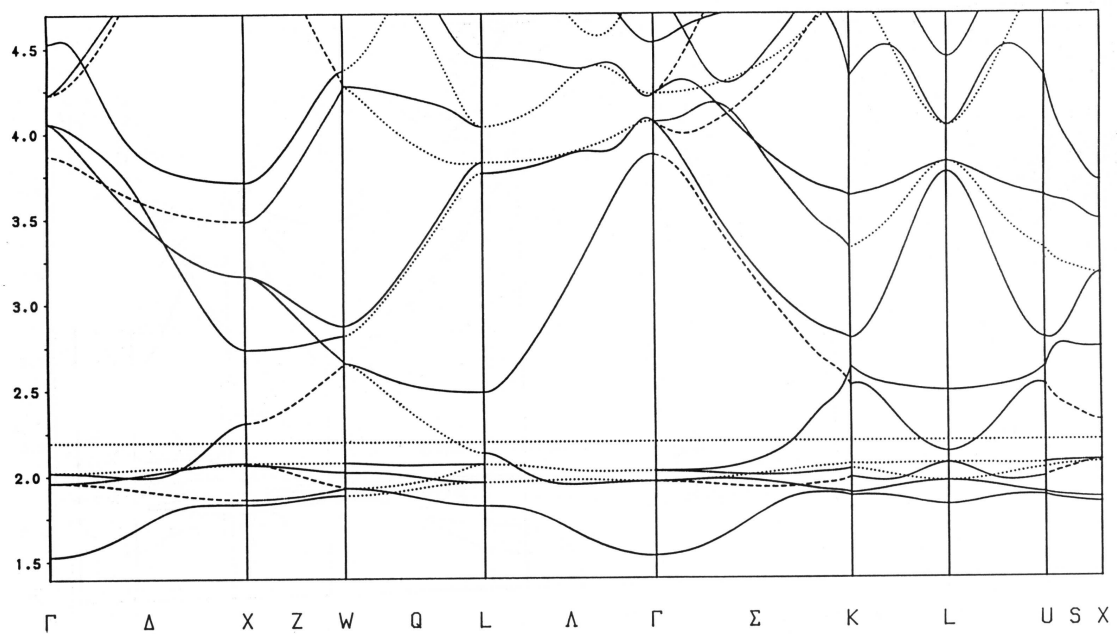
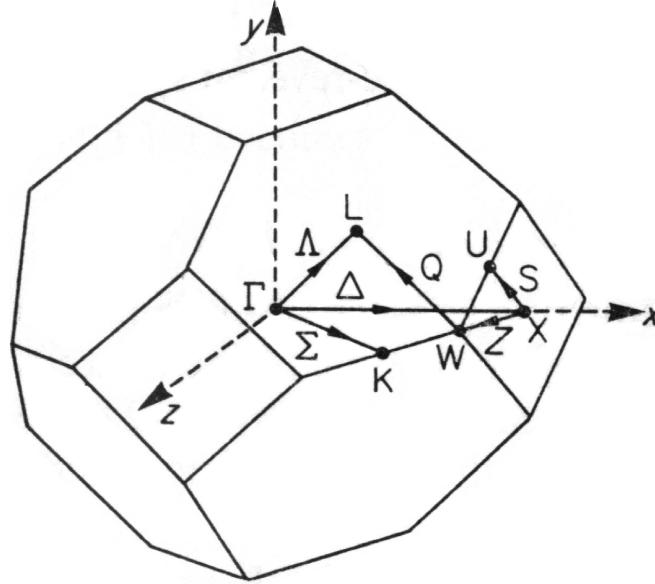


Abbildung 1.3: Brillouin-Zone von fcc-Kupfer mit ausgezeichneten Punkten



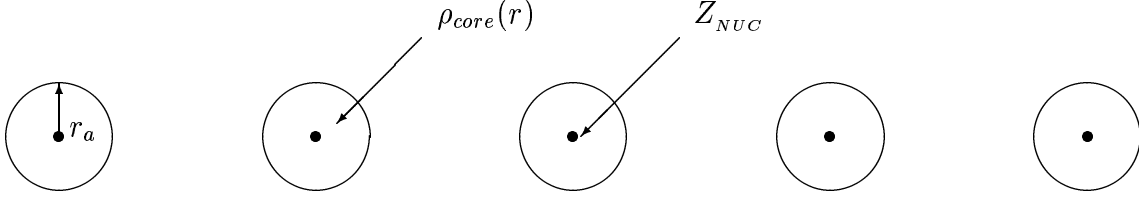
1.3 Phononen- und effektive Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Die Elektronen auf den inneren Schalen, die sogenannten „core“-Elektronen, schwingen zusammen mit den Kernen quasi als starres Gebilde. Die core-Elektronen schirmen die Kerne teilweise ab. Es ist daher zweckmäßig, die Abschirmung gleich mit in das Konzept der Phononen einzubauen.

Die Kerne werden als sphärisch-symmetrische Ladungswolken mit dem Radius r_{apw} , der Ladung $Z_{NUC} - Z_{core}$ und der Ladungsdichte der core-Elektronen $\rho_{core}(\vec{r})$ aufgefaßt. Der Wert dieser Ladung ist frei verfügbar und enthält auch den Grenzfall $Z_{core} = 0$. Für jedes Material ist ein spezieller Wert von Z_{core} für die Berechnungen geeignet und meist aus den Experimenten bekannt. Die Ladungsdichte $\rho_{core}(\vec{r})$ wird aus den MAPW-Zuständen für die core-Elektronen gewonnen. Diese Maßnahme ist hilfreich bei der Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten, überwiegend für die der Elektronen aus den äußeren Schalen. Damit können in dieser Arbeit die Phononen von vornherein behandelt werden, welche einen Teil der Abschirmung tragen. Es gilt

$$Z_{core} = 4\pi \int_0^{r_a} dr r^2 \rho_{core}(r) \quad . \quad (1.42)$$

Abbildung 1.4: Sphärisch symmetrische Ladungswolken um die Kerne



Durch die Verschiebung der Ladungswolke um \vec{s}^0 entsteht innerhalb der zentralen WSZ ein elektrostatisches Potential der Form

$$\begin{aligned} \delta V(\vec{r}) = & \int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{e^2 \rho_{core}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}' - \vec{s}^0|} + \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{4\pi e^2}{|\vec{r} - \vec{R}^m - \vec{s}^m|} \int_0^{r_a} dr' r'^2 \rho_{core}(r') \\ & - \sum_{\vec{R}^m} \frac{e^2 Z_{NUC}}{|\vec{r} - \vec{R}^m - \vec{s}^m|} \quad , \end{aligned} \quad (1.43)$$

mit

$$Z = Z_{NUC} - Z_{core} \quad . \quad (1.44)$$

Zudem gilt nach Gleichung (1.42)

$$\delta V(\vec{r}) = \int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{e^2 \rho_{core}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}' - \vec{s}^0|} - Z e^2 \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}^m - \vec{s}^m|} - \frac{Z_{NUC} e^2}{|\vec{r} - \vec{s}^0|} . \quad (1.45)$$

Mit der Dipol-Entwicklung

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}^m - \vec{s}^m|} \simeq \frac{\vec{s}^m(\vec{r} - \vec{R}^m)}{|\vec{r} - \vec{R}^m|^3} + \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \quad (1.46)$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} \delta V(\vec{r}) \simeq & e^2 \vec{s}^0 \int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \rho_{core}(r') \\ & + Z_{core} e^2 \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{\vec{s}^m(\vec{r} - \vec{R}^m)}{|\vec{r} - \vec{R}^m|^3} - Z_{NUC} e^2 \sum_{\vec{R}^m} \frac{\vec{s}^m(\vec{r} - \vec{R}^m)}{|\vec{r} - \vec{R}^m|^3} . \end{aligned} \quad (1.47)$$

Außerdem hat man

$$\int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \rho_{core}(r') = -\vec{\nabla}_{\vec{r}} \int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\rho_{core}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} . \quad (1.48)$$

Nach Gleichung (A.7) aus Anhang A.1 gilt weiter für $r < r_a$

$$\begin{aligned} \int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\rho_{core}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} &= \sum_{l\nu} \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}^0) \int d\Omega Y_{l\nu}(\vec{r}'^0) \\ &* \left[\frac{1}{r^{l+1}} \int_0^r dr' r'^{2+l} \rho_{core}(r') + r^l \int_r^{r_a} dr' r'^{1-l} \rho_{core}(r') \right] . \end{aligned}$$

Mit Gleichung (A.3) aus Anhang A.1 folgt für $r < r_a$

$$\int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\rho_{core}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi \left[\frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r') + \int_r^{r_a} dr' r' \rho_{core}(r') \right] \quad (1.49)$$

und

$$\begin{aligned} \int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \rho_{core}(r') &= \\ &= -4\pi \vec{\nabla}_{\vec{r}} \left[\frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r') + \int_r^{r_a} dr' r' \rho_{core}(r') \right] \\ &= -4\pi \frac{\vec{r}}{r} d_r \left[\frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r') + \int_r^{r_a} dr' r' \rho_{core}(r') \right] . \end{aligned} \quad (1.50)$$

Nach Differenzierung erhält man

$$\int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \rho_{core}(r') = 4\pi \frac{\vec{r}}{r^3} \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r') . \quad (1.51)$$

Für $r > r_a$ werden die Berechnungen analog durchgeführt. Nach Gleichung (A.7) aus Anhang A.1 gilt in diesem Fall

$$\int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\rho_{core}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{l\nu} \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}^0) \int d\Omega Y_{l\nu}(\vec{r}'^0) \left[\frac{1}{r^{l+1}} \int_0^{r_a} dr' r'^{2+l} \rho_{core}(r') \right] .$$

Mit Gleichung (A.3) aus Anhang A.1 ergibt sich für $r > r_a$

$$\int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\rho_{core}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi \left[\frac{1}{r} \int_0^{r_a} dr' r'^2 \rho_{core}(r') \right] . \quad (1.52)$$

Daraus und aus (1.48) folgt

$$\int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \rho_{core}(r') = 4\pi \frac{\vec{r}}{r^3} \int_0^{r_a} dr' r'^2 \rho_{core}(r') . \quad (1.53)$$

Zudem kann dieser Ausdruck nach (1.42) geschrieben werden als

$$\int_{K(0,r_a)} d^3 r' \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \rho_{core}(r') = Z_{core} \frac{\vec{r}}{r^3} . \quad (1.54)$$

Nach Gleichung (1.1) gilt

$$\vec{s}^m = \sum_{\vec{q}} \left[\vec{s}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{R}^m} + \vec{s}^*(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\vec{R}^m} \right] . \quad (1.55)$$

Gemäß den Gleichungen (1.47), (1.51), (1.53) und (1.55) kann δV innerhalb der zentralen WSZ geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \delta V(\vec{r}) \simeq & \sum_{\vec{q}} \left(\vec{s}(\vec{q}) + \vec{s}^*(\vec{q}) \right) \frac{\vec{r}}{r^3} \left[-Z_{NUC} e^2 + 4\pi e^2 \int_0^{\min(r,r_a)} dr' r'^2 \rho_{core}(r') \right] \\ & - e^2 (Z_{NUC} - Z_{core}) \left[\vec{s}(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} + \vec{s}^*(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right] . \end{aligned} \quad (1.56)$$

Außerhalb der APW-Kugel läßt sich dieser Ausdruck mit (1.54) vereinfachen

$$\begin{aligned} \delta V(\vec{r}) \simeq & -e^2 (Z_{NUC} - Z_{core}) \\ & \sum_{\vec{q}} \left[\vec{s}(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m} \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} + \vec{s}^*(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right] . \end{aligned} \quad (1.57)$$

Innerhalb der APW-Kugel hat man

$$\begin{aligned} \delta V(\vec{r}) \simeq & \sum_{\vec{q}} \left(\vec{s}(\vec{q}) + \vec{s}^*(\vec{q}) \right) \frac{\vec{r}}{r^3} \left[-Z_{NUC} e^2 + 4\pi e^2 \Theta(r_a - r) \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r') \right] \\ & - e^2 (Z_{NUC} - Z_{core}) \left[\vec{s}(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} + \vec{s}^*(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right] . \end{aligned} \quad (1.58)$$

In der gesamten Zelle folgt nach den Gleichungen (1.56)–(1.58)

$$\delta V(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \delta V^{\vec{q}}(\vec{r}). \quad (1.59)$$

Innerhalb der APW-Kugel gilt

$$\begin{aligned} \delta V^{\vec{q}}(\vec{r}) \simeq & \left(\vec{s}(\vec{q}) + \vec{s}^*(\vec{q}) \right) \frac{\vec{r}}{r^3} \left[-Z_{NUC} e^2 + 4\pi e^2 \Theta(r_a - r) \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r') \right] \\ & - e^2 (Z_{NUC} - Z_{core}) \left[\vec{s}(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} + \vec{s}^*(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right]. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Außerhalb der APW-Kugel hat man

$$\delta V^{\vec{q}}(\vec{r}) \simeq -e^2 (Z_{NUC} - Z_{core}) \left[\vec{s}(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m} \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} + \vec{s}^*(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right]. \quad (1.61)$$

Die zweite Zeile in Ausdruck (1.56) ist eine harmonische Funktion. Die Ausdrücke

$$\sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{\pm i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \quad (1.62)$$

sind allerdings nur bedingt konvergent und benötigen daher ein Regularisierungsverfahren. Ein geeignetes Verfahren ist das modifizierte Ewald-Verfahren, das in Anhang A.2 beschrieben ist. Es liefert die Koeffizienten $A_{l\nu}(\pm\vec{q})$ für die Identität

$$\sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{\pm i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} = \sum_{l\nu} r^l Y_{l\nu}(\vec{r}^0) A_{l\nu}(\pm\vec{q}) \quad . \quad (1.63)$$

In der zweiten Zeile des Ausdrucks (1.56) ist zusätzlich der Operator $\vec{\nabla}_{\vec{r}}$ enthalten. Dieser ist nach Ausführen des modifizierten Ewald-Verfahrens ein harmonischer Ausdruck vom Grad $l - 1$, eine lineare (Vektor-)Kombination der Funktionen $r^{l-1} Y_{l-1\nu}'(\vec{r}^0)$, welche nach (A.9) gewonnen wird.

Kapitel 2

Nackte Elektron-Phonon-Wechselwirkungsmatrixelemente

2.1 Reduktion der Matrixelemente auf die Integrationen über die zentrale WSZ

Das elektrostatische Potential innerhalb der zentralen WSZ aus Gleichung (1.59) lässt sich mit Hilfe der Ersetzung

$$F_c(r) = 4\pi \int_0^{\min(r, r_a)} dr' r'^2 \rho_{core}(r') \quad (2.1)$$

schreiben als

$$\begin{aligned} \delta V_{\vec{q}}(\vec{r}) \simeq & \left(\vec{s}(\vec{q}) + \vec{s}^*(\vec{q}) \right) \frac{\vec{r}}{r^3} \left[-Z_{NUC} e^2 + e^2 F_c(r) \right] \\ & - e^2 (Z_{NUC} - Z_{core}) \left[\vec{s}(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} + \vec{s}^*(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Das Potential besteht aus zwei Moden

$$\delta V_{\vec{q}}(\vec{r}) = \delta V_{\vec{q}}(\vec{r}) + \delta V_{-\vec{q}}(\vec{r}) \quad . \quad (2.3)$$

Explizit hat man

$$\delta V_{\vec{q}}(\vec{r}) = e^2 \vec{s}(\vec{q}) \left[\frac{\vec{r}}{r^3} \left(-Z_{NUC} + F_c(r) \right) - (Z_{NUC} - Z_{core}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right] \quad (2.4)$$

und

$$\delta V_{-\vec{q}}(\vec{r}) = e^2 \bar{s}^*(\vec{q}) \left[\frac{\vec{r}}{r^3} \left(-Z_{NUC} + F_c(r) \right) - \left(Z_{NUC} - Z_{core} \right) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right]. \quad (2.5)$$

Die Translationseigenschaften von $\delta V_{\pm\vec{q}}(\vec{r})$ sind dabei entscheidend.

Es gilt die Behauptung:

$$\delta V_{\pm\vec{q}}(\vec{r} + \vec{R}^{m_0}) = e^{\pm i\vec{q}\vec{R}^{m_0}} \delta V_{\pm\vec{q}}(\vec{r}) \quad . \quad (2.6)$$

Für den Beweis dieser Behauptung ist es ausreichend, gedanklich dieselben Umformungen wie auf den Seiten dreizehn bis fünfzehn durchzuführen. Allerdings wird dabei der Vektor \vec{r} durch den Vektor $\vec{r} - \vec{R}^{m_0}$ mit $\vec{R}^{m_0} \neq 0$ ersetzt.

Die Translationseigenschaft der Teilmoden von δV aus Gleichung (2.6) ermöglicht die Reduktion der Matrixelemente auf die Integrationen über die zentrale WSZ. Man hat

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{k}' | \delta V^{\vec{q}} | n \vec{k} \rangle &= \int_{\mathbf{R}^3} d^3 r \psi_{n' \vec{k}'}^*(\vec{r}) \delta V^{\vec{q}}(\vec{r}) \psi_{n \vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \sum_{\vec{R}^m} \int_{WSZ_m} d^3 r \psi_{n' \vec{k}'}^*(\vec{r} + \vec{R}^m) \delta V^{\vec{q}}(\vec{r} + \vec{R}^m) \psi_{n \vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}^m) \\ &= \sum_{\vec{R}^m} e^{i(\vec{k} + \vec{q} - \vec{k}') \vec{R}^m} \int_{WSZ_m} d^3 r \psi_{n' \vec{k}'}^*(\vec{r}) \delta V^{\vec{q}}(\vec{r}) \psi_{n \vec{k}}(\vec{r}) \\ &+ \sum_{\vec{R}^m} e^{i(\vec{k} - \vec{q} - \vec{k}') \vec{R}^m} \int_{WSZ_m} d^3 r \psi_{n' \vec{k}'}^*(\vec{r}) \delta V_{-\vec{q}}(\vec{r}) \psi_{n \vec{k}}(\vec{r}) \\ &= \sum_{\vec{R}^m} e^{i(\vec{k} + \vec{q} - \vec{k}') \vec{R}^m} \langle n' \vec{k}' | \delta V^{\vec{q}} | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \\ &+ \sum_{\vec{R}^m} e^{i(\vec{k} - \vec{q} - \vec{k}') \vec{R}^m} \langle n' \vec{k}' | \delta V_{-\vec{q}} | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \quad . \end{aligned}$$

Die letzten beiden Summen sind nur dann vom Null verschieden, wenn die Exponenten einem reziproken Gittervektor \vec{K} gleich sind. Somit ergibt sich für die angestrebte Reduktion

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{k}' | \delta V^{\vec{q}} | n \vec{k} \rangle &= N \delta_{\vec{k} + \vec{q}, \vec{k}' + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \delta V^{\vec{q}} | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \\ &+ N \delta_{\vec{k} - \vec{q}, \vec{k}' + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \delta V_{-\vec{q}} | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \quad . \quad (2.7) \end{aligned}$$

N ist die Anzahl der Zellen im Makroblock. In der obigen Gleichung (2.7) beschreibt der erste Term die Absorption, der zweite die Emission eines Phonons mit Impuls \vec{q} .

2.2 Berechnungsstruktur der $\langle n' \vec{k}' | \delta V^{\vec{q}} | n \vec{k} \rangle$ - Matrixelemente

Das Störpotential der nackten Elektron-Phonon-Wechselwirkung aus Gleichung (1.56) besteht aus drei Anteilen, die mathematisch unterschiedlich behandelt werden. Die Berechnung der Matrixelemente $\langle n' \vec{k}' | \delta V^{\vec{q}} | n \vec{k} \rangle$ wird daher in drei Blöcke

$$\delta V^{\vec{q}}(\vec{r}) = \delta V_0(\vec{r}) + \delta V_c(\vec{r}) + \delta V_m(\vec{r}) \quad (2.8)$$

gegliedert. Die Indizes 0, c und m stehen für die Beiträge der zentralen WSZ, für die *core*-Beiträge der Rumpf-Elektronenwolke und für die Beiträge der nicht zentralen Zellen. Die expliziten Ausdrücke für die Teilpotentiale lauten

$$\delta V_0(\vec{r}) = (\vec{s}(\vec{q}) + \vec{s}^*(\vec{q})) \frac{\vec{r}}{r^3} (-Z_{NUC} e^2), \quad (2.9)$$

$$\delta V_c(\vec{r}) = (\vec{s}(\vec{q}) + \vec{s}^*(\vec{q})) \frac{\vec{r}}{r^3} 4\pi e^2 \int_0^{\min(r, r_a)} dr' r'^2 \rho_{core}(r'), \quad (2.10)$$

$$\delta V_m(\vec{r}) = e^2 (Z_{NUC} - Z_{core}) \left[\vec{s}(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} + \vec{s}^*(\vec{q}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r} - \vec{R}^m|} \right]. \quad (2.11)$$

Die Berechnung der Teilmatrixelemente nach den obigen drei Ausdrücken unter Berücksichtigung des Translationsverhaltens aus Gleichung (2.6) ist für die drei weiteren Teilmatrixelemente bzw. Klassen von Integralen

$$\vec{I}_1 = \langle n' \vec{k}' | \frac{\vec{r}}{r^3} | n \vec{k} \rangle_{WSZ}, \quad (2.12)$$

$$\vec{I}_2 = \langle n' \vec{k}' | \frac{\vec{r}}{r^3} \int_0^{\min(r, r_a)} dr' r'^2 \rho_{core}(r') | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \quad (2.13)$$

und

$$I_3 = \langle n' \vec{k}' | r^{l-1} Y_{l-1\nu'}(\vec{r}) | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \quad (2.14)$$

äquivalent. Die Integrale (2.14) werden aus dem Ausdruck (2.11) nach Durchführung des verallgemeinerten Ewald-Verfahrens und der Berechnung der Gradientendarstellung der Kugelflächenfunktionen gemäß (A.9) hergeleitet. Für die Umrechnung der oben definierten Integrale in die jeweiligen Teilmatrixelemente müssen

die Werte für $\vec{s}^*(\vec{q})$ und $\vec{s}(\vec{q})$ eingesetzt werden. Diese Größen ermöglichen den Zugang zur Phonon–Polarisation und zur Temperaturabhängigkeit, wie in Kapitel 4 beschrieben. Um die Berechnungen der Summen in den Teilmatrixelementen nach den Ausdrücken aus den Gleichungen (2.9)–(2.11) zu separieren, werden die entsprechenden Werte zunächst in der Schreibweise

$$\vec{s}_1 = s_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{s}_2 = s_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{s}_3 = s_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

definiert. s_0 ist hier eine Konstante. Auf diese Weise erhält man die reduzierten Übergangskoeffizienten und Übergangswahrscheinlichkeiten der „nackten“ Elektron–Phonon–Wechselwirkung. Die entsprechenden vollständigen Übergangskoeffizienten und Übergangswahrscheinlichkeiten können dann über spezifische Liniarkombinationen gewonnen werden.

Aus technischen Gründen ist die MAPW–Darstellung der Wellenfunktionen aus Gleichung (1.34) für die Berechnung der Integrale (2.12)–(2.14) am geeignetsten. Jedes der drei oben genannten Integrale besteht aus vier unterschiedlichen Teilintegralen

$$\begin{aligned} \int_{WSZ} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^*(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) [\dots] &= \int_{WSZ} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{EW*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) [\dots] \\ &+ \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{EW*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) [\dots] \\ &+ \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{apw*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) [\dots] \\ &+ \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{apw*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) [\dots]. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Für die Bezeichnung $[\dots]$ sind die Terme zwischen den bra– und ket–Klammern aus den Gleichungen (2.12)–(2.14) dem Index $i = 1, 2, 3$ entsprechend einzusetzen. Die Berechnung eines jeden Teilmatrixelements dieser Gleichungen wird in vier weitere Anteile aufgesplittet. Dadurch erhält jedes Element einen zweiten Index j . Das Vektor–Symbol in den Integralen aus den Gleichungen (2.12) und (2.13) wird in den nächsten Ausdrücken der Übersichtlichkeit wegen unterdrückt. Es gilt die Schreibweise

$$I_i = \sum_{j=1,\dots,4} I_{ij}, \quad i = 1, 2, 3 \quad . \quad (2.17)$$

Dementsprechend schreibt man

$$\begin{aligned}
I_{i1} &= \int_{WSZ} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{EW*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) [\dots] \\
I_{i2} &= \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{EW*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) [\dots] \\
I_{i3} &= \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{apw*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) [\dots] \\
I_{i4} &= \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{apw*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) [\dots] .
\end{aligned} \tag{2.18}$$

2.3 Die Potentialtheorie und die Berechnung der Teilmatrixelemente I_{i1}

Die I_{i1} 's symbolisieren die Teilmatrixelemente mit reinen ebenen Wellen sowohl im bra als auch ket. Sie sind die Fourier-Koeffizienten des Störpotentials und können einfacher durch die Potentialtheorie als durch direktes Berechnen der Integrationen gewonnen werden.

Die Änderung der Ladungsdichte kann aufgrund der Auslenkung der von *core*-Elektronen ummantelten Kerne definiert werden als

$$\begin{aligned}
\delta\rho(\vec{r}) &= e Z_{NUC} \sum_{\vec{R}^m} \left[\delta(\vec{r} - \vec{R}^m - \vec{s}^m) - \delta(\vec{r} - \vec{R}^m) \right] \\
&- e \sum_{\vec{R}^m} \left[\rho_{core}(\vec{r} - \vec{R}^m - \vec{s}^m) - \rho_{core}(\vec{r} - \vec{R}^m) \right] .
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Für die Fourier-transformierte Darstellung dazu folgt

$$\begin{aligned}
\delta\rho(\vec{p}) &= \int d^3r' e^{-i\vec{p}\vec{r}'} \delta\rho(\vec{r}') \\
&= e Z_{NUC} \sum_{\vec{R}^m} \left[e^{i\vec{p}(\vec{R}^m + \vec{s}^m)} - e^{i\vec{p}\vec{R}^m} \right] \\
&- e \sum_{\vec{R}^m} \left[e^{i\vec{p}(\vec{R}^m + \vec{s}^m)} - e^{i\vec{p}\vec{R}^m} \right] \int d^3r' \rho_{core}(\vec{r}') e^{-i\vec{p}\vec{r}'} \\
&= e \left[Z_{NUC} - \int_{K(0,r_a)} d^3r' \rho_{core}(\vec{r}') e^{-i\vec{p}\vec{r}'} \right] \\
&\quad \sum_{\vec{R}^m} \left[e^{-i\vec{p}(\vec{R}^m + \vec{s}^m)} - e^{-i\vec{p}\vec{R}^m} \right] .
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Die Summanden in den Klammern werden nach Potenzen von \vec{s}^m zerlegt und nur die in \vec{s}^m linearen Ausdrücke mitgenommen. Man erhält

$$\begin{aligned}\delta\rho(\vec{p}) &= e \left[Z_{NUC} - \int_{K(0,r_a)} d^3r' \rho_{core}(\vec{r}') e^{-i\vec{p}\vec{r}'} \right] \sum_{\vec{K}^m} (-i) \vec{p} \vec{s}^m e^{-i\vec{p}\vec{K}^m} \\ &= -i e \left[Z_{NUC} - \int_{K(0,r_a)} d^3r' \rho_{core}(\vec{r}') e^{-i\vec{p}\vec{r}'} \right] \\ &\quad \cdot \vec{p} \sum_{\vec{K}^m} \left(\vec{s}(\vec{q}) e^{i(\vec{q}-\vec{p})\vec{K}^m} + \vec{s}^*(\vec{q}) e^{-i(\vec{q}+\vec{p})\vec{K}^m} \right)\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}\delta\rho(\vec{p}) &= -\frac{(2\pi)^3 i e}{\Omega} \left[Z_{NUC} - \int_{K(0,r_a)} d^3r' \rho_{core}(\vec{r}') e^{-i\vec{p}\vec{r}'} \right] \\ &\quad \cdot \vec{p} \sum_{\vec{K}} \left(\vec{s}(\vec{q}) \delta(\vec{p} - \vec{q} + \vec{K}) + \vec{s}^*(\vec{q}) \delta(\vec{p} + \vec{q} - \vec{K}) \right) .\end{aligned}\tag{2.21}$$

Das elektrostatische Potential und damit auch das Störpotential, das von der Dichte induziert wird, genügt der Laplace-Gleichung

$$\Delta \delta V = -4\pi e \delta\rho \quad .\tag{2.22}$$

Die Fourier-Transformierte des Störpotentials läßt sich aus der Fourier-Transformierten der Dichte-Störung bestimmen. Es gilt

$$\delta V(\vec{p}) = \int d^3r' e^{-i\vec{p}\vec{r}'} \delta V(\vec{r}') = 4\pi e \frac{\delta\rho(\vec{p})}{p^2}\tag{2.23}$$

und

$$\begin{aligned}\delta V(\vec{p}) &= -4\pi i e \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \left[Z_{NUC} - \int_{K(0,r_a)} d^3r' \rho_{core}(\vec{r}') e^{-i\vec{p}\vec{r}'} \right] \\ &\quad \cdot \frac{\vec{p}}{p^2} \sum_{\vec{K}} \left(\vec{s}(\vec{q}) \delta(\vec{p} - \vec{q} + \vec{K}) + \vec{s}^*(\vec{q}) \delta(\vec{p} + \vec{q} - \vec{K}) \right) .\end{aligned}\tag{2.24}$$

Die wichtigsten partiellen Fälle dieser Identität sind die Fälle für $\vec{p} = \pm\vec{q} + \vec{K}$. Setzt man diese ein, so erhält man

$$\delta V(\vec{q} + \vec{K}) = -4\pi i e \left[Z_{NUC} - \int_{K(0,r_a)} d^3r' \rho_{core}(\vec{r}') e^{-i(\vec{q}+\vec{K})\vec{r}'} \right] \frac{(\vec{q} + \vec{K})\vec{s}(\vec{q})}{|\vec{q} + \vec{K}|^2}\tag{2.25}$$

$$\delta V(-\vec{q} + \vec{K}) = -4\pi i e \left[Z_{NUC} - \int_{K(0,r_a)} d^3r' \rho_{core}(\vec{r}') e^{-i(\vec{K}-\vec{q})\vec{r}'} \right] \frac{(\vec{K} - \vec{q})\vec{s}^*(\vec{q})}{|\vec{q} + \vec{K}|^2}.\tag{2.26}$$

2.4 Berechnung der APW-Teilmatrixelemente

2.4.1 Explizite Darstellung der MAPW-Wellenfunktion außerhalb des irreduziblen Keils

Die MAPW-Ansatzfunktionen aus den Gleichungen (1.30) und (1.34) sind auf den irreduziblen Keil der ersten Brillouin-Zone (BZ) beschränkt. Für die Berechnung der Integrale vom Typ der Gleichung (1.41) sind die entsprechenden expliziten Darstellungen innerhalb der vollständigen ersten BZ notwendig. Jedes \vec{k}' kann durch einen Symmetrieeoperator auf einen Vektor \vec{k}'' gemäß

$$\vec{k}' = \hat{\alpha} \vec{k}'' \quad (2.27)$$

aus dem irreduziblen Keil abgebildet werden. Die Anwendung von Gleichung (1.39) auf den reinen EW-Anteil der MAPW-Wellenfunktion nach den Gleichungen (1.31) und (1.35) ergibt

$$U(n\hat{\alpha}\vec{k}, \hat{\alpha}\vec{K}) = U(n\vec{k}, \vec{K}) \quad . \quad (2.28)$$

Weiter gilt

$$E_{n\hat{\alpha}\vec{k}} = E_{n\vec{k}} \quad . \quad (2.29)$$

Mit der Anwendung von Gleichung (1.40) auf den APW-Anteil aus (1.32) bzw. (1.36) erhält man anstelle von $Y_{l\nu}(\vec{r})$ in den Ausdrücken die Terme $Y_{l\nu}(\hat{\alpha}^{-1}\vec{r})$. Eine Integration vom Typ $\int d\Omega Y_{l\nu}(\vec{r}) Y_{l_1\nu_1}(\hat{\alpha}^{-1}\vec{r})$ über eine Kugel auszuführen, ist direkt nicht möglich. Eine Kugelflächenfunktion $Y_{l\nu}(\hat{\alpha}^{-1}\vec{r})$ läßt sich allerdings als eine Linearkombination der Kugelflächenfunktionen

$$Y_{l\nu}(\hat{\alpha}\vec{r}) = \sum_{\nu'=\overline{1,2l+1}} T_{\nu'}^{l\nu}(\hat{\alpha}^{-1}) Y_{l\nu'}(\vec{r}) \quad (2.30)$$

gleicher Ordnung darstellen. Für den APW-Anteil der MAPW-Wellenfunktion gilt somit

$$\psi_{n\hat{\alpha}\vec{k}}^{APW}(\vec{r}) = \sum_{\substack{l=\overline{0,L} \\ \nu,\nu'=\overline{1,2l+1}}} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} T_{\nu'}^{l\nu}(\hat{\alpha}^{-1}) Y_{l\nu'}(\vec{r}) g_{n\vec{k}}^{l\nu}(r) \quad (2.31)$$

und

$$\psi_{n\hat{\alpha}\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) = \sum_{\substack{l=\overline{0,L} \\ \nu,\nu'=\overline{1,2l+1}}} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} T_{\nu'}^{l\nu}(\hat{\alpha}^{-1}) Y_{l\nu'}(\vec{r}) f_{n\vec{k}}^{l\nu}(r) \quad (2.32)$$

Die Koeffizienten $T_{\nu'}^{l\nu}(\hat{\alpha}^{-1})$ für den vorgegebenen Symmetrieoperator $\hat{\alpha}$ können entweder durch eine Rekursionsmethode oder durch die Lösung eines linearen Gleichungssystems der Gestalt von Gleichung (2.30) an $2l + 1$ zufällig ausgewählten Vektoren \vec{r} gewonnen werden. In dieser Arbeit wird die Lösung eines linearen Systems verwendet. Für $\hat{\alpha} = \hat{1}$ gilt

$$T_{\nu'}^{l\nu}(\hat{1}) = \delta_{\nu,\nu'} \quad . \quad (2.33)$$

2.4.2 Die Berechnung des APW-Anteils von \vec{I}_1

Ausgangspunkt der Berechnungen ist das Integral

$$\vec{I}_{12} = \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{EW*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) \frac{\vec{r}}{r^3} \quad . \quad (2.34)$$

Ersetzt man \vec{k}' nach Gleichung (2.27) durch $\hat{\alpha}\vec{k}''$ und wendet den Symmetrieoperator $\hat{\alpha}$ auf den EW-Anteil der MAPW-Teilwellenfunktion aus Gleichung (1.35) an, so ergibt sich der obige Integralausdruck zu

$$\sum_{\vec{k}''l\nu} U(n\hat{\alpha}\vec{k}'', \hat{\alpha}\vec{K}'') (2l + 1) i^l \eta_{l\nu} \int_{K(0,r_a)} d^3r e^{-i(\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')\vec{r}} Y_{l\nu}(\vec{r}^0) \frac{\vec{r}}{r^3} f_{l\nu}(\vec{r}) \quad .$$

Dabei wurden explizit die Terme für die MAPW-Teilwellenfunktionen aus den Gleichungen (1.35) und (1.36) eingesetzt und in geeigneter Weise die Summen über l, ν und \vec{K}'' mit der Integration über die APW-Kugel $K(0, r_a)$ vertauscht. Der Exponent in der obigen Gleichung wird im folgenden nach Kugelflächenfunktionen und sphärischen Bessel-Funktionen gemäß Gleichung (A.6) des Anhangs A.1 zerlegt und die Summation in der Entwicklungsreihe ebenfalls mit der Integration über die APW-Kugel vertauscht. Damit folgt für den obigen Ausdruck

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\vec{k}''l\nu \\ l'\nu'}} U(n\hat{\alpha}\vec{k}'', \hat{\alpha}\vec{K}'') (2l + 1) (2l' + 1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} Y_{l'\nu'}((\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')^0) \\ & \cdot \int_{K(0,r_a)} d^3r Y_{l\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu'}(\vec{r}^0) \frac{\vec{r}}{r^3} j_l(|\hat{\alpha}(\vec{k}'' + \vec{K}'')|r) f_{l\nu}(\vec{r}) \quad . \end{aligned}$$

Berücksichtigt man Gleichung (A.8) aus Anhang A.1 und spaltet die Integration über die APW-Kugel $\int_{K(0,r_a)} d^3r$ in die radiale Integration von 0 bis r_a und in die Raumwinkelintegration über 4π auf, so erhält man

$$\sum_{\substack{\vec{k}'' \\ l' \nu'}} U(n\hat{\alpha}\vec{k}'', \hat{\alpha}\vec{K}'') (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} Y_{l'\nu'}((\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')^0) \\ \cdot \int d\Omega Y_{l\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu'}(\vec{r}^0) \begin{pmatrix} Y_{13}(\vec{r}^0) \\ Y_{12}(\vec{r}^0) \\ Y_{11}(\vec{r}^0) \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr j_l(|\hat{\alpha}(\vec{k}'' + \vec{K}'')|r) f_{\frac{l\nu}{n\vec{k}}}(r).$$

Die Raumwinkelintegration über 4π dreier Kugelflächenfunktionen ist *per definitionem*, siehe Gleichung (A.10) des Anhangs, ein Gaunt-Koeffizient mit entsprechenden Indizes. Wegen der Unitarität von $\hat{\alpha}$ gilt

$$|\hat{\alpha}(\vec{k}'' + \vec{K}'')| = |\vec{k}'' + \vec{K}''|.$$

Berücksichtigt man zusätzlich Gleichung (2.28), so ergibt sich für das Integral

$$\vec{I}_{12} = \sum_{\substack{\vec{k}'' \\ l' \nu'}} U(n\vec{k}'', \vec{K}'') (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} Y_{l'\nu'}((\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')^0) \\ \cdot \begin{pmatrix} \langle l\nu | l'\nu' | 13 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu' | 12 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu' | 11 \rangle_G \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr j_l(|\vec{k}'' + \vec{K}''|r) f_{\frac{l\nu}{n\vec{k}}}(r). \quad (2.35)$$

Die Berechnung des Integrals

$$\vec{I}_{13} = \int_{K(0, r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{apw*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (2.36)$$

läuft analog zu der des Integrals \vec{I}_{12} ab. \vec{k}' wird nach Gleichung (2.27) durch $\hat{\alpha}\vec{k}''$, die Wellenfunktionen $\psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r})$ und $\psi_{n'\hat{\alpha}\vec{k}''}^{apw}(\vec{r})$ durch die Terme der Gleichungen (1.35) und (2.32) ersetzt. Die Summen über die Indizes l', ν', ν'' und \vec{K} werden mit der Integration über die APW-Kugel $K(0, r_a)$ vertauscht. Das Integral \vec{I}_{13} hat die Form

$$\sum_{\vec{K}'' l' \nu' \nu''} U(n\vec{k}, \vec{K}) (2l'+1) i^{-l'} \eta_{l'\nu'} T_{\nu''}^{l' \nu'} (\hat{\alpha}^{-1}) \int_{K(0, r_a)} d^3r e^{i(\vec{k} + \vec{K})\vec{r}} Y_{l'\nu''}(\vec{r}^0) \frac{\vec{r}}{r^3} f_{\frac{l' \nu''}{n' \vec{k}''}}(r).$$

Anschließend wird der Exponent in die Reihe nach Kugelflächenfunktionen und sphärischen Bessel-Funktionen wie oben erwähnt entwickelt. Die Summationen werden analog zum vorigen mit der Integration über die APW-Kugel vertauscht.

Der obige Ausdruck lautet dann

$$\sum_{\vec{k}'' l' \nu' \nu''} U(n\vec{k}, \vec{K}) (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} Y_{l\nu}((\vec{k} + \vec{K})^0) T_{\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \int_{K(0, r_a)} d^3r Y_{l\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu''}(\vec{r}^0) \frac{\vec{r}}{r^3} j_l(|\vec{k} + \vec{K}| r) f_{n' \vec{k}''}^{l'\nu'}(r).$$

Unter Berücksichtigung von Gleichung (A.8) spaltet man auch hier $\int_{K(0, r_a)} d^3r$ in die radiale Integration von 0 bis r_a und die Raumwinkel-Integration über 4π auf und erhält

$$\sum_{\vec{k}'' l' \nu' \nu''} U(n\vec{k}, \vec{K}) (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} Y_{l\nu}((\vec{k} + \vec{K})^0) T_{\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \int d\Omega Y_{l\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu''}(\vec{r}^0) \begin{pmatrix} Y_{13}(\vec{r}^0) \\ Y_{12}(\vec{r}^0) \\ Y_{11}(\vec{r}^0) \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr j_l(|\vec{k} + \vec{K}| r) f_{n' \vec{k}''}^{l'\nu'}(r).$$

Die Raumwinkelintegration über 4π dreier Kugelflächenfunktionen wird durch die Gaunt-Koeffizienten gemäß Gleichung (A.10) des Anhangs A.1 ersetzt. Dadurch ergibt sich

$$\vec{I}_{13} = \sum_{\vec{k}'' l' \nu' \nu''} U(n\vec{k}, \vec{K}) (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} Y_{l\nu}((\vec{k} + \vec{K})^0) T_{\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \begin{pmatrix} \langle l\nu | l'\nu'' | 13 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu'' | 12 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu'' | 11 \rangle_G \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr j_l(|\vec{k} + \vec{K}| r) f_{n' \vec{k}''}^{l'\nu'}(r). \quad (2.37)$$

Bei der Berechnung des Integrals

$$\vec{I}_{14} = \int_{K(0, r_a)} d^3r \psi_{n' \vec{k}'}^{apw*}(\vec{r}) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (2.38)$$

wird \vec{k}' ebenfalls nach Gleichung (2.27) durch $\hat{\alpha}\vec{k}''$ substituiert. Die Wellenfunktionen $\psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r})$ und $\psi_{n' \hat{\alpha}\vec{k}''}^{apw}(\vec{r})$ ersetzt man durch die Terme aus den Gleichungen (1.36) und (2.32). Nach Vertauschen der Summen über die Indizes l, ν, l', ν' und ν'' mit der Integration über die APW-Kugel $K(0, r_a)$ nimmt \vec{I}_{14} folgende Gestalt an

$$\sum_{l\nu l'\nu' \nu''} (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} T_{\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \int_{K(0, r_a)} d^3r Y_{l\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu''}(\vec{r}^0) \frac{\vec{r}}{r^3} f_{n\vec{k}}^{l\nu}(r) f_{n' \vec{k}''}^{l'\nu'}(r) \cdot$$

Die Zerlegung der Integration über die APW-Kugel in die radiale Integration und die Raumwinkel-Integration über 4π liefert den Ausdruck

$$\sum_{l\nu l'\nu' l''\nu''} (2l+1)(2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} T_{\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \cdot \int d\Omega Y_{l\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu''}(\vec{r}^0) \begin{pmatrix} Y_{13}(\vec{r}^0) \\ Y_{12}(\vec{r}^0) \\ Y_{11}(\vec{r}^0) \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr f_{\vec{n}\vec{k}}^{l\nu}(r) f_{\vec{n}'\vec{k}''}^{l'\nu'}(r).$$

Ersetzt man wie vorher die Raumwinkelintegration über 4π dreier Kugelflächenfunktionen durch die Gaunt-Koeffizienten aus Gleichung (A.10) des Anhangs A.1, so folgt

$$\begin{aligned} \vec{I}_{14} = & \sum_{l\nu l'\nu' l''\nu''} (2l+1)(2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} T_{\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ & * \begin{pmatrix} \langle l\nu | l'\nu'' | 13 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu'' | 12 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu'' | 11 \rangle_G \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr f_{\vec{n}\vec{k}}^{l\nu}(r) f_{\vec{n}'\vec{k}''}^{l'\nu'}(r). \end{aligned} \quad (2.39)$$

2.4.3 Die Berechnung des APW-Anteils von \vec{I}_2

Nach Vergleich der APW-Anteile aus Gleichung (2.13) mit denen aus (2.12) ergibt sich, daß sich beide Anteile nur um eine zusätzliche von r abhängige Integralfunktion

$$\overline{F}_c(r) = \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r')$$

unterscheiden. Die in Gleichung (2.13) durch $\Theta(r_a - r)$ gestellte Forderung ist innerhalb der APW-Kugel immer erfüllt. Wiederholt man für das Integral \vec{I}_{2j} , mit $j = 2, 3, 4$, sukzessiv die Umformungen wie im vorherigen Abschnitt, die zu den Ausdrücken von \vec{I}_{1j} geführt haben, so erhält man eine mnemotechnische Regel für die explizite Gestalt von \vec{I}_{2j} . Man ergänzt die Radialintegration des expliziten Ausdrucks von \vec{I}_{1j} zu festem j um die Integralfunktion

$$\int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r') \quad . \quad (2.40)$$

Die Integrale lassen sich dann schreiben als

$$\begin{aligned}
\vec{I}_{22} &= \sum_{\substack{\vec{k}'' l'' \\ l' \nu'}} U(n\vec{k}'', \vec{K}'') (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} Y_{l'\nu'}((\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')^0) \\
&\cdot \begin{pmatrix} \langle l\nu | l'\nu' | 13 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu' | 12 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu' | 11 \rangle_G \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr j_l(|\vec{k}'' + \vec{K}''|r) f_{\nu_{n\vec{k}}}^{l\nu}(r) \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r'),
\end{aligned} \tag{2.41}$$

$$\begin{aligned}
\vec{I}_{23} &= \sum_{\vec{k}'' l'' \nu''} U(n\vec{k}'', \vec{K}'') (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} Y_{l\nu}((\vec{k} + \vec{K})^0) T_{\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\
&\cdot \begin{pmatrix} \langle l\nu | l'\nu'' | 13 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu'' | 12 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu'' | 11 \rangle_G \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr j_l(|\vec{k} + \vec{K}|r) f_{\nu_{n\vec{k}}}^{l\nu}(r) \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r'),
\end{aligned} \tag{2.42}$$

$$\begin{aligned}
\vec{I}_{24} &= \sum_{l\nu l'' \nu''} (2l+1) (2l'+1) i^{l-l'} \eta_{l\nu} \eta_{l'\nu'} T_{\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\
&\cdot \begin{pmatrix} \langle l\nu | l'\nu'' | 13 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu'' | 12 \rangle_G \\ \langle l\nu | l'\nu'' | 11 \rangle_G \end{pmatrix} \int_0^{r_a} dr f_{\nu_{n\vec{k}}}^{l\nu}(r) f_{\nu_{n\vec{k}}}^{l'\nu''}(r) \int_0^r dr' r'^2 \rho_{core}(r').
\end{aligned} \tag{2.43}$$

2.4.4 Berechnung des APW-Anteils von I_3

Die Berechnung für das Integral I_{3j} erfolgt in gleicher Weise wie die der Abschnitte 2.4.2 und 2.4.3. Das Integral

$$I_{32} = \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{EW*}(\vec{r}) r^{l-1} Y_{l-1\nu'}(\vec{r}^0) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) \tag{2.44}$$

läßt sich nach der Ersetzung von \vec{k}' gemäß Gleichung (2.27) durch $\hat{\alpha}\vec{k}''$, die Wellenfunktionen $\psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r})$ und $\psi_{n'\hat{\alpha}\vec{k}''}^{apw}(\vec{r})$ durch die Gleichung (1.35) bzw.(2.32) und Vertauschung der Summen über die Indizes l', ν', ν'' und \vec{K} mit der Integration über die APW-Kugel $K(0, r_a)$ schreiben als

$$\begin{aligned}
&\sum_{\vec{k}'' l'' \nu''} U(n\hat{\alpha}\vec{k}'', \hat{\alpha}\vec{K}'') (2l''+1) i^{l''} \eta_{l''\nu''} \\
&\cdot \int_{K(0,r_a)} d^3r e^{-i(\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')\vec{r}} Y_{l''\nu''}(\vec{r}^0) Y_{l-1\nu'}(\vec{r}^0) r^{l-1} f_{\nu_{n\vec{k}}}^{l''\nu''}(r) .
\end{aligned}$$

Durch die Zerlegung des Exponenten in die Entwicklungsreihe nach Kugelflächenfunktionen und sphärischen Bessel-Funktionen gemäß Gleichung (A.6) und Vertauschen der Summationen in dieser Reihe mit der Integration über die APW-Kugel hat man

$$\sum_{\substack{\vec{k}'' l'' \nu'' \\ l''' \nu'''}} U(n\vec{k}'', \vec{K}'') (2l'' + 1) (2l''' + 1) i^{l'' - l'''} \eta_{l'' \nu''} \eta_{l''' \nu'''} Y_{l'' \nu''}((\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')^0) \\ \cdot \int_{K(0, r_a)} d^3 r Y_{l-1\nu'}(\vec{r}^0) Y_{l'' \nu''}(\vec{r}^0) Y_{l''' \nu'''}(\vec{r}^0) j_l(|\vec{k}'' + \vec{K}''|r) r^{l-1} f_{n\vec{k}}^{l'' \nu''}(r).$$

Spaltet man auch hier $\int_{K(0, r_a)} d^3 r$ in die radiale Integration von 0 bis r_a und die Raumwinkel-Integration über 4π auf, so erhält man aus dem obigen Ausdruck

$$\sum_{\substack{\vec{k}'' l'' \nu'' \\ l''' \nu'''}} U(n\vec{k}'', \vec{K}'') (2l'' + 1) (2l''' + 1) i^{l'' - l'''} \eta_{l'' \nu''} \eta_{l''' \nu'''} Y_{l'' \nu''}((\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')^0) \\ \cdot \int d\Omega Y_{l-1\nu'}(\vec{r}^0) Y_{l'' \nu''}(\vec{r}^0) Y_{l''' \nu'''}(\vec{r}^0) \int_0^{r_a} dr r^{l+1} j_{l'''}(|\vec{k}'' + \vec{K}''|r) f_{n\vec{k}}^{l'' \nu''}(r).$$

In der Gaunt-Koeffizientenschreibweise (siehe Gleichung (A.10)) mit entsprechenden Indizes ist

$$I_{32} = \sum_{\substack{\vec{k}'' l'' \nu'' \\ l''' \nu'''}} U(n\vec{k}'', \vec{K}'') (2l'' + 1) (2l''' + 1) i^{l'' - l'''} \eta_{l'' \nu''} \eta_{l''' \nu'''} Y_{l'' \nu''}((\hat{\alpha}\vec{k}'' + \hat{\alpha}\vec{K}'')^0) \\ \cdot \langle l - 1\nu' \mid l'' \nu'' \mid l''' \nu''' \rangle_G \int_0^{r_a} dr r^{l+1} j_{l'''}(|\vec{k}'' + \vec{K}''|r) f_{n\vec{k}}^{l'' \nu''}(r). \quad (2.45)$$

Das Integral

$$I_{33} = \int_{K(0, r_a)} d^3 r \psi_{n'\vec{k}'}^{apw*}(\vec{r}) r^{l-1} Y_{l-1\nu}(\vec{r}^0) \psi_{n\vec{k}}^{EW}(\vec{r}) \quad (2.46)$$

liefert in analoger Prozedur zu Integral I_{32} zunächst den Ausdruck

$$\sum_{\vec{k} l' \nu''} U(n\vec{k}, \vec{K}) (2l' + 1) i^{-l'} \eta_{l' \nu''} T_{\nu''}^{l' \nu''}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \int_{K(0, r_a)} d^3 r e^{i(\vec{k} + \vec{K})\vec{r}} Y_{l' \nu''}(\vec{r}^0) Y_{l-1\nu}(\vec{r}^0) r^{l-1} f_{n'\vec{k}}^{l' \nu''}(r) \cdot$$

Die Summen, die mit der Integration über die APW-Kugel vertauscht werden, gehen über die Indizes l', ν', ν'' und \vec{K} . Die Zerlegung von $e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}}$ in die Reihe nach Kugelflächenfunktionen und sphärischen Bessel-Funktionen (siehe Gleichung (A.6)) und Vertauschung der Summationen mit der Integration über die APW-Kugel führt zu

$$\sum_{\substack{\vec{k}l'\nu'\nu'' \\ l''l'''\nu''\nu''''}} U(n\vec{k}, \vec{K}) (2l' + 1) (2l''' + 1) i^{l''' - l'} \eta_{l'\nu'} \eta_{l'''\nu''} Y_{l'''\nu''}((\vec{k} + \vec{K})^0) T_{\nu''\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \int_{K(0,r_a)} d^3r Y_{l'''\nu''}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu'}(\vec{r}^0) Y_{l-1\nu}(\vec{r}^0) r^{l-1} j_{l'''}(|\vec{k} + \vec{K}| r) f_{n'\vec{k}''}^{l'\nu'}(r)$$

und

$$\sum_{\substack{\vec{k}l'\nu'\nu'' \\ l''l'''\nu''\nu''''}} U(n\vec{k}, \vec{K}) (2l' + 1) (2l''' + 1) i^{l''' - l'} \eta_{l'\nu'} \eta_{l'''\nu''} Y_{l'''\nu''}((\vec{k} + \vec{K})^0) T_{\nu''\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \int d\Omega Y_{l-1\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu'}(\vec{r}^0) Y_{l'''\nu''}(\vec{r}^0) \int_0^{r_a} dr r^{l+1} j_{l'''}(|\vec{k} + \vec{K}| r) f_{n'\vec{k}''}^{l'\nu'}(r) \quad ,$$

wobei man wieder $\int_{K(0,r_a)} d^3r$ in die radiale Integration von 0 bis r_a und die Raumwinkel-Integration über 4π aufgespaltet. Die Gaunt-Koeffizientenschreibweise liefert dann

$$I_{33} = \sum_{\substack{\vec{k}l'\nu'\nu'' \\ l''l'''\nu''\nu''''}} U(n\vec{k}, \vec{K}) (2l' + 1) (2l''' + 1) i^{l''' - l'} \eta_{l'\nu'} \eta_{l'''\nu''} Y_{l'''\nu''}((\vec{k} + \vec{K})^0) T_{\nu''\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \langle l - 1\nu \mid l'\nu'' \mid l'''\nu'' \rangle_G \int_0^{r_a} dr r^{l+1} j_{l'''}(|\vec{k} + \vec{K}| r) f_{n'\vec{k}''}^{l'\nu'}(r). \quad (2.47)$$

Für das Integral

$$I_{34} = \int_{K(0,r_a)} d^3r \psi_{n'\vec{k}'}^{apw*}(\vec{r}) r^{l-1} Y_{l-1\nu}(\vec{r}^0) \psi_{n\vec{k}}^{apw}(\vec{r}) \quad (2.48)$$

ergibt sich in Übereinstimmung mit den Integralen I_{32} und I_{33}

$$\sum_{l'\nu'l''\nu''\nu''\nu''''} (2l' + 1) (2l'' + 1) i^{l' - l''} \eta_{l'\nu'} \eta_{l''\nu''} T_{\nu''\nu''}^{l'\nu'}(\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \int_{K(0,r_a)} d^3r Y_{l-1\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu'}(\vec{r}^0) Y_{l''\nu''}(\vec{r}^0) r^{l-1} f_{n\vec{k}}^{l'\nu'}(r) f_{n'\vec{k}''}^{l''\nu''}(r)$$

und

$$\sum_{l' \nu' l'' \nu'' \nu'''} (2l' + 1) (2l'' + 1) i^{l' - l''} \eta_{l' \nu'} \eta_{l'' \nu''} T_{\nu'''}^{l'' \nu''} (\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \int d\Omega Y_{l-1\nu}(\vec{r}^0) Y_{l' \nu'}(\vec{r}^0) Y_{l'' \nu''}(\vec{r}^0) \int_0^{r_a} dr r^{l+1} f_{n \vec{k}}^{l' \nu'}(r) f_{n' \vec{k}''}^{l'' \nu''}(r).$$

Damit erhält man den endgültigen Integralausdruck

$$I_{44} = \sum_{l' \nu' l'' \nu'' \nu'''} (2l' + 1) (2l'' + 1) i^{l' - l''} \eta_{l' \nu'} \eta_{l'' \nu''} T_{\nu'''}^{l'' \nu''} (\hat{\alpha}^{-1}) \\ \cdot \langle l - 1\nu | l' \nu' | l'' \nu'' \rangle_G \int_0^{r_a} dr r^{l+1} f_{n \vec{k}}^{l' \nu'}(r) f_{n' \vec{k}''}^{l'' \nu''}(r) . \quad (2.49)$$

Kapitel 3

Austausch-Korrelationseffekte in der Abschirmung

3.1 Integralgleichungen der Austausch-Korrelationsabschirmung

Im folgenden werden Vielteilcheneffekte im Rahmen der LDA-Näherung behandelt. Dabei werden Austausch- und Korrelationseffekte über ein Funktional der lokalen Dichte ρ definiert. Das Austausch-Korrelationsfunktional wird mit $V_{xc}[\rho]$ bezeichnet.

Die Grundlagen dieser Näherung können aus [35] entnommen werden. Es existieren verschiedene Ausdrücke für $V_{xc}[\rho]$, die unter verschiedenen theoretischen Aspekten gewonnen werden können.

Hier wird der Ausdruck von [90] verwendet¹. Da die Dichte $\rho = \rho(\vec{r})$ eine Funktion der Ortsvariablen \vec{r} ist, kann das Austausch-Korrelationsfunktional als eine Funktion von \vec{r} geschrieben werden. Verändert sich die Dichte aufgrund einer Wechselwirkung, so verändert sich auch das Austausch-Korrelationsfunktional. In der linearen Antworttheorie läßt sich diese Veränderung als ein Funktional der Dichte und folglich als eine Funktion der Ortsvariablen definieren

$$\delta V_{xc}[\rho] = V_{xc}[\rho + \delta\rho] - V_{xc}[\rho] \simeq \frac{\delta V_{xc}}{\delta\rho} \delta\rho \quad , \quad (3.1)$$

$$\mu_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta V_{xc}}{\delta\rho} \delta\rho(\vec{r}) \quad . \quad (3.2)$$

Eine Dichte-Störung $\delta\rho(\vec{r})$ induziert das zusätzliche elektrostatische Potential

$$\delta V_c(\vec{r}) = e^2 \int d^3r' \frac{\delta\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad . \quad (3.3)$$

¹Das Programmpaket wurde von B. Engel zur Berechnung der Dichte-Funktionale zur Verfügung gestellt

Das gesamte Störpotential ist

$$\delta V^{tot}(\vec{r}) = \delta V(\vec{r}) + \delta V_c(\vec{r}) + \mu_{xc}(\vec{r}). \quad (3.4)$$

Die ungestörte Zustandsdichte hat die Form

$$\rho_0(\vec{r}) = \sum_{n\vec{k}} \Theta(E_F - E_{n\vec{k}}) |\psi_{n\vec{k}}^{(0)}(\vec{r})|^2. \quad (3.5)$$

Für die gestörte Zustandsdichte gilt

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{n\vec{k}} \Theta(E_F - E_{n\vec{k}}) |\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})|^2. \quad (3.6)$$

Zum Unterschied zu Kapitel 1 führen wir die zeitunabhängigen Abkürzungen

$$C_{\substack{n_1\vec{k}_1 \\ n_2\vec{k}_2}} = \Phi_{n_1\vec{k}_1, n_2\vec{k}_2}^*(t) e^{(E_{n_1\vec{k}_1} - E_{n_2\vec{k}_2}) \frac{t}{\hbar}} \quad (3.7)$$

ein. Das Pauli-Prinzip schränkt die Auswahl der zu berücksichtigenden Übergänge zusätzlich ein. Demnach dürfen nur die Übergänge aus den besetzten in die unbesetzten Zustände berücksichtigt werden. Für die lineare Dichtestörung folgt

$$\begin{aligned} \delta\rho(\vec{r}) &= \sum_{\substack{n_1\vec{k}_1 \\ n_2\vec{k}_2}} \Theta(E_F - E_{n_1\vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2\vec{k}_2} - E_F) \\ &\cdot \left[C_{\substack{n_1\vec{k}_1 \\ n_2\vec{k}_2}} \psi_{n_2\vec{k}_2}^*(\vec{r}) \psi_{n_1\vec{k}_1}(\vec{r}) + C_{\substack{n_1\vec{k}_1 \\ n_2\vec{k}_2}}^* \psi_{n_1\vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{n_2\vec{k}_2}(\vec{r}) \right]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Da die Übergangskoeffizienten

$$C_{\substack{n_1\vec{k}_1 \\ n_2\vec{k}_2}} = \frac{\langle n_1\vec{k}_1 | \delta V^{tot} | n_2\vec{k}_2 \rangle}{E_{n_2\vec{k}_2} - E_{n_1\vec{k}_1}} \quad (3.9)$$

in Gleichung (3.8) Integrale der Dichtestörung enthalten, ist Gleichung (3.8) zusammen mit den Gleichungen (3.2) bis (3.4) eine lineare Integralgleichung für die Dichtestörung bzw. für das abgeschirmte Potential. Die Integralgleichung für die Dichtestörung ist eine inhomogene Fredholmsche Integralgleichung zweiter Art mit der Dichtestörung der nackten Elektron-Phonon-Wechselwirkung als Inhomogenität

$$\begin{aligned} \delta\rho^{[0]}(\vec{r}) &= \sum_{\substack{n_1\vec{k}_1 \\ n_2\vec{k}_2}} \Theta(E_F - E_{n_1\vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2\vec{k}_2} - E_F) \\ &\cdot \left[C_{\substack{n_1\vec{k}_1 \\ n_2\vec{k}_2}}^{[0]} \psi_{n_2\vec{k}_2}^*(\vec{r}) \psi_{n_1\vec{k}_1}(\vec{r}) + C_{\substack{n_1\vec{k}_1 \\ n_2\vec{k}_2}}^{[0]*} \psi_{n_1\vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{n_2\vec{k}_2}(\vec{r}) \right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Dabei ist

$$C_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 \end{smallmatrix}}^{[0]} = \frac{\langle n_1 \vec{k}_1 | \delta V | n_2 \vec{k}_2 \rangle}{E_{n_2 \vec{k}_2} - E_{n_1 \vec{k}_1}}. \quad (3.11)$$

Die Linearität der Dichtestörung kann ausgenutzt werden, um die Beiträge einzelner Phononen voneinander zu entkoppeln, d.h.

$$\delta \rho = \sum_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 \end{smallmatrix}} \cdots = \sum_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{q} \end{smallmatrix}} \cdots = \sum_{\vec{q}} \sum_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \end{smallmatrix}} \cdots = \sum_{\vec{q}} \delta \rho_{\vec{q}} \quad (3.12)$$

und

$$\begin{aligned} \delta \rho_{\vec{q}} = & \sum_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 = \vec{k}_1 \pm \vec{q} + \vec{K}}} \Theta(E_F - E_{n_1 \vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2 \vec{k}_2} - E_F) \\ & \cdot \left[C_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 \end{smallmatrix}} \psi_{n_2 \vec{k}_2}^* \psi_{n_1 \vec{k}_1} + C_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 \end{smallmatrix}}^* \psi_{n_1 \vec{k}_1}^* \psi_{n_2 \vec{k}_2} \right]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Daraus folgt

$$\mu_{xc}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \mu_{xc}^{\vec{q}}(\vec{r}) \quad (3.14)$$

und

$$\delta V_c(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \delta V_c^{\vec{q}}(\vec{r}) . \quad (3.15)$$

Setzt man Gleichung (1.59) in Gleichung (3.4) ein, so hat man unter Berücksichtigung der zwei obigen Gleichungen

$$\delta V^{tot}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \delta V_{\vec{q}}^{tot}(\vec{r}) . \quad (3.16)$$

Für $\delta V_{\vec{q}}^{tot}(\vec{r})$ gilt dann

$$\delta V_{\vec{q}}^{tot}(\vec{r}) = \delta V_{\vec{q}}(\vec{r}) + \delta V_c^{\vec{q}}(\vec{r}) + \mu_{xc}^{\vec{q}}(\vec{r}) . \quad (3.17)$$

Die Dichtestörung $\delta \rho_{\vec{q}}(\vec{r})$, die durch ein einzelnes Phonon \vec{q} verursacht wird, kann unter Verwendung von Gleichung (1.38) in zwei Moden geteilt werden

$$\delta \rho_{\vec{q}}(\vec{r} + \vec{R}_m) = e^{i\vec{q}\vec{R}_m} \delta \rho_{\vec{q}}^{(+)}(\vec{r}) + e^{-i\vec{q}\vec{R}_m} \delta \rho_{\vec{q}}^{(-)}(\vec{r}) , \quad (3.18)$$

mit

$$\begin{aligned} \delta \rho_{\vec{q}}^{(+)}(\vec{r}) = & \sum_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 \end{smallmatrix}} \Theta(E_F - E_{n_1 \vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2 \vec{k}_2} - E_F) \\ & \cdot \left[C_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 \end{smallmatrix}} \psi_{n_2 \vec{k}_2}^*(\vec{r}) \psi_{n_1 \vec{k}_1}(\vec{r}) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 - \vec{q} + \vec{K}} + C_{\begin{smallmatrix} n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 \end{smallmatrix}}^* \psi_{n_1 \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{n_2 \vec{k}_2}(\vec{r}) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 + \vec{q} + \vec{K}} \right] \end{aligned} \quad (3.19)$$

und

$$\begin{aligned} \delta\rho_{\vec{q}}^{(-)}(\vec{r}) &= \sum_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}} \Theta(E_F - E_{n_1 \vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2 \vec{k}_2} - E_F) \\ &\cdot \left[C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}} \psi_{n_2 \vec{k}_2}^*(\vec{r}) \psi_{n_1 \vec{k}_1}(\vec{r}) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 + \vec{q} + \vec{K}} + C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}}^* \psi_{n_1 \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{n_2 \vec{k}_2}(\vec{r}) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 - \vec{q} + \vec{K}} \right]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Für diese Größen gelten die Relationen

$$\operatorname{Re} [\delta\rho_{\vec{q}}^{(+)}(\vec{r})] = \operatorname{Re} [\delta\rho_{\vec{q}}^{(-)}(\vec{r})] \quad (3.21)$$

$$\operatorname{Im} [\delta\rho_{\vec{q}}^{(+)}(\vec{r})] = -\operatorname{Im} [\delta\rho_{\vec{q}}^{(-)}(\vec{r})], \quad (3.22)$$

und es folgt

$$\delta\rho_{\vec{q}}^{(-)*}(\vec{r}) = \delta\rho_{\vec{q}}^{(+)}(\vec{r}) \quad . \quad (3.23)$$

In der Menge aller möglichen Phononen existiert für jedes nach Gleichung (1.17) definierte Phonon mit Impuls \vec{q} auch das Phonon mit dem entgegengesetzten Impuls $-\vec{q}$. Vergleicht man die Gleichungen (3.19) und (3.20) für die Phononen mit entgegengesetzten Impulsen, so stellt man fest, daß

$$\delta\rho_{\pm\vec{q}}^{(+)} = \delta\rho_{\mp\vec{q}}^{(-)} \quad (3.24)$$

ist. Diese Gleichung beschreibt die $U(1)$ -Symmetriereduktion und bedingt, daß nur die Hälfte aller Daten berechnet werden müssen, um alle notwendigen Informationen zu gewinnen.

Analog dazu hat man für $\mu_{xc}^{\vec{q}}(\vec{r})$

$$\begin{aligned} \mu_{xc}^{\vec{q}}(\vec{r}) &= \frac{\delta V_{xc}}{\delta \rho} \delta\rho_{\vec{q}}(\vec{r}) \\ &= \frac{\delta V_{xc}}{\delta \rho} \sum_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 = \vec{k}_1 \pm \vec{q}}} \Theta(E_F - E_{n_1 \vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2 \vec{k}_2} - E_F) \\ &\cdot \left[C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}} \psi_{n_2 \vec{k}_2}^*(\vec{r}) \psi_{n_1 \vec{k}_1}(\vec{r}) + C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}}^* \psi_{n_1 \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{n_2 \vec{k}_2}(\vec{r}) \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Unter Verwendung von Gleichung (3.18) bzw. (1.38) läßt sich für jedes feste \vec{q} die Funktion $\mu_{xc}^{\vec{q}}$ in zwei Moden $\mu_{xc}^{\vec{q}(+)}$ und $\mu_{xc}^{\vec{q}(-)}$ aufteilen

$$\mu_{xc}^{\vec{q}}(\vec{r} + \vec{R}_m) = e^{i\vec{q}\vec{R}_m} \mu_{xc}^{\vec{q}(+)}(\vec{r}) + e^{-i\vec{q}\vec{R}_m} \mu_{xc}^{\vec{q}(-)}(\vec{r}) \quad , \quad (3.26)$$

mit

$$\begin{aligned} \mu_{xc}^{\vec{q}^{(+)}}(\vec{r}) &= \frac{\delta V_{xc}}{\delta \rho} \sum_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}} \Theta(E_F - E_{n_1 \vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2 \vec{k}_2} - E_F) \\ &\cdot \left[C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}} \psi_{n_2 \vec{k}_2}^*(\vec{r}) \psi_{n_1 \vec{k}_1}(\vec{r}) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 - \vec{q} + \vec{K}} + C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}}^* \psi_{n_1 \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{n_2 \vec{k}_2}(\vec{r}) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 + \vec{q} + \vec{K}} \right] \end{aligned} \quad (3.27)$$

und

$$\begin{aligned} \mu_{xc}^{\vec{q}^{(-)}}(\vec{r}) &= \frac{\delta V_{xc}}{\delta \rho} \sum_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}} \Theta(E_F - E_{n_1 \vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2 \vec{k}_2} - E_F) \\ &\cdot \left[C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}} \psi_{n_2 \vec{k}_2}^*(\vec{r}) \psi_{n_1 \vec{k}_1}(\vec{r}) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 + \vec{q} + \vec{K}} + C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}}^* \psi_{n_1 \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{n_2 \vec{k}_2}(\vec{r}) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 - \vec{q} + \vec{K}} \right]. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Für diese Größen gelten analoge Beziehungen wie für $\delta \rho_{\vec{q}}^{(\pm)}$ (3.21)–(3.23)

$$Re[\mu_{xc}^{\vec{q}^{(+)}}(\vec{r})] = Re[\mu_{xc}^{\vec{q}^{(-)}}(\vec{r})] \quad (3.29)$$

$$Im[\mu_{xc}^{\vec{q}^{(+)}}(\vec{r})] = -Im[\mu_{xc}^{\vec{q}^{(-)}}(\vec{r})] \quad , \quad (3.30)$$

und es folgt

$$\mu_{xc}^{\vec{q}^{(-)*}}(\vec{r}) = \mu_{xc}^{\vec{q}^{(+)}}(\vec{r}) \quad . \quad (3.31)$$

Nach Gleichung (3.24) gilt

$$\mu_{xc}^{\pm \vec{q}^{(+)}} = \mu_{xc}^{\mp \vec{q}^{(-)}} \quad . \quad (3.32)$$

Das durch die Dichtestörung $\delta \rho_{\vec{q}}$ eines einzelnen Phonons \vec{q} induzierte elektrostatische Potential $\delta V_c^{\vec{q}}(\vec{r})$ läßt sich ebenso wie die Dichtestörung nach (3.18) in zwei Moden teilen

$$\delta V_c^{\vec{q}}(\vec{r} + \vec{R}_m) = e^{i\vec{q}\vec{R}_m} \delta V_c^{\vec{q}^{(+)}}(\vec{r}) + e^{-i\vec{q}\vec{R}_m} \delta V_c^{\vec{q}^{(-)}}(\vec{r}) \quad . \quad (3.33)$$

Nach den Gleichungen (3.18), (3.26) und (3.33) gilt die Aufteilung in zwei Moden auch für $\delta V_{\vec{q}}^{tot}(\vec{r})$

$$\delta V_{\vec{q}}^{tot}(\vec{r} + \vec{R}_m) = e^{i\vec{q}\vec{R}_m} \delta V_{tot}^{\vec{q}^{(+)}}(\vec{r}) + e^{-i\vec{q}\vec{R}_m} \delta V_{tot}^{\vec{q}^{(-)}}(\vec{r}) \quad . \quad (3.34)$$

Nach (3.17), (2.3), (2.6), (3.26), (3.33) und (3.34) gilt

$$\delta V_{tot}^{\vec{q}(\pm)}(\vec{r}) = \delta V_{\pm\vec{q}} + \delta V_c^{\vec{q}(\pm)}(\vec{r}) + \mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)} \quad . \quad (3.35)$$

Die Translationseigenschaft in der Form von (2.6), (3.26), (3.33) und (3.34) erlaubt die Reduktion der Matrixelemente für die entsprechenden Größen auf die Integrale über die zentrale WSZ analog zu Gleichung (2.7). Man erhält

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{k}' | \delta V_c^{\vec{q}} | n \vec{k} \rangle &= N \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q} + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \delta V_c^{\vec{q}(+) } | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \\ &+ N \delta_{\vec{k}', \vec{k} - \vec{q} + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \delta V_c^{\vec{q}(-) } | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \quad , \quad (3.36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{k}' | \mu_{xc}^{\vec{q}} | n \vec{k} \rangle &= N \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q} + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \mu_{xc}^{\vec{q}(+) } | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \\ &+ N \delta_{\vec{k}', \vec{k} - \vec{q} + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \mu_{xc}^{\vec{q}(-) } | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \quad (3.37) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{k}' | \delta V_{\vec{q}}^{tot} | n \vec{k} \rangle &= N \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q} + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \delta V_{tot}^{\vec{q}(+) } | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \\ &+ N \delta_{\vec{k}', \vec{k} - \vec{q} + \vec{K}} \langle n' \vec{k}' | \delta V_{tot}^{\vec{q}(-) } | n \vec{k} \rangle_{WSZ} \quad . \quad (3.38) \end{aligned}$$

Da in den Ausdrücken aus (3.13) für ein festgelegtes Phonon mit Impuls \vec{q} die verwendeten Übergangskoeffizienten aus (3.9) durch die Einschränkung der Übergänge auch als

$$C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}} = \frac{\langle n_1 \vec{k}_1 | \delta V_{\pm\vec{q}}^{tot} | n_2 \vec{k}_2 \rangle}{E_{n_2 \vec{k}_2} - E_{n_1 \vec{k}_1}} \quad (3.39)$$

geschrieben werden können, zerfällt die Integralgleichung (3.8) für die Dichtestörung zusammen mit Gleichung (3.9) in die unabhängigen Integralgleichungen für die einzelnen Phononen–Paare. Die Ausdrücke in (3.13) zusammen mit denen in (3.39) sind nämlich die gekoppelten linearen Fredholmschen Integralgleichungen zweiter Art mit der Inhomogenität

$$\begin{aligned} \delta \rho_{\vec{q}}^{[0]}(\vec{r}) &= \sum_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2 = \vec{k}_1 \pm \vec{q} + \vec{K}}} \Theta(E_F - E_{n_1 \vec{k}_1}) \Theta(E_{n_2 \vec{k}_2} - E_F) \\ &\cdot \left[C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}}^{[0]} \psi_{n_2 \vec{k}_2}^*(\vec{r}) \psi_{n_1 \vec{k}_1}(\vec{r}) + C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}}^{[0]*} \psi_{n_1 \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{n_2 \vec{k}_2}(\vec{r}) \right] \quad (3.40) \end{aligned}$$

für die Phononen–Paare mit den Impulsen $\pm\vec{q}$. Nach (3.38) können diese sogar nur innerhalb der zentralen WSZ betrachtet werden.

Die Berechnung der durch Austausch–Korrelation verursachten Abschirmung auf die Matrixelemente der Elektron–Phonon–Wechselwirkung im Rahmen der LDA–Näherung wurde damit auf die Lösung der o.g. unabhängigen Integralgleichungen

für die Phononen-Paare mit entgegengesetzten Impulsen $\pm\vec{q}$ zurückgeführt. Als sinnvolle Lösungsmethode bietet sich aufgrund der hohen Komplexität der o.g. Integralgleichungen ein iteratives selbstkonsistentes Verfahren an, welches später detailliert beschrieben wird.

Der wesentliche Teil des Verfahrens ist die Berechnung der Matrixelemente von $\mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)}$ und von $\delta V_c^{\vec{q}(\pm)}$. Dafür werden spezielle Fourier-ähnliche symmetrisierte Darstellungen der entsprechenden Größen benötigt.

3.2 Darstellung von $\mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)}$ und $\delta V_c^{\vec{q}(\pm)}$.

Nach Gleichung (3.31) genügt es, $\mu_{xc}^{\vec{q}^{(+)}}$ zu untersuchen. Gemäß Gleichung (3.27) kann $\mu_{xc}^{\vec{q}^{(+)}}$ zerlegt werden in

$$\mu_{xc}^{\vec{q}^{(+)}} = e^{i\vec{q}\vec{r}} \sum_{\vec{k}_m} g(\vec{k}_m) e^{i\vec{k}_m\vec{r}} . \quad (3.41)$$

Die \vec{k}_m 's sind die reziproken Gittervektoren, welche im gesamten reziproken Raum liegen. Man betrachtet zunächst

$$\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}^{(+)}} = e^{-i\vec{q}\vec{r}} \mu_{xc}^{\vec{q}^{(+)}} = \sum_{\vec{k}_m} g(\vec{k}_m) e^{i\vec{k}_m\vec{r}} . \quad (3.42)$$

Die Darstellung aus Gleichung (3.41) ist aufgrund der großen Datenmenge und der numerischen Stabilitätsprobleme schwer zu realisieren. Es werden daher die expliziten Symmetrie-Eigenschaften von V_{xc} bzw. $\tilde{\mu}_{xc}$ ausgenutzt.

Nach [23] wird das Austausch-Korrelationsfunktional als Funktion der Ortsvariablen

$$V_{xc}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}_{FOU}} V_{xc}(\vec{K}_{FOU}) CS(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \quad (3.43)$$

dargestellt. $CS(\vec{K}_{FOU}, \vec{r})$ ist die reziproke raumgruppensymmetrische Linearkombination der ebenen Wellen

$$CS(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) = \frac{1}{NSYM(\vec{K}_{FOU})} \sum_{i=1, NSYM(\vec{K}_{FOU})} \cos(\vec{r}\hat{\alpha}_i \vec{K}_{FOU}) , \quad (3.44)$$

wobei $NSYM(\vec{K}_{FOU})$ die Anzahl der Symmetrieeoperatoren symbolisiert.

Die Vektormenge $\{\vec{K}_{FOU}\}$ ist die Menge der reziproken kristallsymmetrischen Vektoren, die ein äquidistantes Netz bilden. Die Entwicklungskoeffizienten werden durch die gewichteten Summen über die kristallsymmetrischen Linearkombinationen der ebenen Wellen gewonnen. Es wird eine der Menge $\{\vec{K}_{FOU}\}$ entsprechende Menge kristallsymmetrischer äquidistanter Vektoren $\{\vec{R}_{FOU}\}$ gebildet. Über diese

werden kristallsymmetrische Linearkombinationen der ebenen Wellen vorgenommen. Für die Entwicklungskoeffizienten $V_{xc}(\vec{K}_{FOU})$ gilt

$$V_{xc}(\vec{K}_{FOU}) = \sum_{\vec{R}_{FOU}} V_{xc}(\vec{R}_{FOU}) CS(\vec{R}_{FOU}, \vec{K}_{FOU}) G(\vec{R}_{FOU}) \quad . \quad (3.45)$$

$\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}}$ entspricht dem Gradienten von $V_{xc}(\vec{r})$ nach der Relation

$$\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}} \sim \vec{\nabla} V_{xc}(\vec{r}) \vec{s}_{\vec{q}} \quad . \quad (3.46)$$

$\vec{s}_{\vec{q}}$ ist ein Operator, der die zeit- und ortsabhängige effektive Teilauslenkung in die jeweilige Polarisationsrichtung des Kerns unter dem Einfluß des Phonons \vec{q} beschreibt. Man erhält

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}} \sim \vec{s}_{\vec{q}} \vec{\nabla} V_{xc}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{K}_{FOU}} V_{xc}(\vec{K}_{FOU}) \vec{\nabla} CS(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \\ &= \frac{\vec{s}_{\vec{q}}}{s_{\vec{q}}} \sum_{\vec{K}_{FOU}} V_{xc}(\vec{K}_{FOU}) s_{\vec{q}} \vec{\nabla} CS(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \\ &= \vec{e}_{\vec{q}} \sum_{\vec{K}_{FOU}} V_{xc}(\vec{K}_{FOU}) s_{\vec{q}} \vec{\nabla} CS(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \quad . \quad (3.47) \end{aligned}$$

Damit wird

$$\vec{S}(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) = \vec{\nabla} CS(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \quad (3.48)$$

definiert. Explizit ausgeschrieben ergibt sich

$$\vec{S}(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) = \frac{1}{NSYM(\vec{K}_{FOU})} \sum_{i=1}^{NSYM(\vec{K}_{FOU})} \hat{\alpha}_i \vec{K}_{FOU} \sin(\vec{r} \hat{\alpha}_i \vec{K}_{FOU}) \quad . \quad (3.49)$$

$\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}}$ läßt sich nun als

$$\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}} = \vec{s}_{\vec{q}} \sum_{\vec{K}_{FOU}} V_{xc}^{\vec{q}}(\vec{K}_{FOU}) \vec{S}(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \quad (3.50)$$

schreiben. Analog folgt für die Moden

$$\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}(\pm)} = \vec{s}_{\vec{q}} \sum_{\vec{K}_{FOU}} \tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}(\pm)}(\vec{K}_{FOU}) \vec{S}(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \quad . \quad (3.51)$$

Die Koeffizienten $\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}(\pm)}(\vec{K}_{FOU})$ werden durch die gewichteten Summen analog zu Gleichung (3.45) berechnet.

Nahezu identische Überlegungen kann man auf die Darstellung der Dichtestörung eines einzelnen Phonons $\delta\rho_{\vec{q}}$ bzw. der Moden $\delta\rho_{\vec{q}}^{(\pm)}$ anwenden. D.h. es gilt

$$\delta\rho_{\vec{q}}^{(\pm)}(\vec{r}) = \vec{s}_{\vec{q}} \sum_{\vec{K}_{FOU}} \delta\tilde{\rho}_{\vec{q}}^{(\pm)}(\vec{K}_{FOU}) \vec{S}(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \quad . \quad (3.52)$$

Da

$$\Delta(\delta V_c^{\vec{q}}) = -4\pi e^2 \delta\rho_{\vec{q}} \quad \text{bzw.} \quad (3.53)$$

$$\Delta(\delta V_c^{\vec{q}^{(\pm)}}) = -4\pi e^2 \delta\rho_{\vec{q}}^{(\pm)} \quad (3.54)$$

ist, hat man

$$\delta V_c^{\vec{q}^{(\pm)}}(\vec{r}) = \vec{s}_{\vec{q}} \sum_{\vec{K}_{FOU}} \delta\tilde{V}_c^{\vec{q}^{(\pm)}}(\vec{K}_{FOU}) \vec{S}(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}), \quad (3.55)$$

mit

$$\delta\tilde{V}_c^{\vec{q}^{(\pm)}}(\vec{K}_{FOU}) = 4\pi e^2 \frac{\delta\tilde{\rho}_{\vec{q}}^{(\pm)}(\vec{K}_{FOU})}{|\vec{K}_{FOU}|^2} \quad . \quad (3.56)$$

Um die Auswirkung der Austausch-Korrelationseffekte zu beschreiben, benötigen man die Matrixelemente

$$\begin{aligned} & \langle n' \vec{k}' \mid \tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}^{(\pm)}} + \delta\tilde{V}_c^{\vec{q}^{(\pm)}} \mid n \vec{k} \rangle \\ &= \langle n' \vec{k}' \mid \vec{s}_{\vec{q}} \sum_{\vec{K}_{FOU}} [\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}^{(\pm)}}(\vec{K}_{FOU}) + \delta\tilde{V}_c^{\vec{q}^{(\pm)}}(\vec{K}_{FOU})] \vec{S}(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \mid n \vec{k} \rangle \\ &= \vec{s}_{\vec{q}} \langle n' \vec{k}' \mid \sum_{\vec{K}_{FOU}} [\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}^{(\pm)}}(\vec{K}_{FOU}) + \delta\tilde{V}_c^{\vec{q}^{(\pm)}}(\vec{K}_{FOU})] \vec{S}(\vec{K}_{FOU}, \vec{r}) \mid n \vec{k} \rangle \\ &= \vec{s}_{\vec{q}} \vec{\Gamma}_{\begin{smallmatrix} n' \vec{k}' \\ n \vec{k} \end{smallmatrix}}^{\vec{q}^{(\pm)}} \quad . \end{aligned} \quad (3.57)$$

Die Werte $\vec{\Gamma}_{\begin{smallmatrix} n' \vec{k}' \\ n \vec{k} \end{smallmatrix}}^{\vec{q}^{(\pm)}}$ aus Gleichung (3.57) werden ähnlich wie die Matrixelemente der nackten Elektron-Phonon-Wechselwirkung durch die Zerlegung in die EW- und APW-Anteile unter Ausnutzung der Gleichungen (A.3) und (A.7) aus Anhang A.1 und der Gaunt-Koeffizienten bestimmt.

3.3 Die selbstkonsistente Lösung der Abschirmungsgleichungen

Da zunächst nur die reduzierten Übergangskoeffizienten als Eingangsdaten bekannt sind, müssen auch hier für die Berechnung der Austausch-Korrelationseffekte die drei Auslenkungsvektoren aus Gleichung (2.15) ermittelt werden. Es

ergeben sich die reduzierten Übergangskoeffizienten und –wahrscheinlichkeiten der abgeschirmten Elektron–Phonon–Wechselwirkung.

Die vollständigen Übergangskoeffizienten und –wahrscheinlichkeiten können nach der Ausführung des Selbstkonsistenzverfahrens mit Hilfe der Konstruktion spezifischer Linearkombinationen gewonnen werden. Man erhält das Schema aus Tabelle 3.1 für die selbstkonsistente Berechnung der reduzierten Übergangskoeffizienten. Für jeden der drei Vektoren \vec{s}_j , mit $j = 1, 2, 3$ aus (2.15), wird die Rechnung wie in Tabelle 3.1 beschrieben, durchgeführt.

Als Eingangsdaten des Verfahrens werden die ungestörte Dichte und die unter dem Einfluß der nackten Elektron–Phonon–Wechselwirkung berechneten Übergangskoeffizienten

$$\left\{ C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}}^{[0]} \right\}$$

verwendet. Die Dichtestörung $\delta\rho_{\vec{q}}$ wird anhand der Koeffizienten und die Dichteteilmoden $\delta\rho_{\vec{q}}^{\pm}$ an \vec{R}_{FOU} ermittelt. \vec{R}_{FOU} sind Gittervektoren, die zur Entwicklung im reziproken Raum verwendet werden. Das daraus resultierende Austausch–Korrelationsteilpotential $\mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)}$ wird in die Darstellung der Gleichung (3.51) umgewandelt. Die Moden des induzierten Coulomb–Potentials $\delta V_c^{\vec{q}(\pm)}$ werden in die Darstellung in (3.55) mit Hilfe der Gleichung (3.56) und anschließend in die Matrixelemente $\vec{\Gamma}_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{\vec{q}(\pm)[0]}$ umgerechnet. Die Matrixelemente werden in die Änderungen der Übergangskoeffizienten eingesetzt. Aus den Änderungen der Übergangskoeffizienten werden die neuen Übergangskoeffizienten konstruiert. Die neu gewonnenen Übergangskoeffizienten, die Dichteteilmoden und die Dichte werden an den nächsten Schritt weitergegeben.

Verallgemeinert werden im (i+1)ten Schritt die jeweils neuen Dichteteilmoden $\delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[i+1]}$, das induzierte Coulomb–Potential $\delta V_c^{\vec{q}(\pm)[i+1]}$ und die Moden des Austausch–Korrelationsteilpotentials $\mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)[i+1]}$ aus den im iten Schritt ermittelten Größen (Dichte, Übergangskoeffizienten und Dichteteilmoden) an den \vec{R}_{FOU} berechnet. Anschließend werden diese Dichteteilmoden in die Moden des induzierten Coulomb–Potentials nach (3.55) und (3.56) und in die Moden des Austausch–Korrelationsteilpotentials gemäß Gleichung (3.51) umgeformt und daraus wiederum die Änderungen der Übergangskoeffizienten und die sich dazu ergebenden Übergangskoeffizienten berechnet.

Das Verfahren kann abgebrochen werden, wenn die maximale Veränderung der numerisch relevanten Übergangskoeffizienten (Parameter δ) sehr viel kleiner ist (Parameter ϵ) als die Übergangskoeffizienten selbst. Mathematisch heißt dies

$$\Delta_{[i]} = \max \left| \frac{\delta C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i]}}{C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i]}} \right| < \epsilon, \quad (3.58)$$

$$\text{für alle } \left| C_{n, \vec{k}, \vec{k}'}^{[i]} \right| > \delta \quad . \quad (3.59)$$

Ein derartiges Abbruchskriterium gewährleistet, daß sich die Dichte bei ausreichend klein gewähltem Parameter ϵ in einem nächsten Schritt sehr wenig ändert. Darüber hinaus werden die direkt in die Transporttheorie eingehenden Matrixelemente gewonnen und die numerische Stabilität der Berechnungen mit Hilfe des Parameters δ besonders im Hinblick auf die Transporttheorie leicht kontrollierbar. In den hier vorgenommenen Berechnungen gilt $\delta = 1.0 \cdot 10^{-10}$ und $\epsilon = 1.0 \cdot 10^{-5}$. Die auf diese Weise gewonnenen reduzierten Übergangskoeffizienten sind die in Gleichung (1.29) erwähnten Matrixelemente der Potentiale \vec{V}_{screen} und \vec{V}_{screen}^* . Aufgrund der gültigen Symmetrie-Eigenschaft aus (1.41), müssen ausschließlich die Übergänge aus dem irreduziblen Keil betrachtet werden. Das Verhalten der reduzierten Matrixelemente des irreduziblen Keils im Sinne des obigen Verfahrens kann durch Flußdiagramme dargestellt werden. Die Werte von $\Delta_{[i]}$ werden zum i ten Schritt aufgetragen, siehe die Abbildungen 3.1–3.10 auf den Seiten 47–56. Die Geraden zwischen den Punkten in den Abbildungen haben keine physikalische Bedeutung, sie dienen der besseren Anschauung. Das Abschneidekriterium wird ebenfalls in einer Geraden $y = \epsilon$ graphisch dargestellt, welche die relevanten ganzzahligen Werten der x-Achse verbindet. Die nicht berücksichtigten Werte liegen unterhalb der ϵ -Linie.

Wegen des schnellen Abklingens von $\Delta_{[i]}$ werden die Diagramme ebenfalls logarithmisch aufgetragen (mit Ausnahme von Abbildung 3.1). Die \vec{q} -Vektoren sind in den Einheiten von $2\pi/a$ angegeben. Da hier die Übergänge aus dem irreduziblen Keil berechnet werden, sieht man in den Diagrammen die Unterschiede zwischen den drei Richtungen. Die große Schwankung der reduzierten Matrixelemente zu Beginn des Selbstkonsistenzverfahrens ist vor allem auf die große Bandbreite (sehr kleiner Parameter δ) der beim Durchführen des Verfahrens mitberücksichtigten Übergangskoeffizienten zurückzuführen. Das Verfahren konvergiert relativ schnell und ist numerisch stabil.

In Abbildung 3.1 wird die für das Selbstkonsistenzverfahren typische große Schwankung der Übergangskoeffizienten bei den ersten Schritten sowie die schnelle Konvergenz des Verfahrens deutlich.

Abbildung 3.2 zeigt die logarithmische Darstellung für den Fluß der Matrixelemente aus Abbildung 3.1. Die maximale Schwankung $\Delta_{[i]}$ der Übergangskoeffizienten klingt exponentiell mit zunehmender Schrittzahl ab.

Starke, richtungsabhängige Unterschiede bezüglich des Flußes der Matrixelemente sind in Abbildung 3.3 festzustellen. In Abbildung 3.4 ist die Steigung der Schwankung im Fluß in Richtung 0-1-0 zwischen dem fünften und dem sechsten Schritt wesentlich. In Abbildung 3.6 zeigt sich im Vergleich zu den anderen Phononen eine langsamere Konvergenz. Dies gilt auch für die Schwankungen im mittleren Schrittbereich.

Tabelle 3.1: Schema zur selbstkonsistenten Berechnung

1. Schritt	$\forall \vec{R}_{FOU} :$ $\rho_0^{[1]}(\vec{R}_{FOU}) = \rho_0(\vec{R}_{FOU})$ $\delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[1]}(\vec{R}_{FOU}) = \delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[1]}[\{C_{n_1\vec{k}_1}^{[0]}\}](\vec{R}_{FOU}) \rightarrow \{\delta\tilde{V}_c^{\vec{q}(\pm)[1]}(\vec{K}_{FOU})\}$ $\mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)[1]}(\vec{R}_{FOU}) = \frac{\delta V_{xc}}{\delta\rho_0^{[1]}}\delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[1]}(\vec{R}_{FOU}) \rightarrow \{\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}(\pm)[1]}(\vec{K}_{FOU})\}$ $\vec{\Gamma}_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{\vec{q}(\pm)[1]} = \langle n'\vec{k}' \mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)[1]} n\vec{k} \rangle + \langle n'\vec{k}' \delta V_c^{\vec{q}(\pm)[1]} n\vec{k} \rangle$ $\delta C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[1]} = \vec{s}_j \cdot \vec{\Gamma}_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{\vec{q}(\pm)[1]} / (E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})$ $C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[1]} = C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[0]} + \delta C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[1]}$ <p>$\rightarrow C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[1]}, \delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[1]}(\vec{R}_{FOU})$ und $\rho_0^{[1]}(\vec{R}_{FOU})$ werden weitergegeben</p>
2. Schritt	$\forall \vec{R}_{FOU} :$ $\rho_0^{[2]}(\vec{R}_{FOU}) = \rho_0(\vec{R}_{FOU})$ $\delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[2]}(\vec{R}_{FOU}) = \delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[2]}[\{C_{n_1\vec{k}_1}^{[1]}\}](\vec{R}_{FOU}) \rightarrow \{\delta\tilde{V}_c^{\vec{q}(\pm)[2]}(\vec{K}_{FOU})\}$ $\mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)[2]}(\vec{R}_{FOU}) = \frac{\delta V_{xc}}{\delta\rho_0^{[2]}}\delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[2]}(\vec{R}_{FOU}) \rightarrow \{\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}(\pm)[2]}(\vec{K}_{FOU})\}$ $\vec{\Gamma}_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{\vec{q}(\pm)[2]} = \langle n'\vec{k}' \mu_{xc}^{\vec{q}(\pm)[2]} n\vec{k} \rangle + \langle n'\vec{k}' \delta V_c^{\vec{q}(\pm)[2]} n\vec{k} \rangle$ $\delta C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[2]} = \vec{s}_j \cdot \vec{\Gamma}_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{\vec{q}(\pm)[2]} / (E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'})$ $C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[2]} = C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[1]} + \delta C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[2]}$ <p>$\rightarrow C_{n'\vec{k}' n\vec{k}}^{[2]}, \delta\rho_{\vec{q}}^{\pm[2]}(\vec{R}_{FOU})$ und $\rho_0^{[2]}(\vec{R}_{FOU})$ werden weitergegeben</p>
3. Schritt	u. s. w.

	Verallgemeinert
i. Schritt	<p>analog zu Schritt 1 und 2</p> <p>$\rightarrow C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i]}, \delta \rho_{\vec{q}}^{\pm [i]}(\vec{R}_{FOU})$ und $\rho_0^{[i]}(\vec{R}_{FOU})$</p> <p>werden $\forall \vec{R}_{FOU}$ weitergegeben .</p>
(i+1). Schritt	<p>$\forall \vec{R}_{FOU} :$</p> <p>$\rho_0^{[i+1]}(\vec{R}_{FOU}) = \rho_0^{[i]}(\vec{R}_{FOU})$</p> <p>$\delta \rho_{\vec{q}}^{\pm [i+1]}(\vec{R}_{FOU}) = \delta \rho_{\vec{q}}^{\pm [i+1]}[\{C_{\substack{n_1 \vec{k}_1 \\ n_2 \vec{k}_2}}^{[i]}}\]}(\vec{R}_{FOU}) \rightarrow \{\delta \tilde{V}_c^{\vec{q}^{(\pm)[i+1]}}(\vec{R}_{FOU})\}$</p> <p>$\mu_{xc}^{\vec{q}^{(\pm)[i+1]}}(\vec{R}_{FOU}) = \frac{\delta V_{xc}}{\delta \rho_0^{[i+1]}} \delta \rho_{\vec{q}}^{\pm [i+1]}(\vec{R}_{FOU}) \rightarrow \{\tilde{\mu}_{xc}^{\vec{q}^{(\pm)[i+1]}}(\vec{R}_{FOU})\}$</p> <p>$\vec{\Gamma}_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{\vec{q}^{(\pm)[i+1]}} = \langle n' \vec{k}' \mu_{xc}^{\vec{q}^{(\pm)[i+1]}} n \vec{k} \rangle + \langle n' \vec{k}' \delta \tilde{V}_c^{\vec{q}^{(\pm)[i+1]}} n \vec{k} \rangle$</p> <p>$\delta C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i+1]} = \vec{s}_j \cdot \vec{\Gamma}_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{\vec{q}^{(\pm)[i+1]}} / (E_{n \vec{k}} - E_{n' \vec{k}'})$</p> <p>$C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i+1]} = C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i]} + \delta C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i+1]}$</p> <p>$\rightarrow C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i+1]}, \delta \rho_{\vec{q}}^{\pm [i+1]}(\vec{R}_{FOU})$ und $\rho_0^{[i+1]}(\vec{R}_{FOU})$ werden weitergegeben</p> <p>u.s.w.</p>
Abbruch:	<p>$\forall C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i+1]} : C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i+1]} \geq \delta$ gilt $\Delta_{[i+1]} = \max \left \frac{\delta C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i+1]}}{C_{\substack{n' \vec{k}' \\ n \vec{k}}}^{[i+1]}} \right < \epsilon$</p>

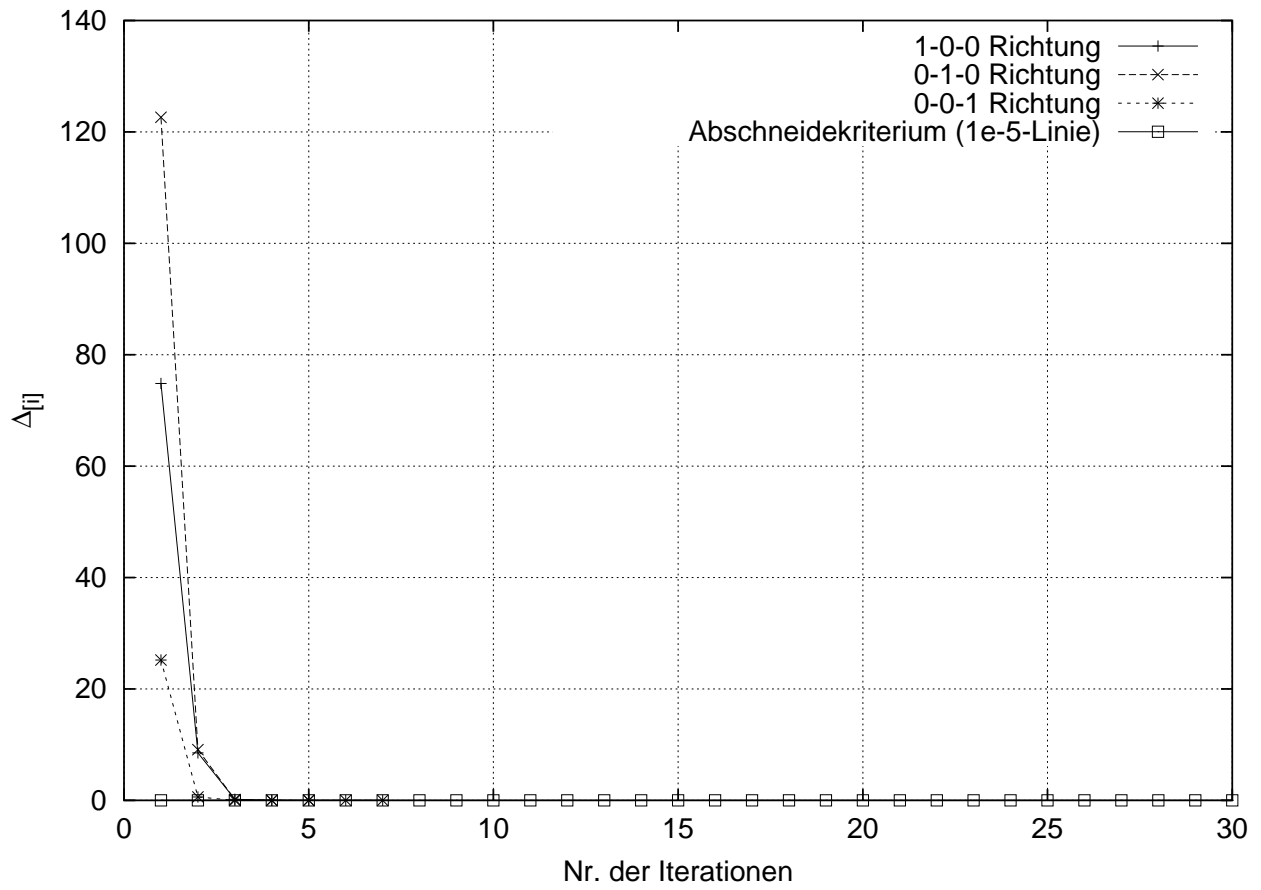
Abbildung 3.1: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (0, 0, \frac{1}{4})$ 

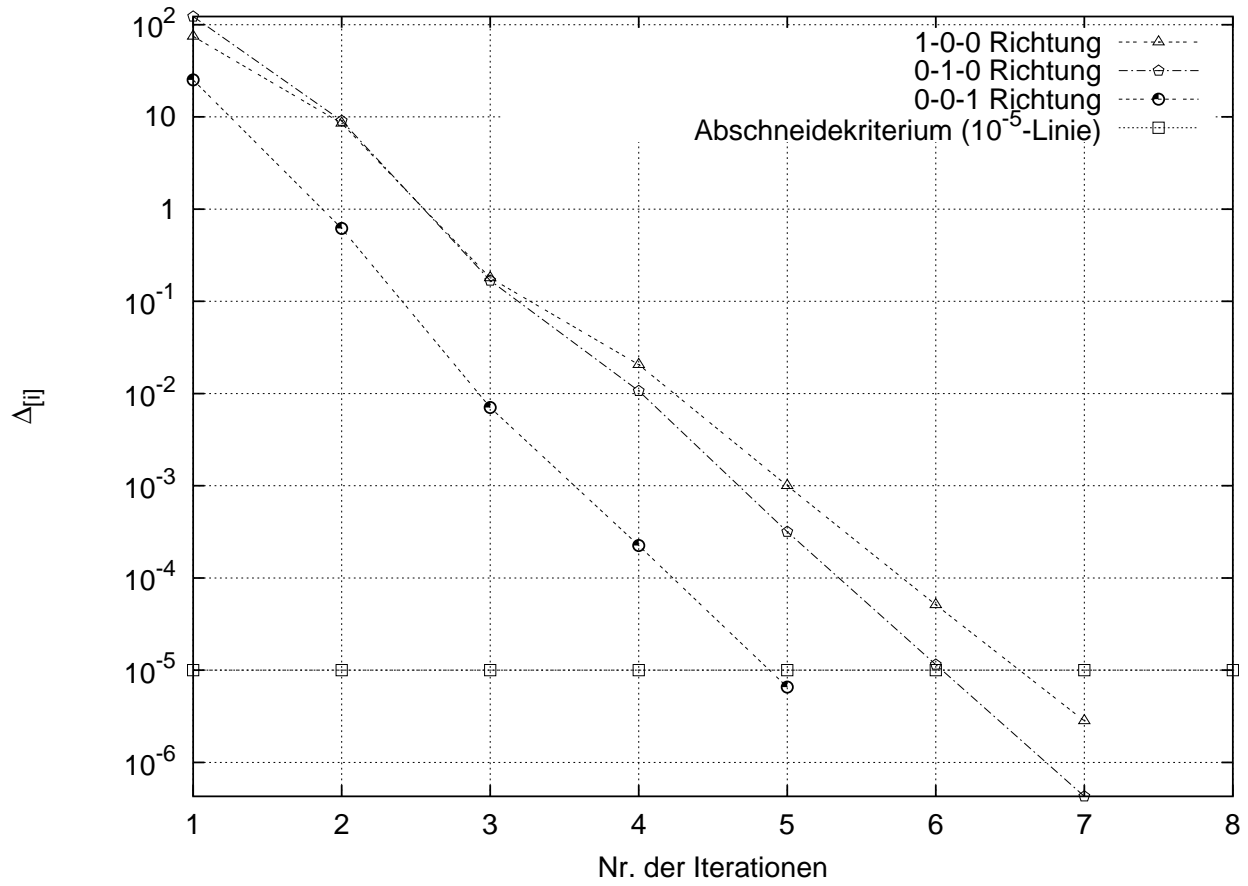
Abbildung 3.2: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (0, 0, \frac{1}{4})$ 

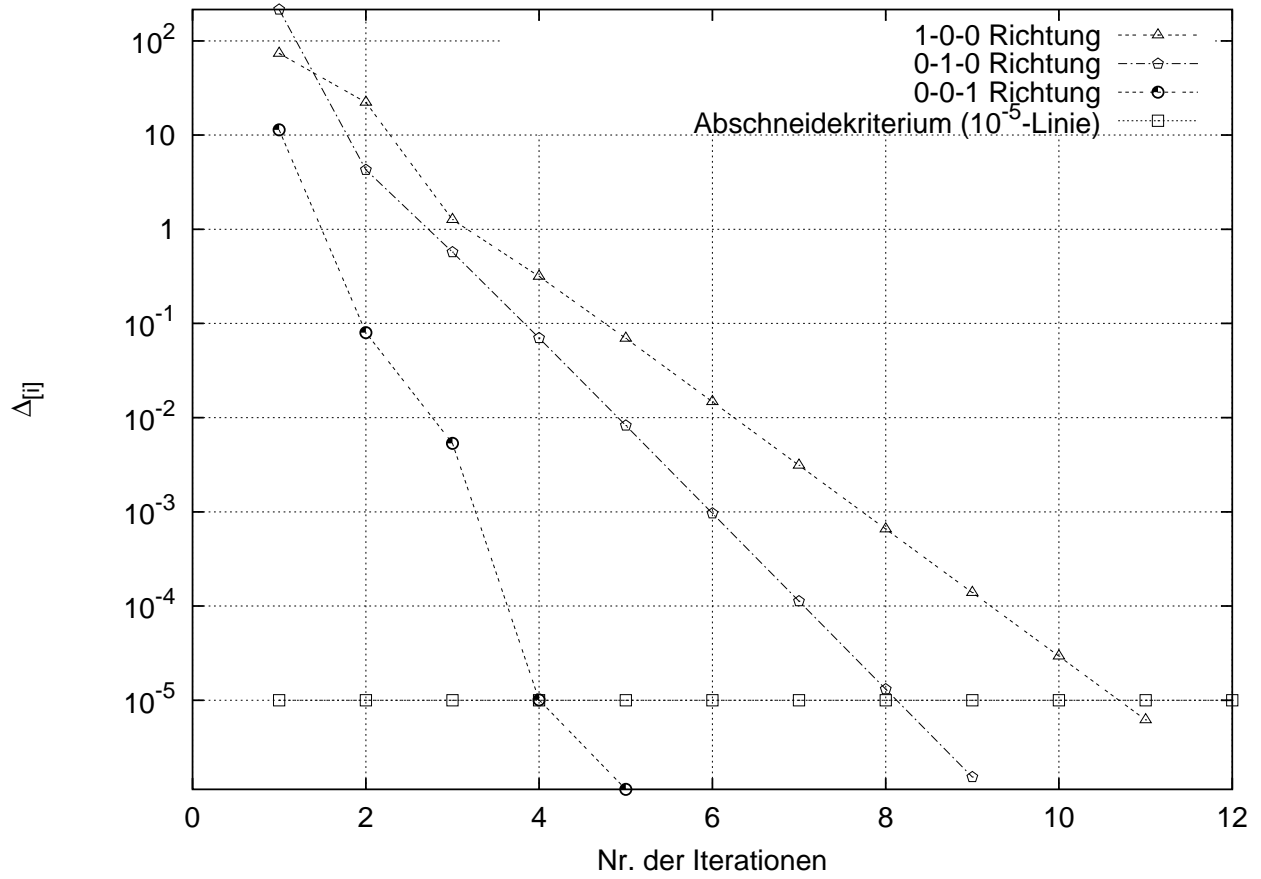
Abbildung 3.3: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (0, \frac{1}{2}, 0)$ 

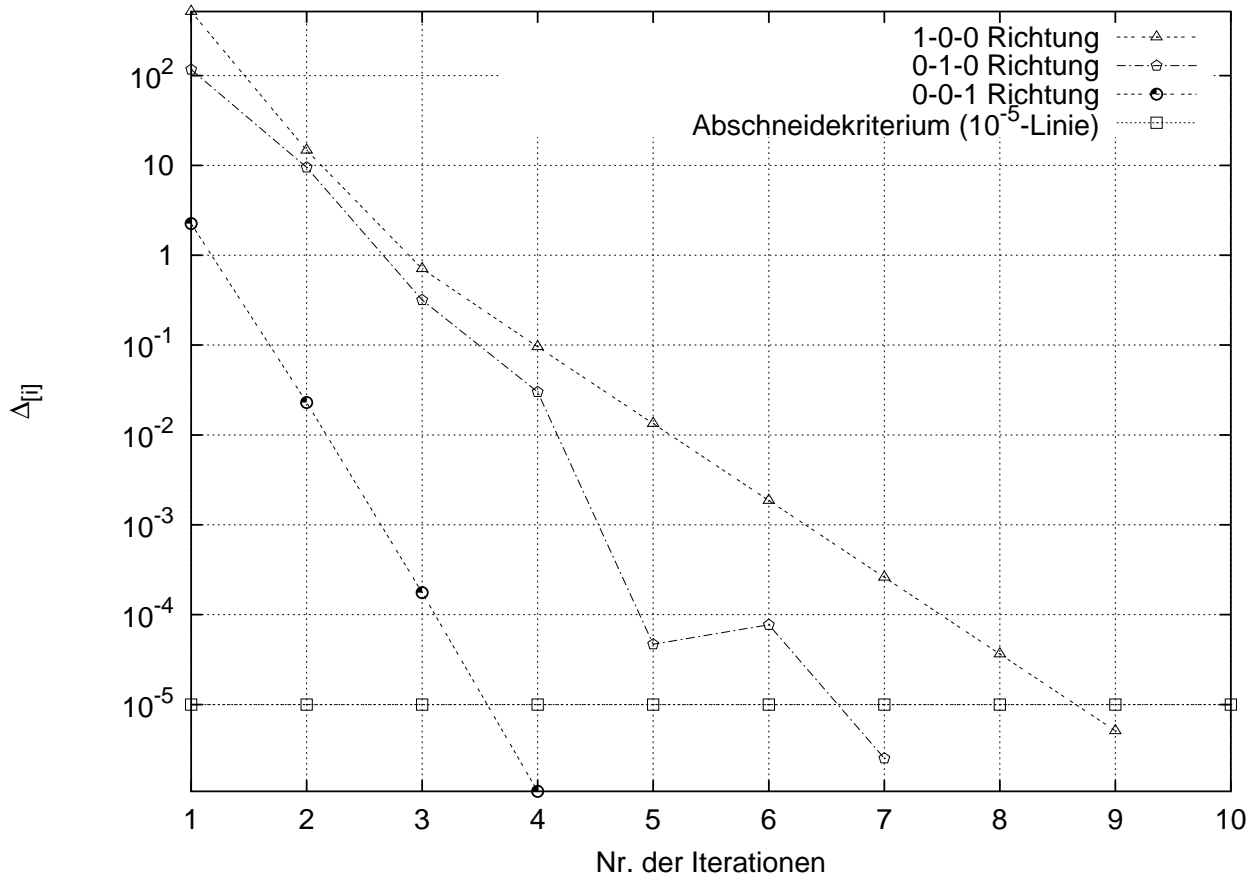
Abbildung 3.4: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (\frac{1}{4}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{4})$ 

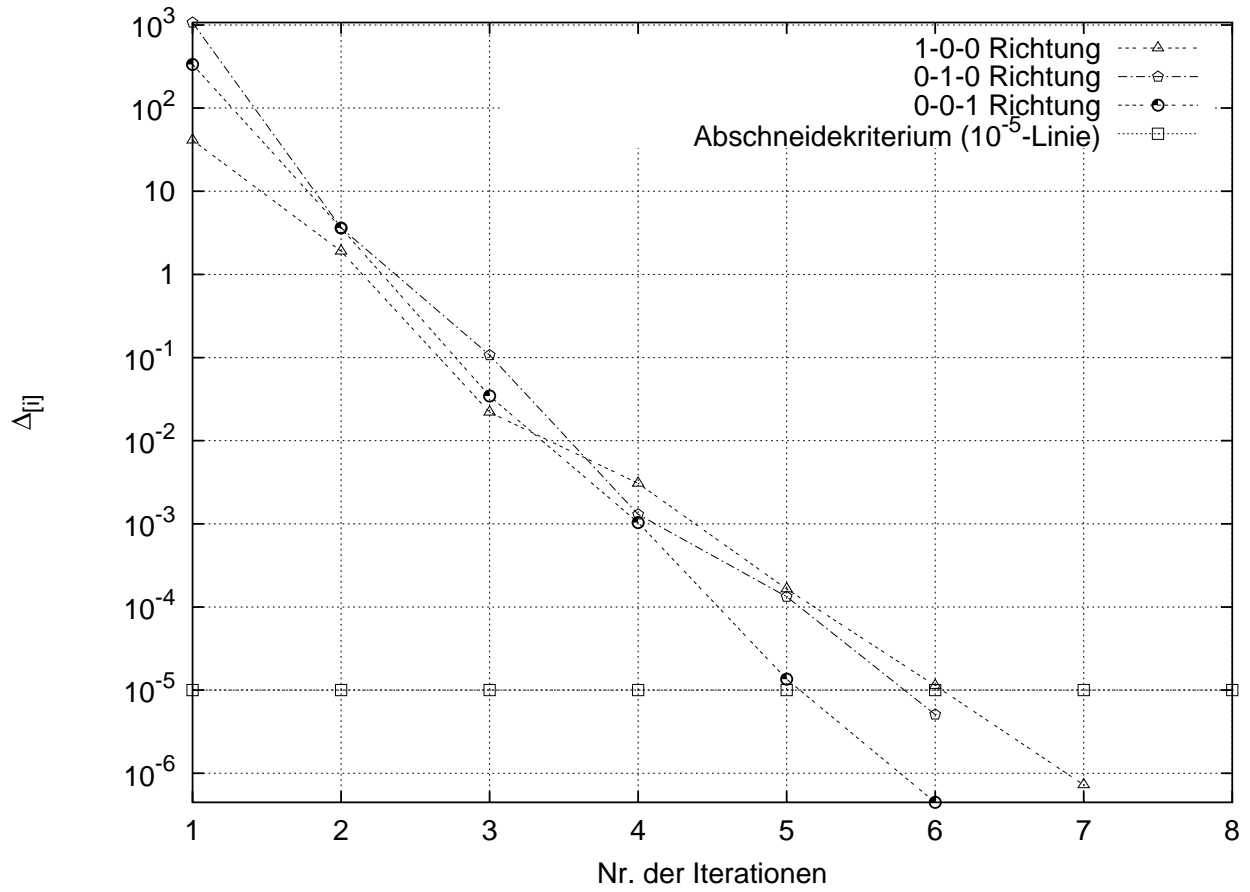
Abbildung 3.5: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (-\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 

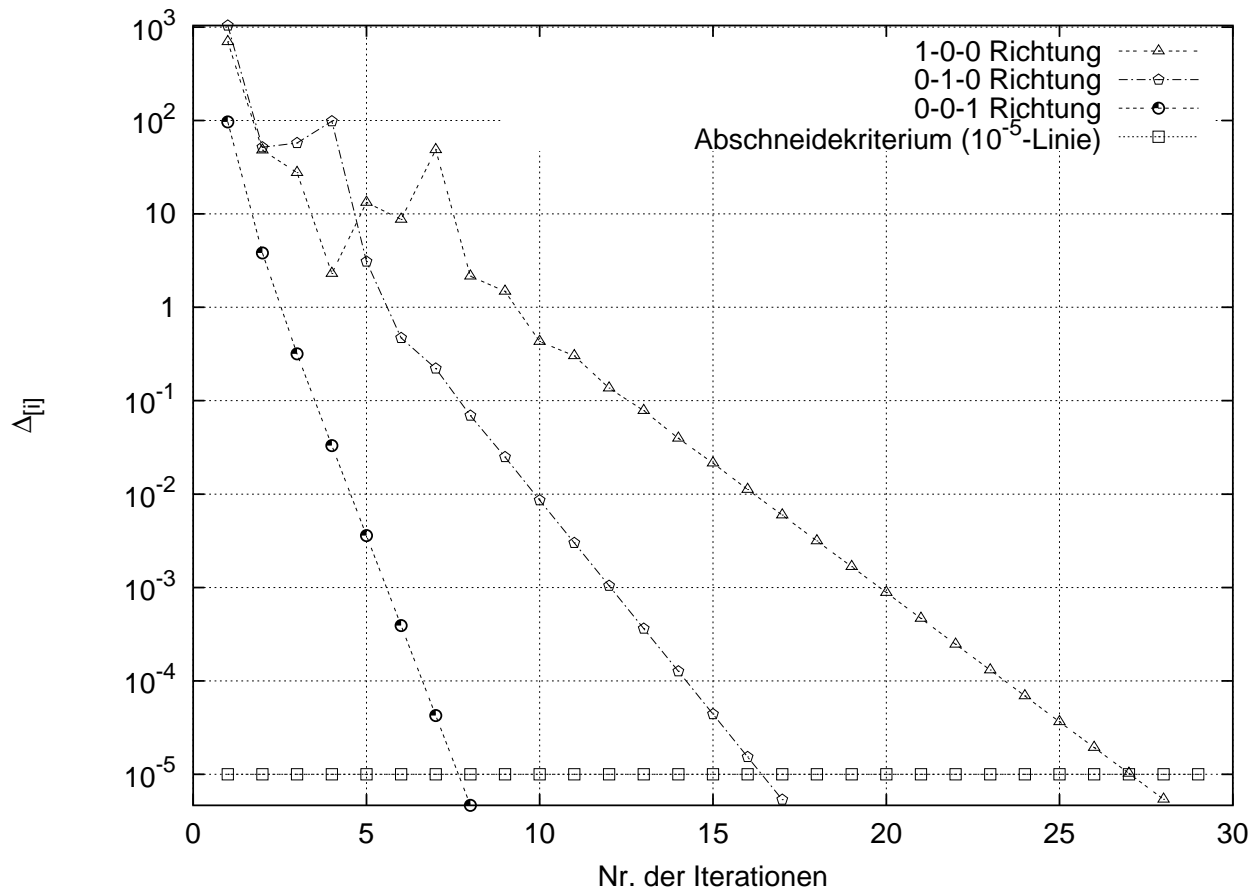
Abbildung 3.6: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (0, 0, \frac{3}{4})$ 

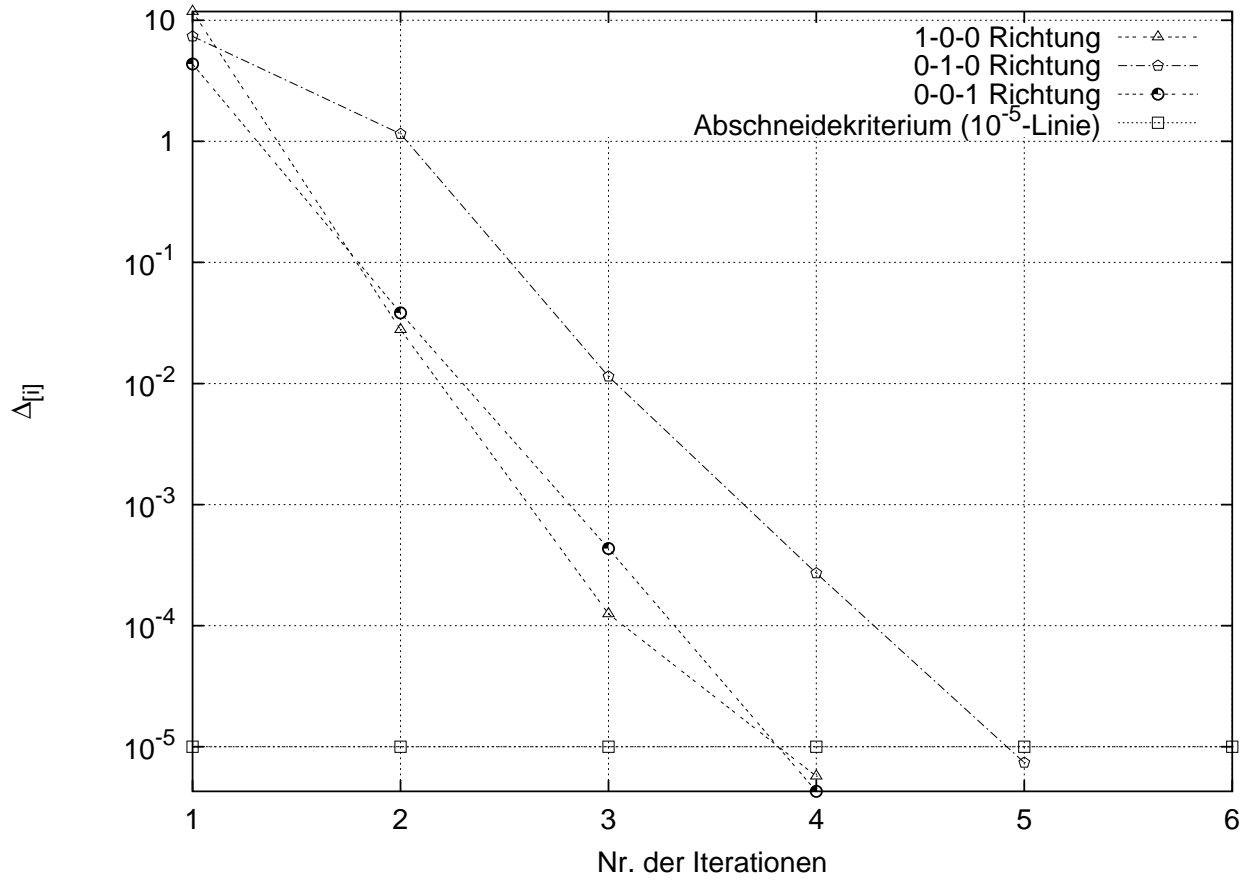
Abbildung 3.7: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ 

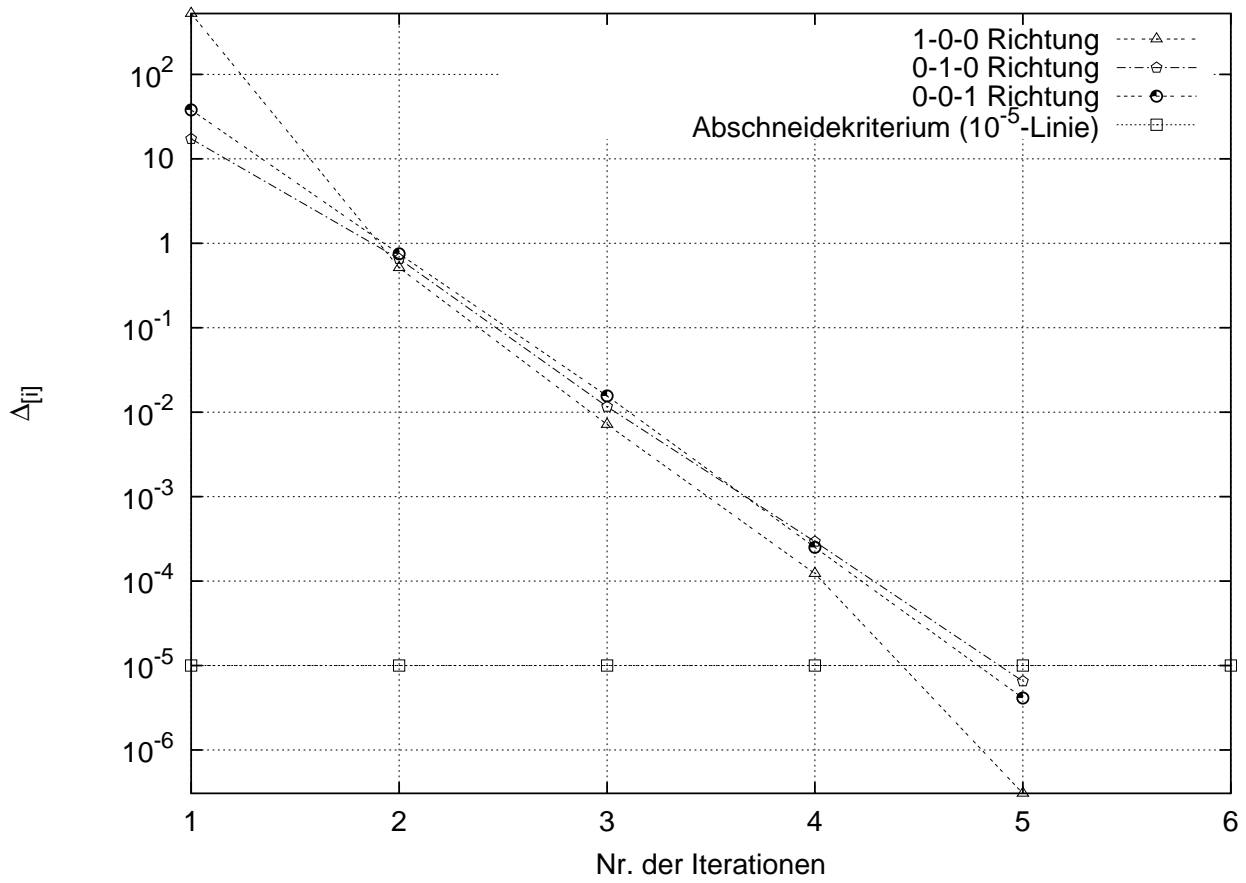
Abbildung 3.8: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ 

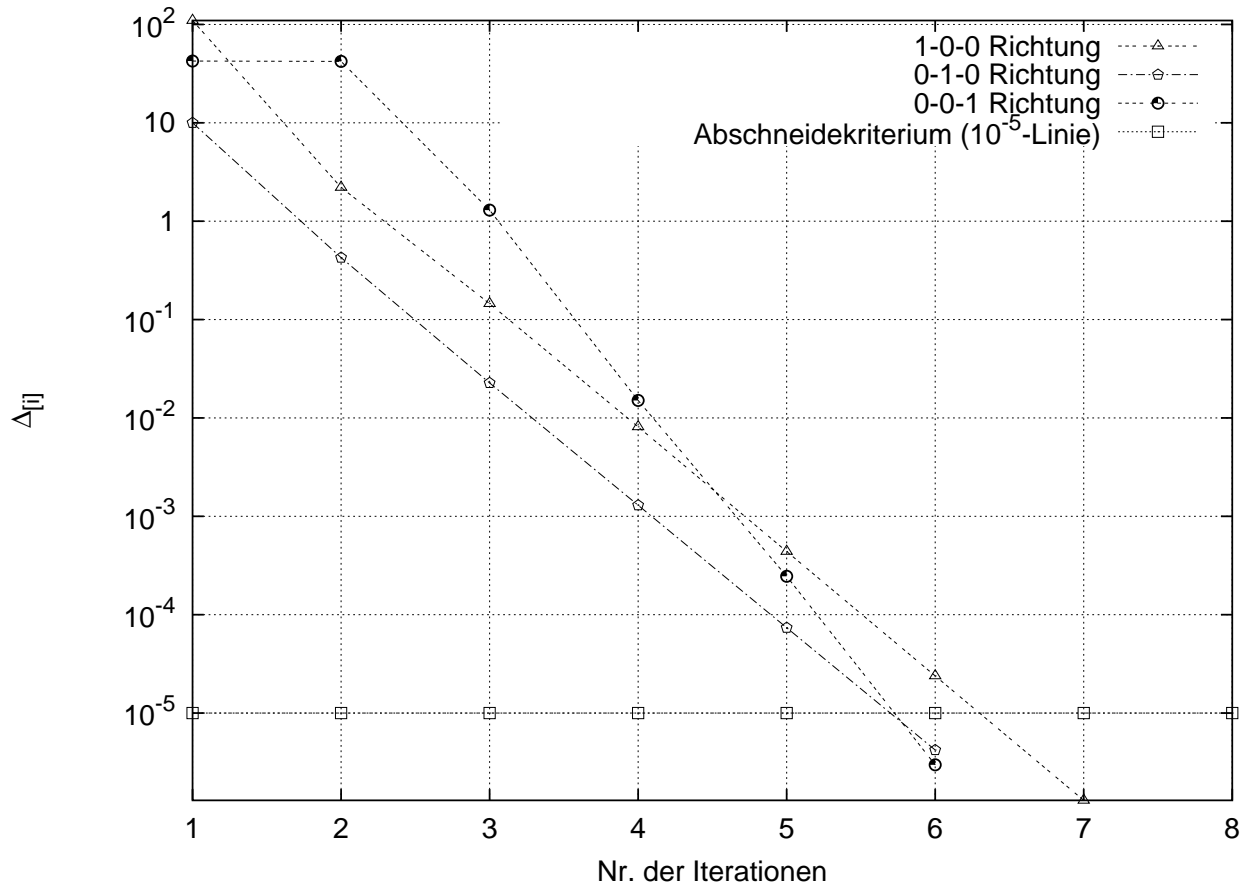
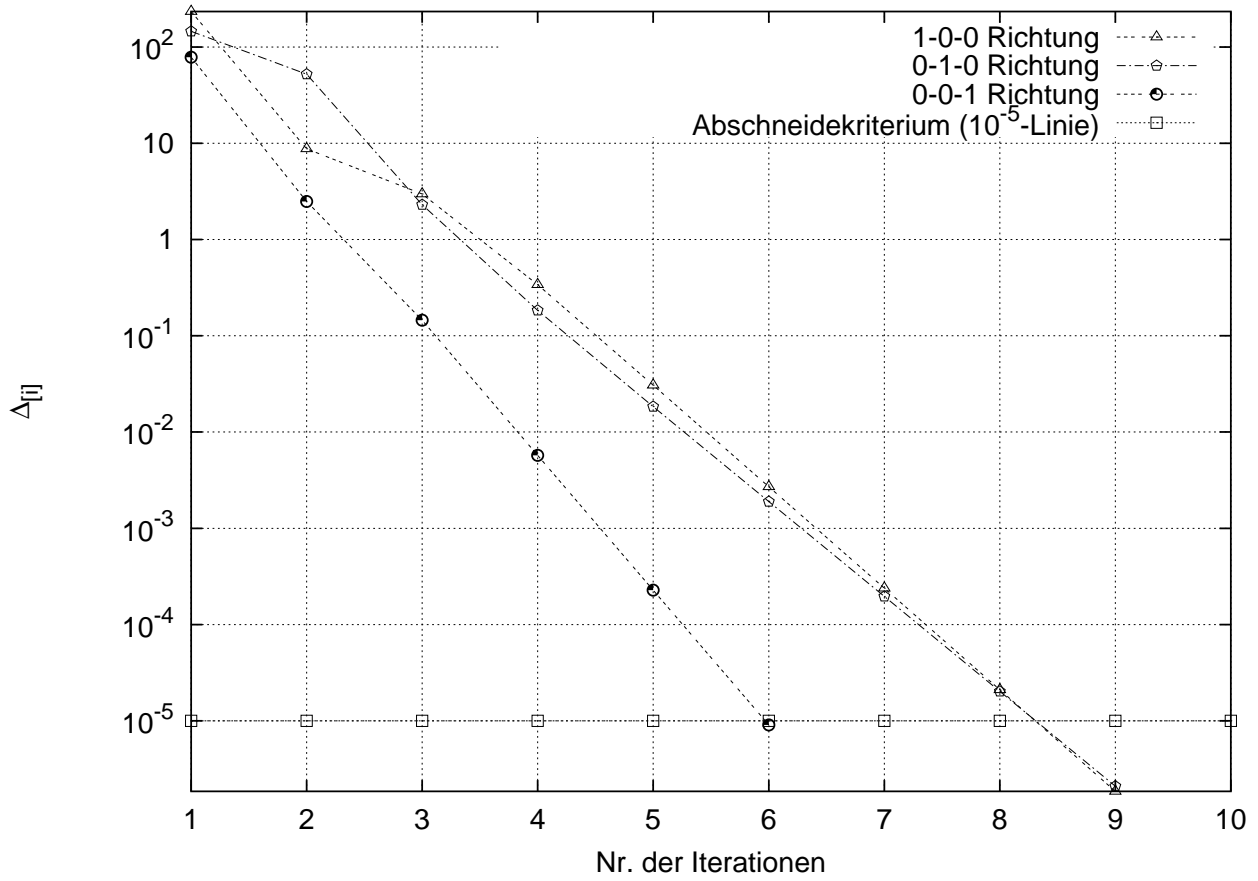
Abbildung 3.9: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (\frac{1}{4}, 1, \frac{1}{4})$ 

Abbildung 3.10: Fluß der Matrixelemente für das Phonon $\vec{q} = (-\frac{1}{2}, 0, 1)$ 

Die Ergebnisse der selbstkonsistenten Berechnung sind in den Abbildungen 3.11–3.25 graphisch zusammengefaßt.

Die Abschirmungskoeffizienten für die einzelnen Übergänge werden gemäß

$$A_{\begin{smallmatrix} n' & \vec{k}' \\ n & \vec{k} \end{smallmatrix}} = \left| \frac{C_{\begin{smallmatrix} n' & \vec{k}' \\ n & \vec{k} \end{smallmatrix}}^{[0]}}{C_{\begin{smallmatrix} n' & \vec{k}' \\ n & \vec{k} \end{smallmatrix}}^{[i_a]}} \right| \quad (3.60)$$

definiert. i_a ist die Nummer des Iterationschrittes, bei dem die selbstkonsistente Berechnung abgebrochen wird. Je größer der Abschirmungskoeffizient für einen Übergang, desto stärker wird dieser Übergang unterdrückt.

Die Abschirmungskoeffizienten zu den Phonon–Impulsen können aufgrund der Vierdimensionalität der Diagramme nicht dargestellt werden.

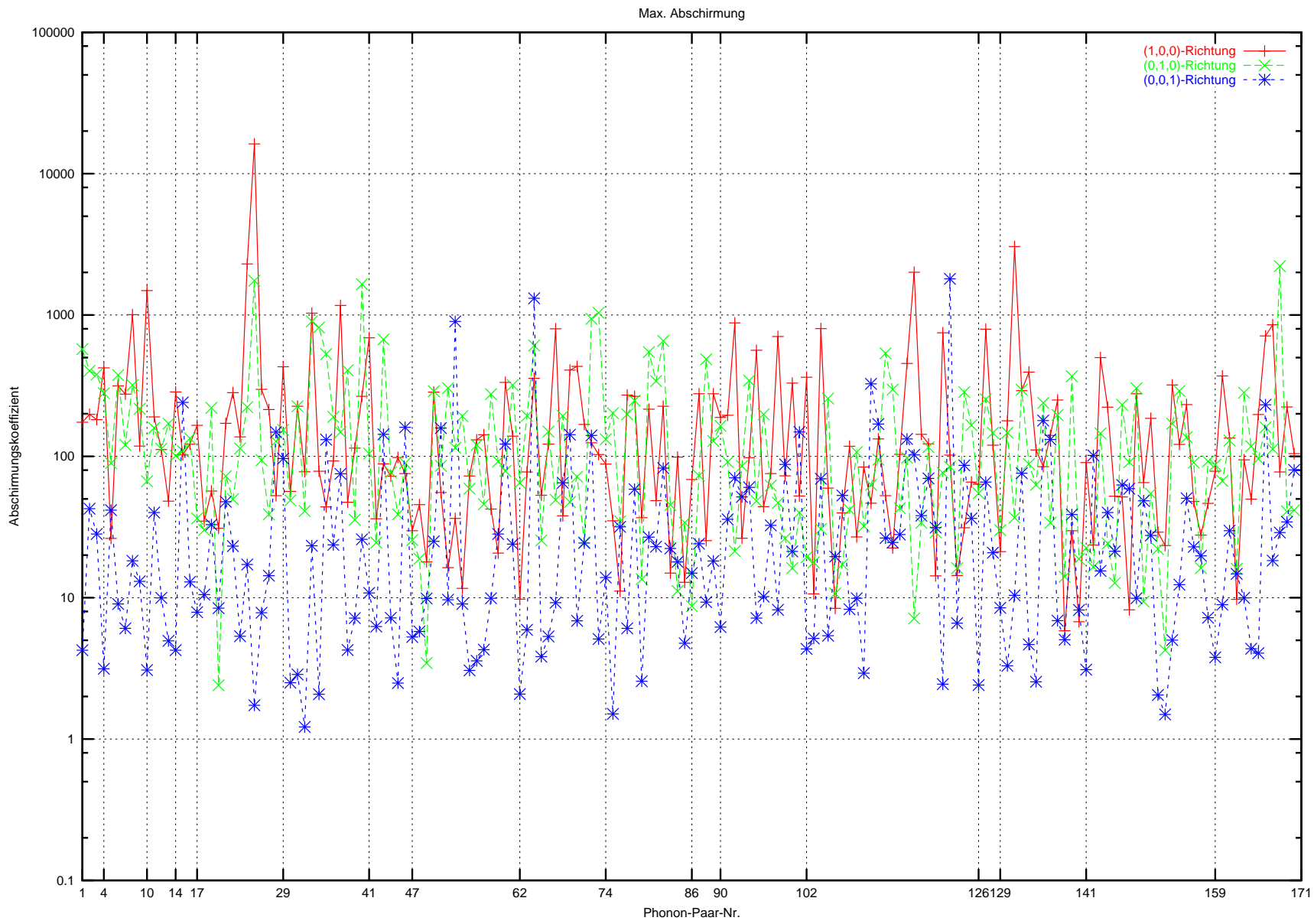
In den folgenden Abbildungen sind daher die Nummern der Phononen–Paare aus der Tabelle D.1 auf die x–Achse aufgetragen. Die senkrechten Geraden, die der Anschaulichkeit dienen sollen, geben Intervalle an, in denen Phononen gleiche Impuls–Beträge besitzen. Die bei Betrachtung zweier Geraden jeweils links liegende Gerade symbolisiert die untere, die rechts liegende die obere Intervallgrenze. Die obere Grenze wird allerdings nicht in das Intervall mit einbezogen, sondern liefert die untere Grenze des nächsten Intervalls. Auf der y–Achse sind ausgewählte Abschirmungskoeffizienten aufgetragen. Mathematische Bedeutung haben ausschließlich die Werte mit ganzzahliger Phononen–Paar–Nummer.

Die Abbildung 3.11 zeigt die maximalen Abschirmungskoeffizienten, die durch ein Phonon mit definierter Nummer erzeugt werden. In Abbildung 3.12 sind die maximalen Abschirmungskoeffizienten dargestellt, die durch ein numeriertes Phonon an der Fermi–Kante entstehen. In den Abbildungen 3.13 und 3.14 sind die minimalen Abschirmungskoeffizienten zu finden. Auch hier sind die Koeffizienten, die durch ein Phonon im allgemeinen und an der Fermi–Kante im speziellen erzeugt werden, getrennt dargestellt. Es existieren, wie man sieht, Übergänge, die unter Einfluß der Austausch–Korrelationseffekte erheblich verstärkt werden. Der Effekt an der Fermi–Kante ist allerdings viel schwächer als für den allgemeinen Fall.

Die Abbildungen 3.15 und 3.16 stellen die Mittelwerte der Abschirmungskoeffizienten eines numerierten Phonons graphisch dar. Auch hier ist der allgemeine Fall von dem an der Fermi–Kante separiert. Diese Mittelwerte stellen in stark vereinfachter Weise dar, wie sich die Austausch–Korrelationseffekte meßbar auf die Übergangskoeffizienten auswirken.

In den Abbildungen 3.17–3.25 sind die maximalen, die minimalen und die mittleren Abschirmungskoeffizienten aufgetragen. Die Übergänge an der Fermi–Kante unterscheiden sich von denen des allgemeinen Falls.

In den Abbildungen 3.11–3.25 ist im wesentlichen die Anisotropie von Übergängen unter dem Einfluß der Elektron–Phonon–Wechselwirkung veranschaulicht.

Abbildung 3.11: Maximale Abschirmungskoeffizienten der Phonon-Paare \vec{q} und $-\vec{q}$

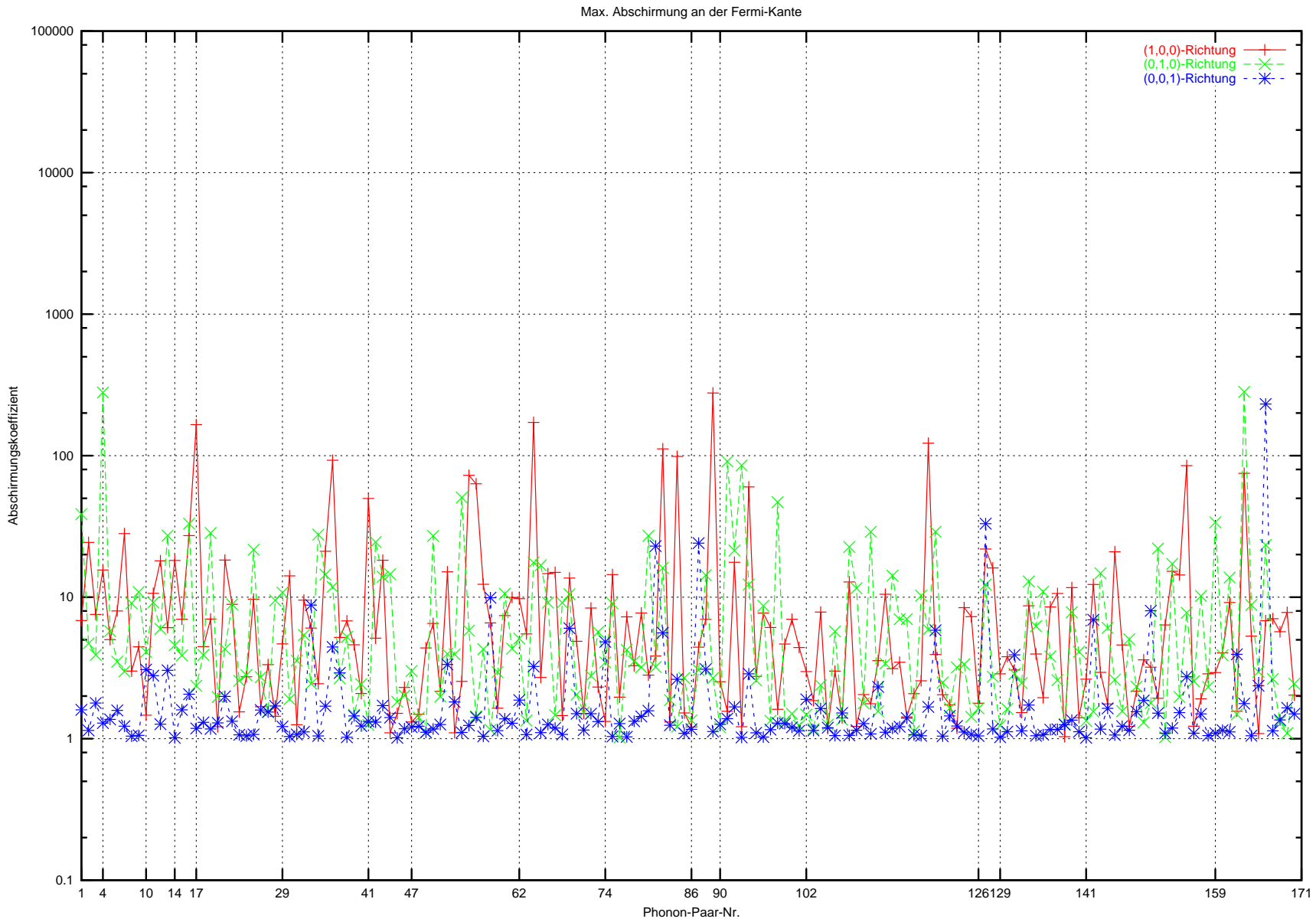


Abbildung 3.12: Maximale Abschirmungskoeffizienten an der Fermi-Kante

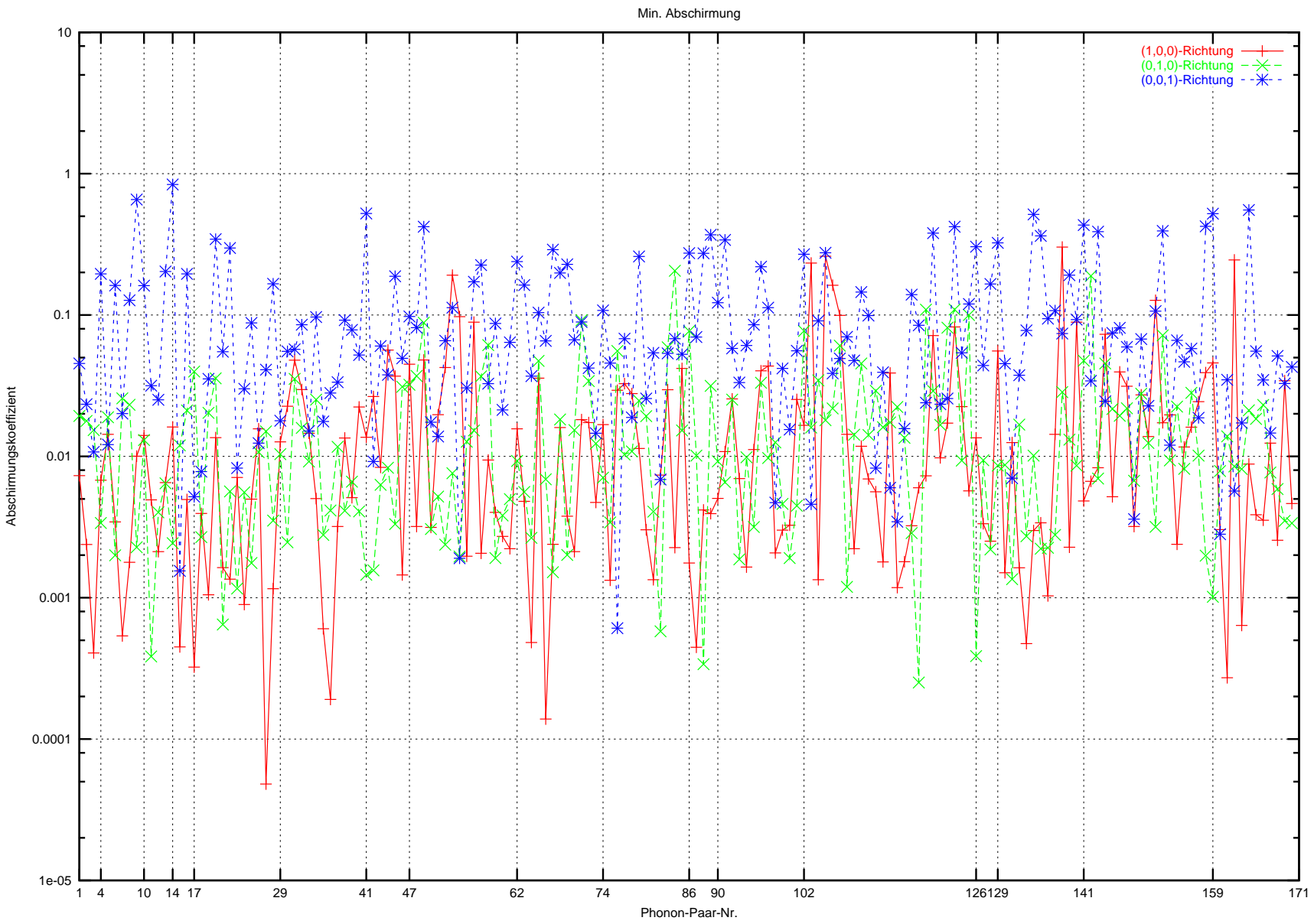
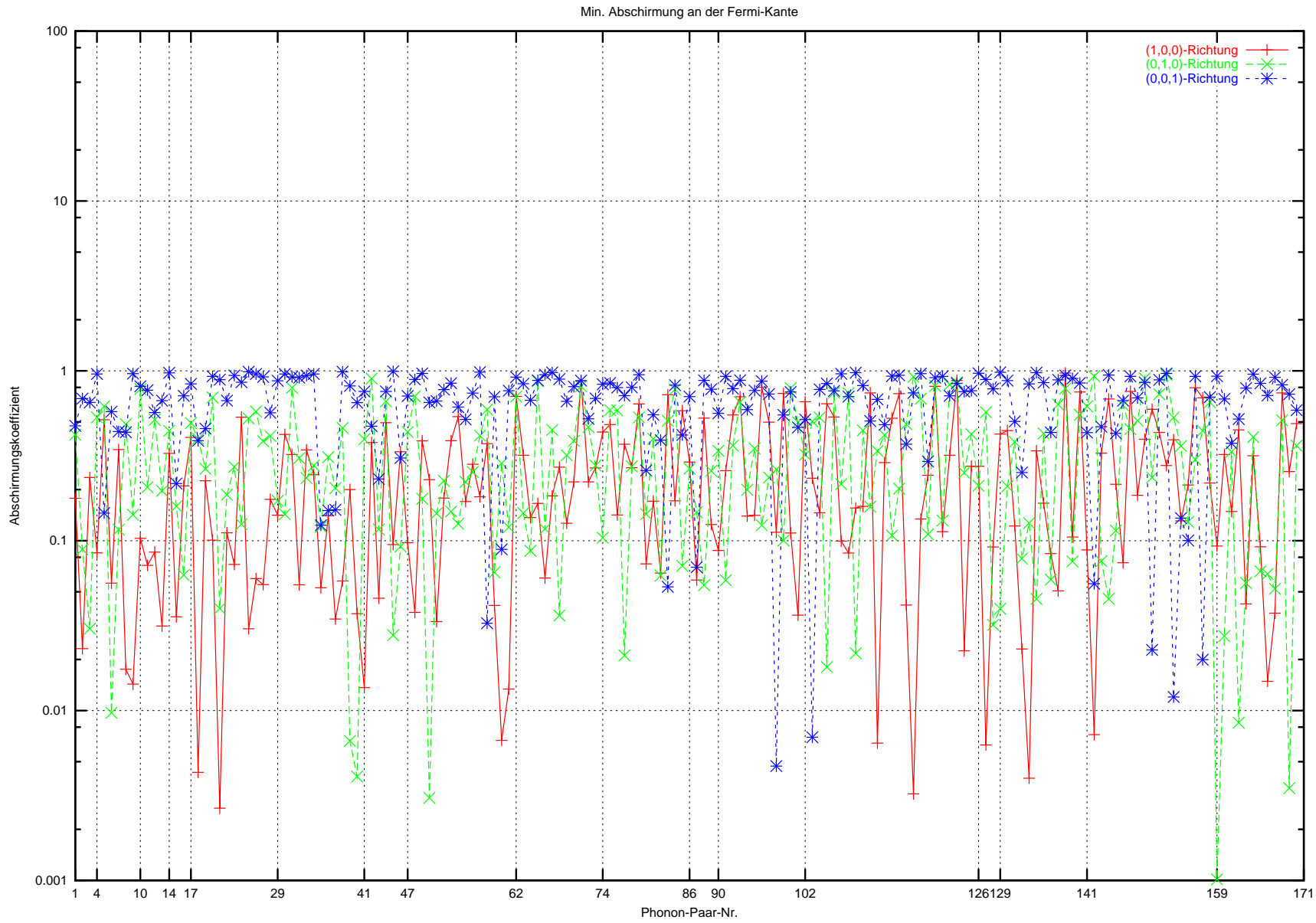


Abbildung 3.13: Minimale Abschirmungskoeffizienten der Phonon-Paare \vec{q} und $-\vec{q}$

Abbildung 3.14: Minimale Abschirmungskoeffizienten an der Fermi-Kante



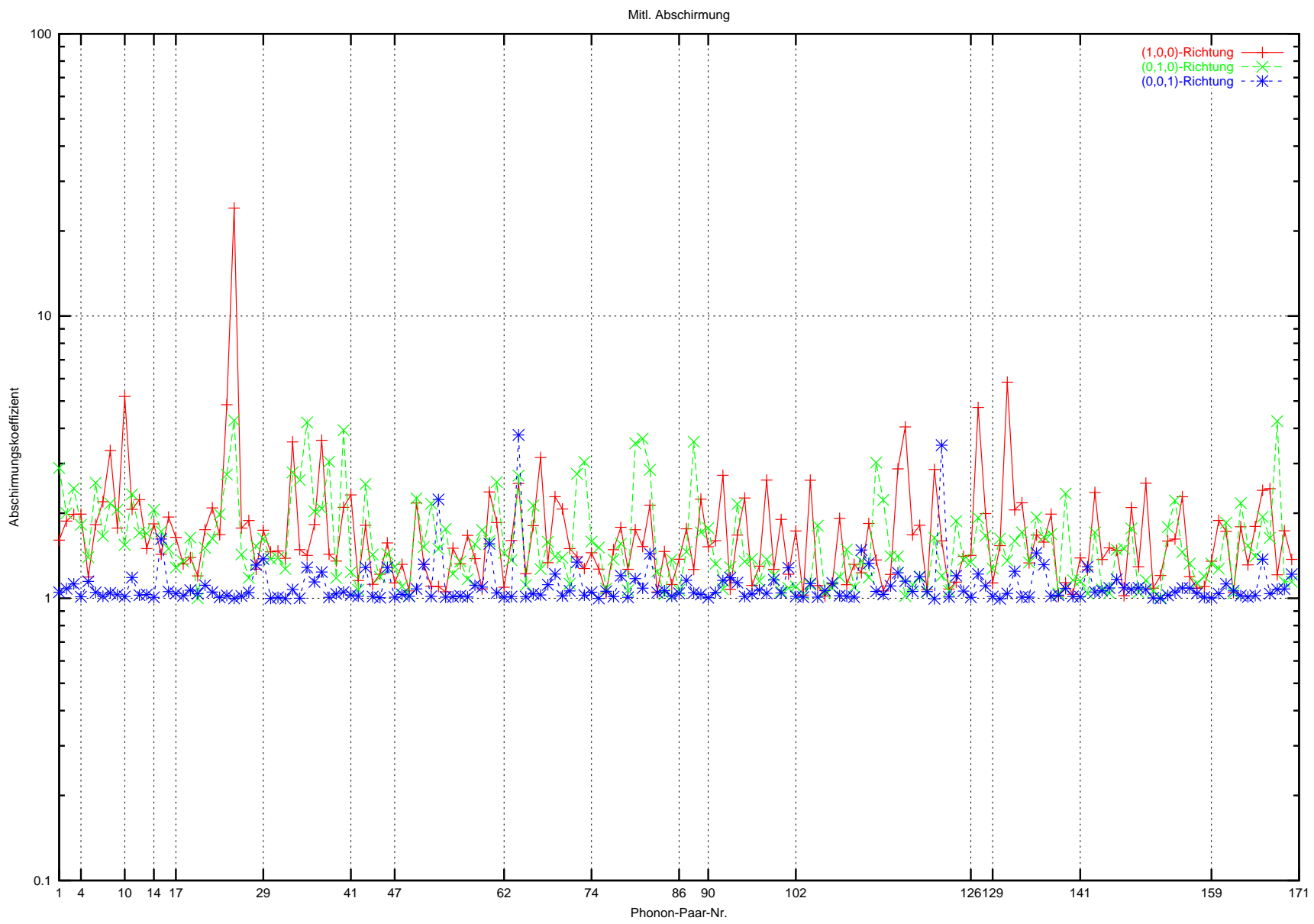
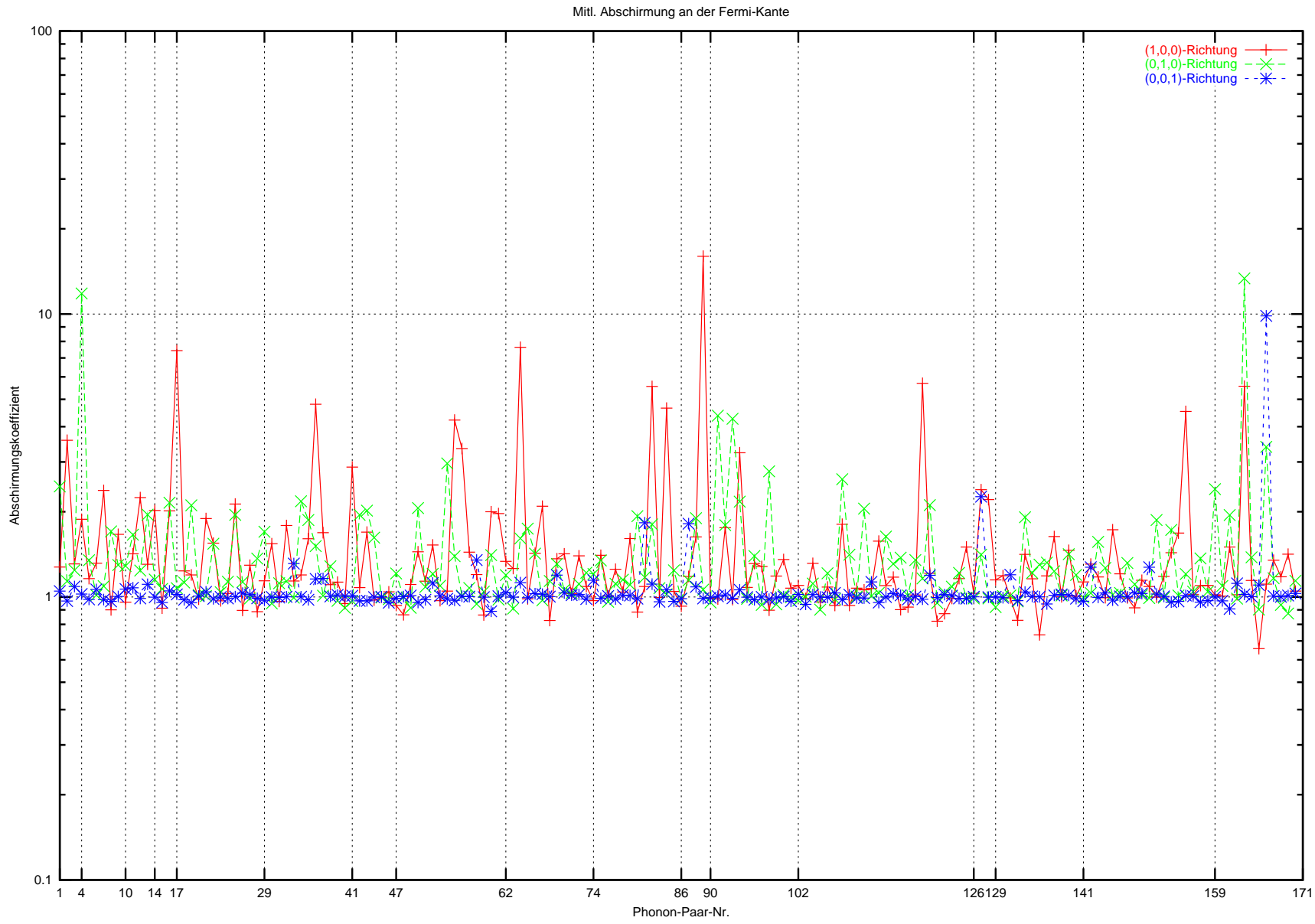
Abbildung 3.15: Mittlere Abschirmungskoeffizienten der Phonon-Paare \vec{q} und $-\vec{q}$

Abbildung 3.16: Mittlere Abschirmungskoeffizienten an der Fermi-Kante



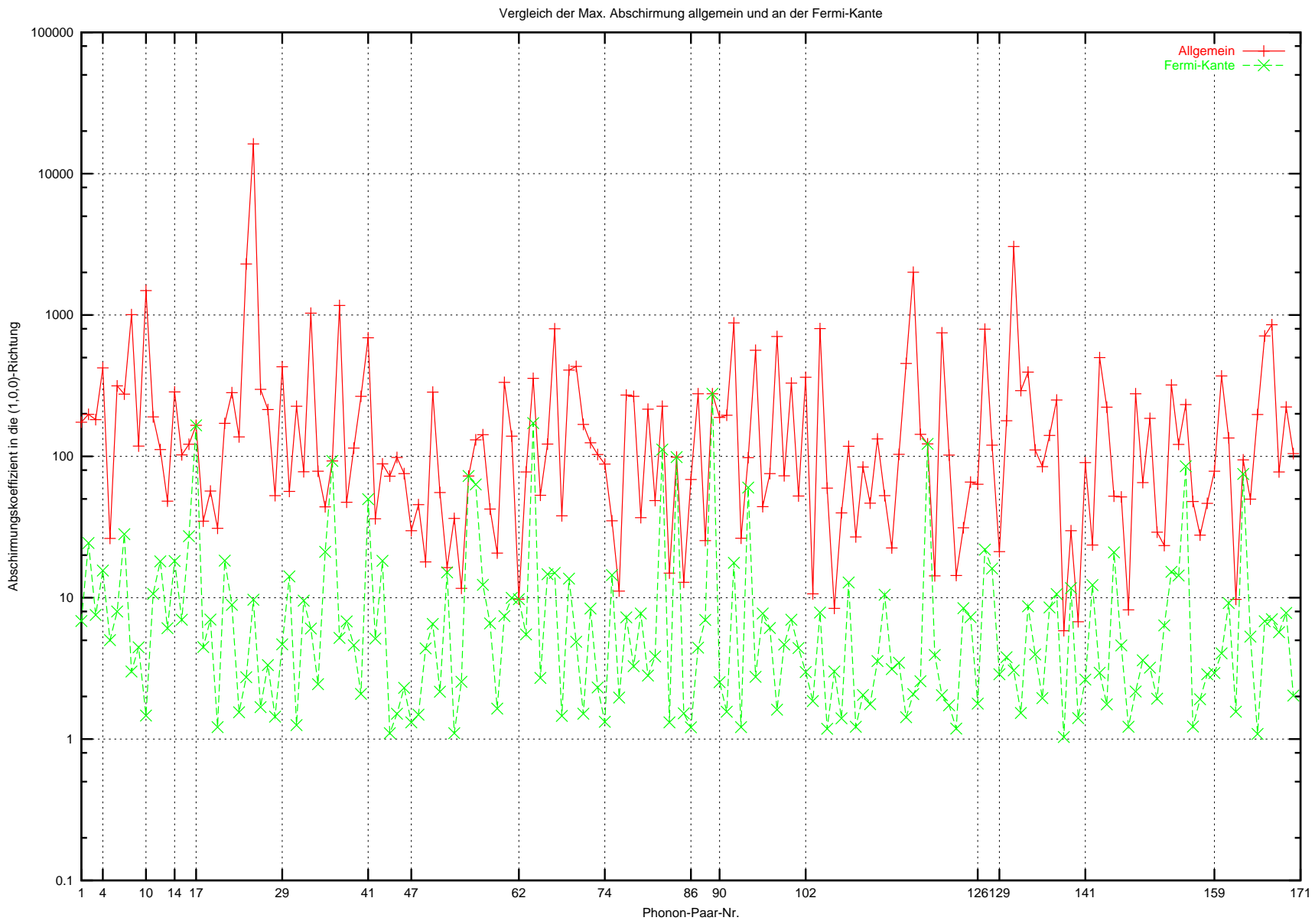
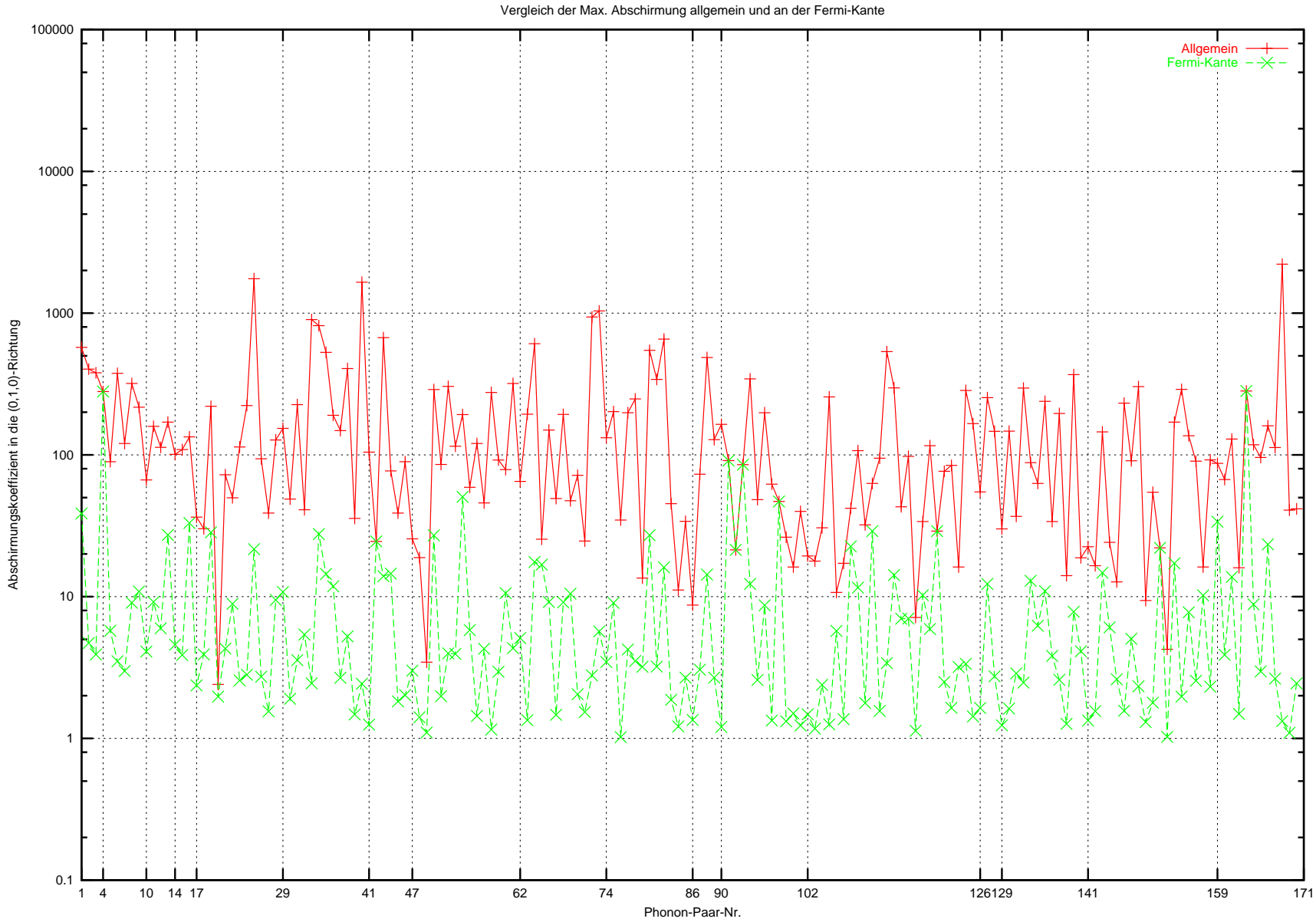


Abbildung 3.17: Vergleich maximaler Abschirmungskoeffizienten in 1-0-0-Richtung

Abbildung 3.18: Vergleich maximaler Abschirmungskoeffizienten in 0-1-0-Richtung



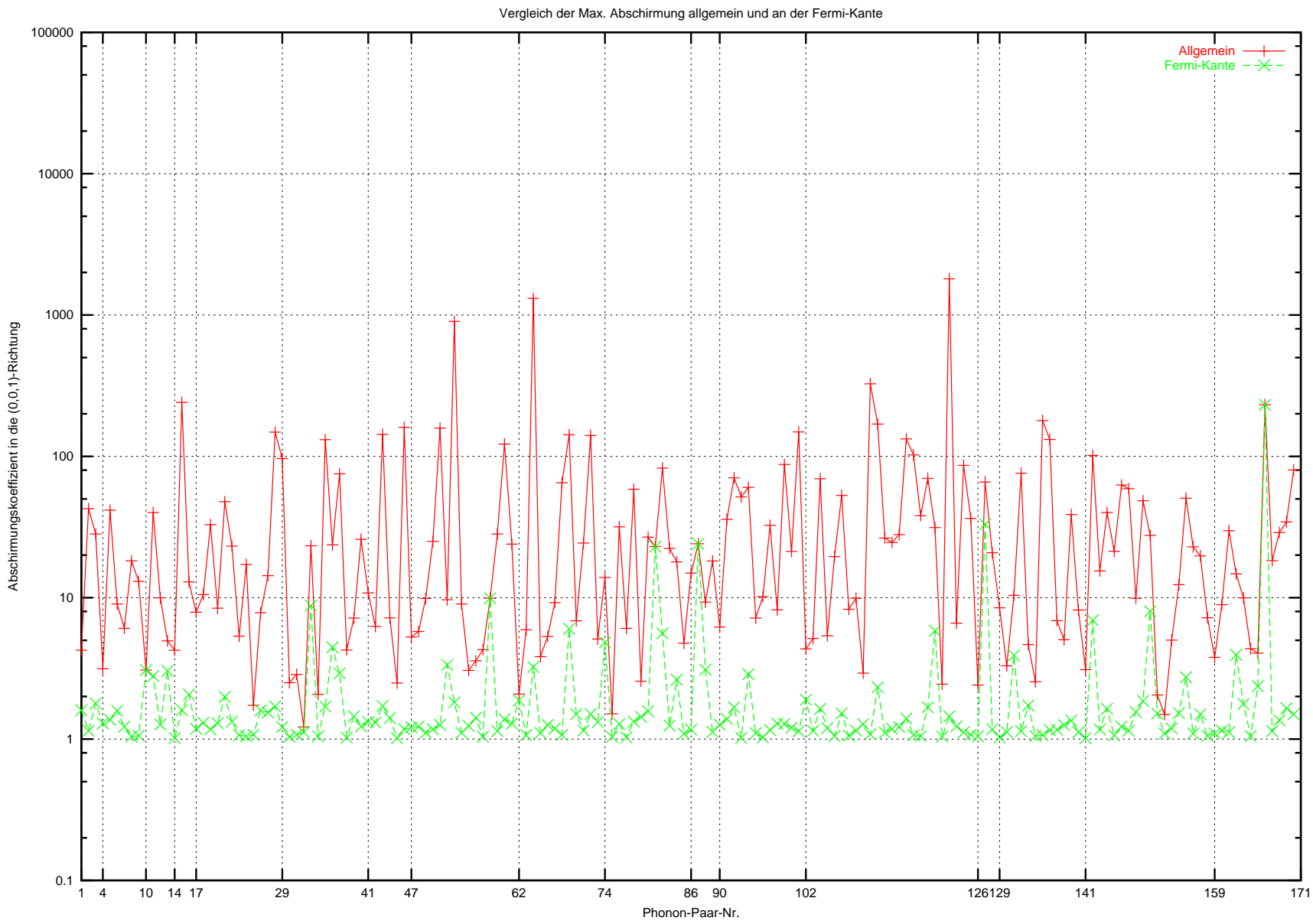
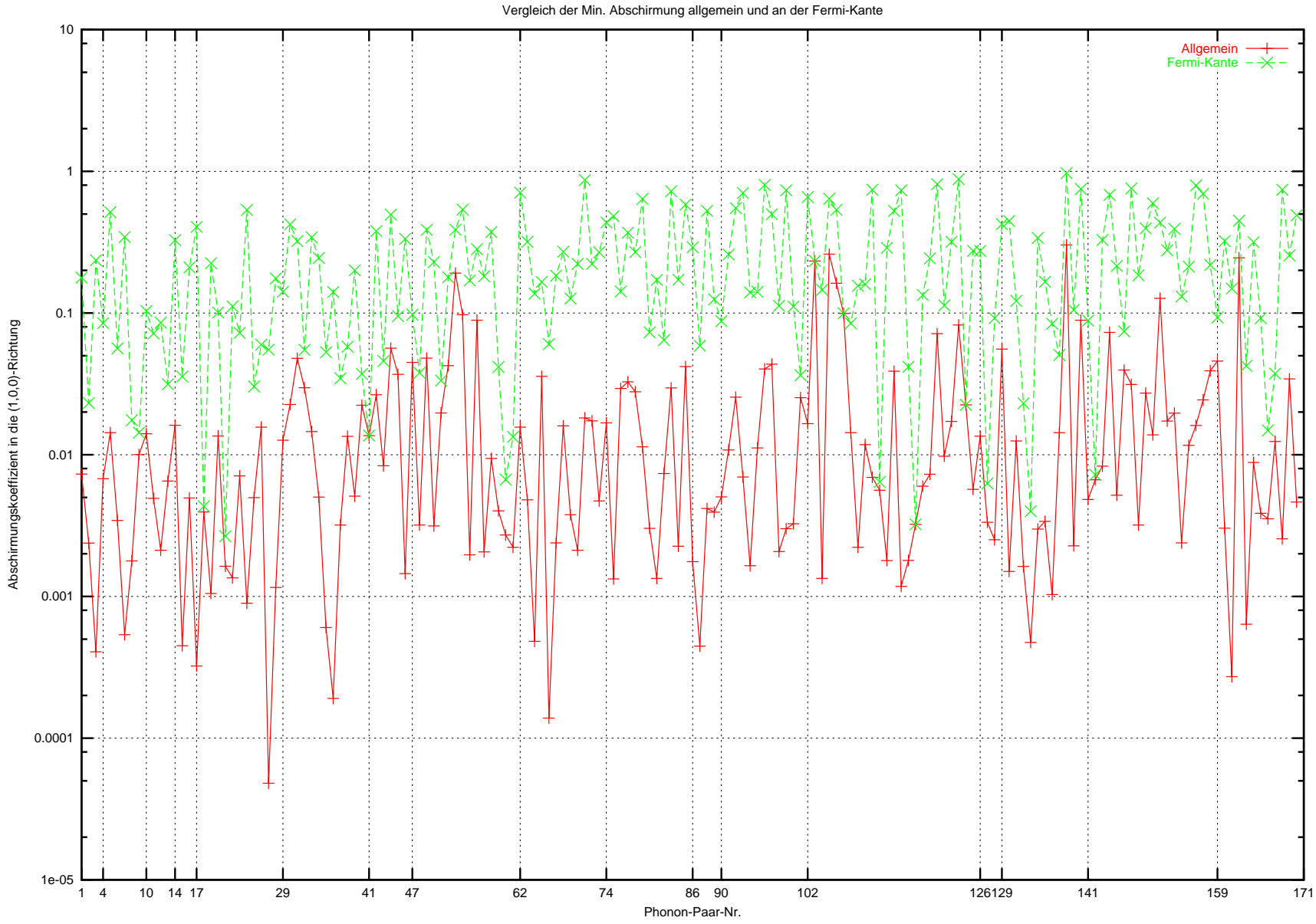


Abbildung 3.19: Vergleich maximaler Abschirmungskoeffizienten in 0-0-1-Richtung

Abbildung 3.20: Vergleich minimaler Abschirmungskoeffizienten in 1-0-0-Richtung



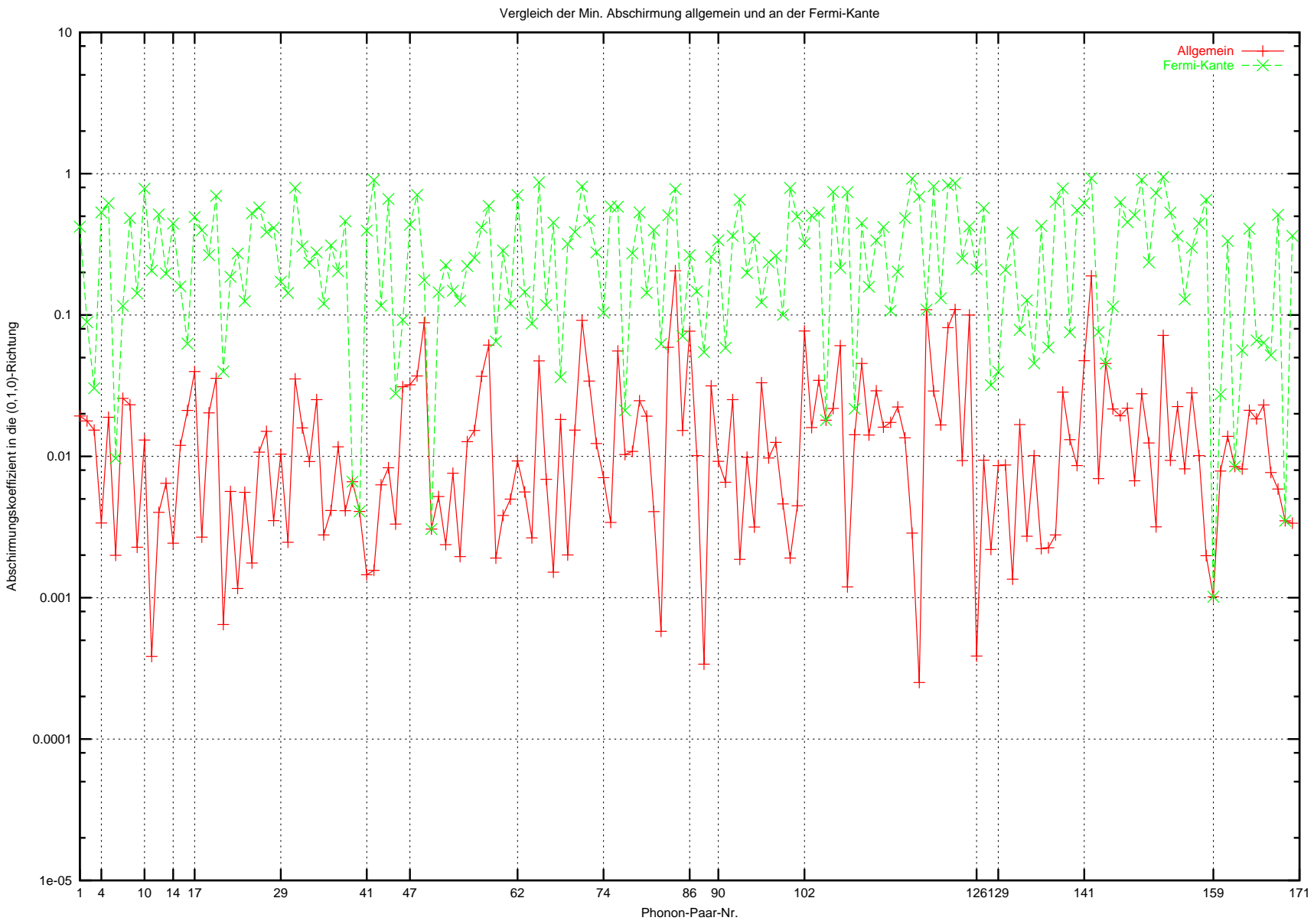


Abbildung 3.21: Vergleich minimaler Abschirmungskoeffizienten in 0-1-0-Richtung

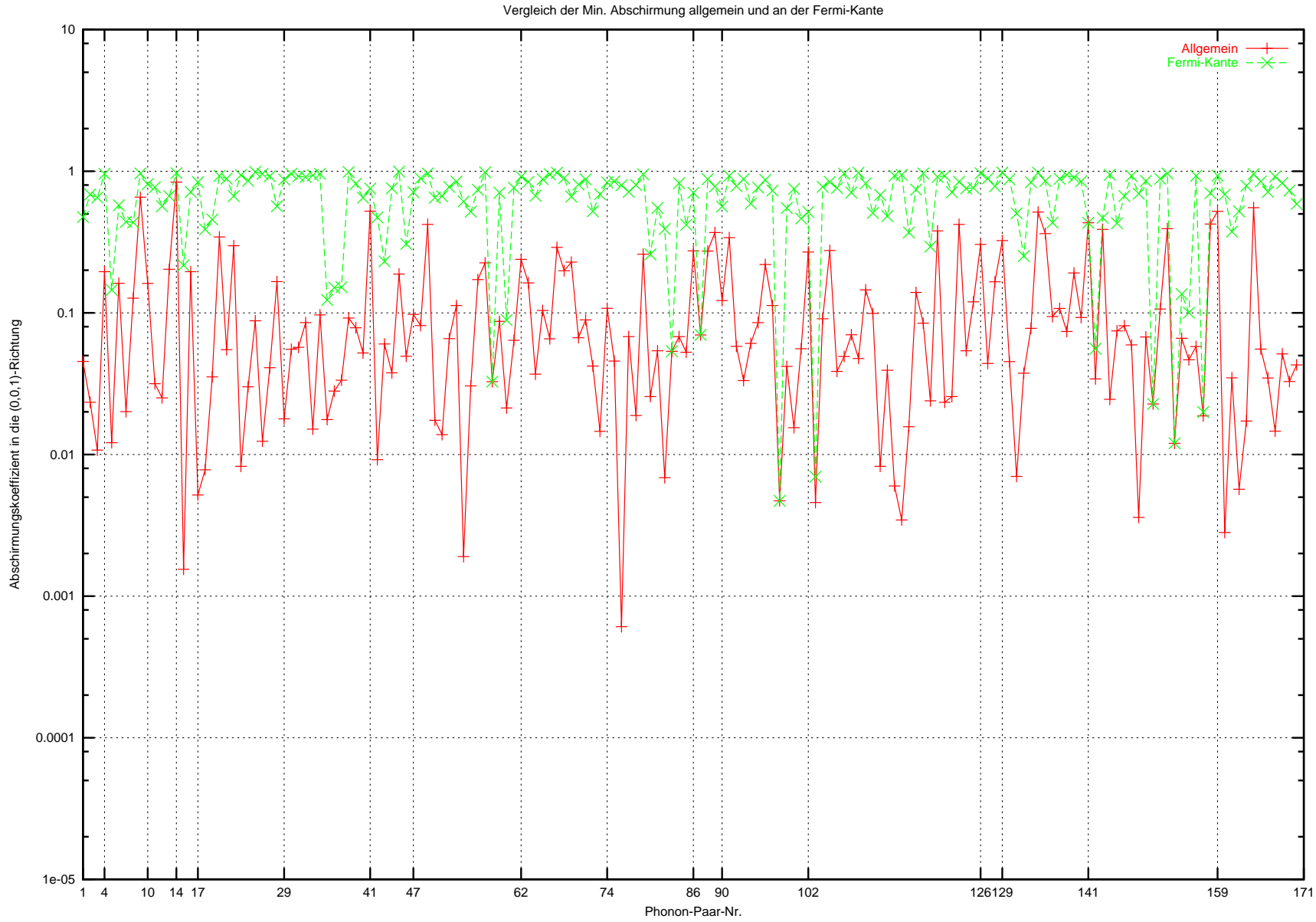


Abbildung 3.22: Vergleich minimaler Abschirmungskoeffizienten in 0-0-1-Richtung

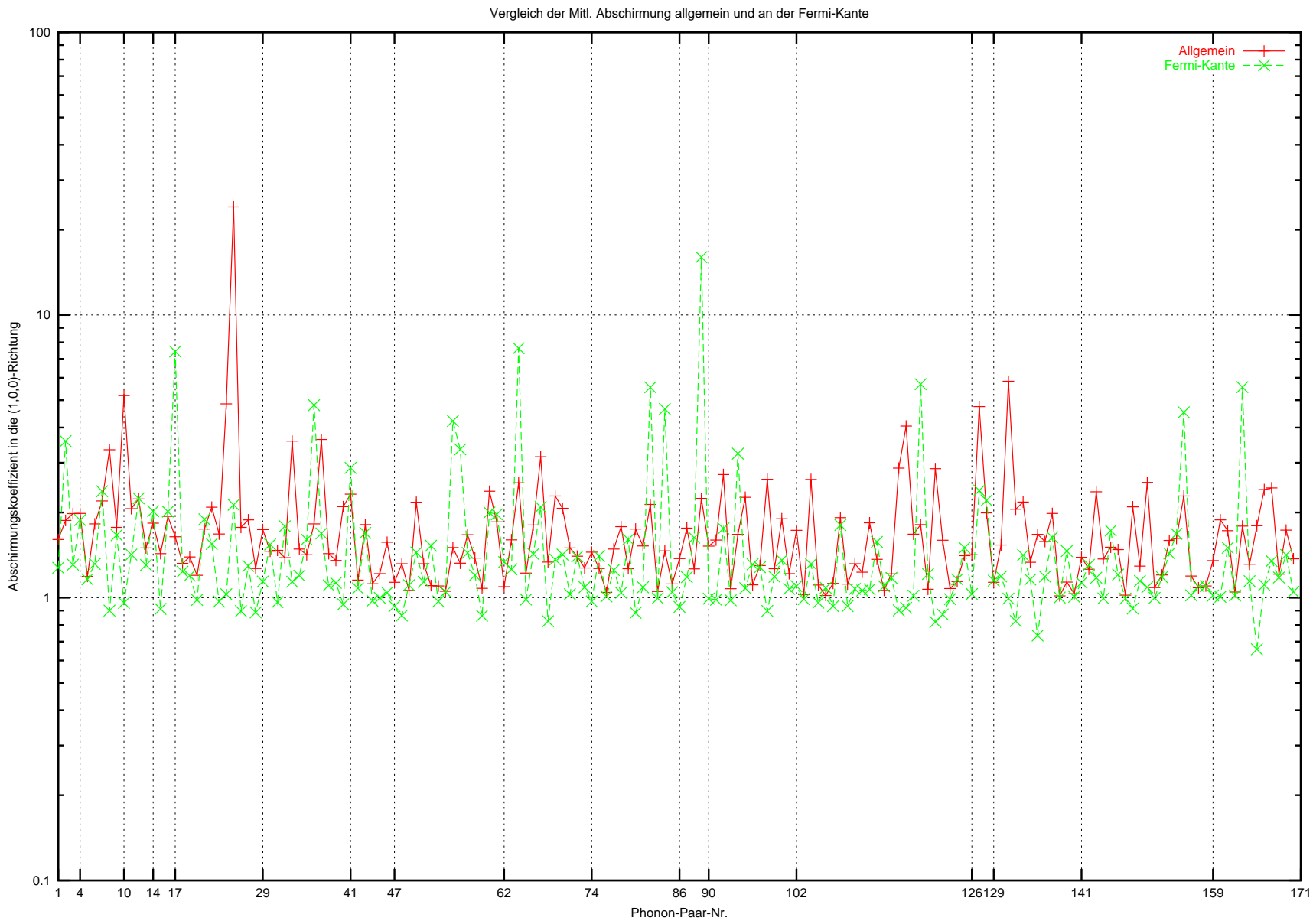
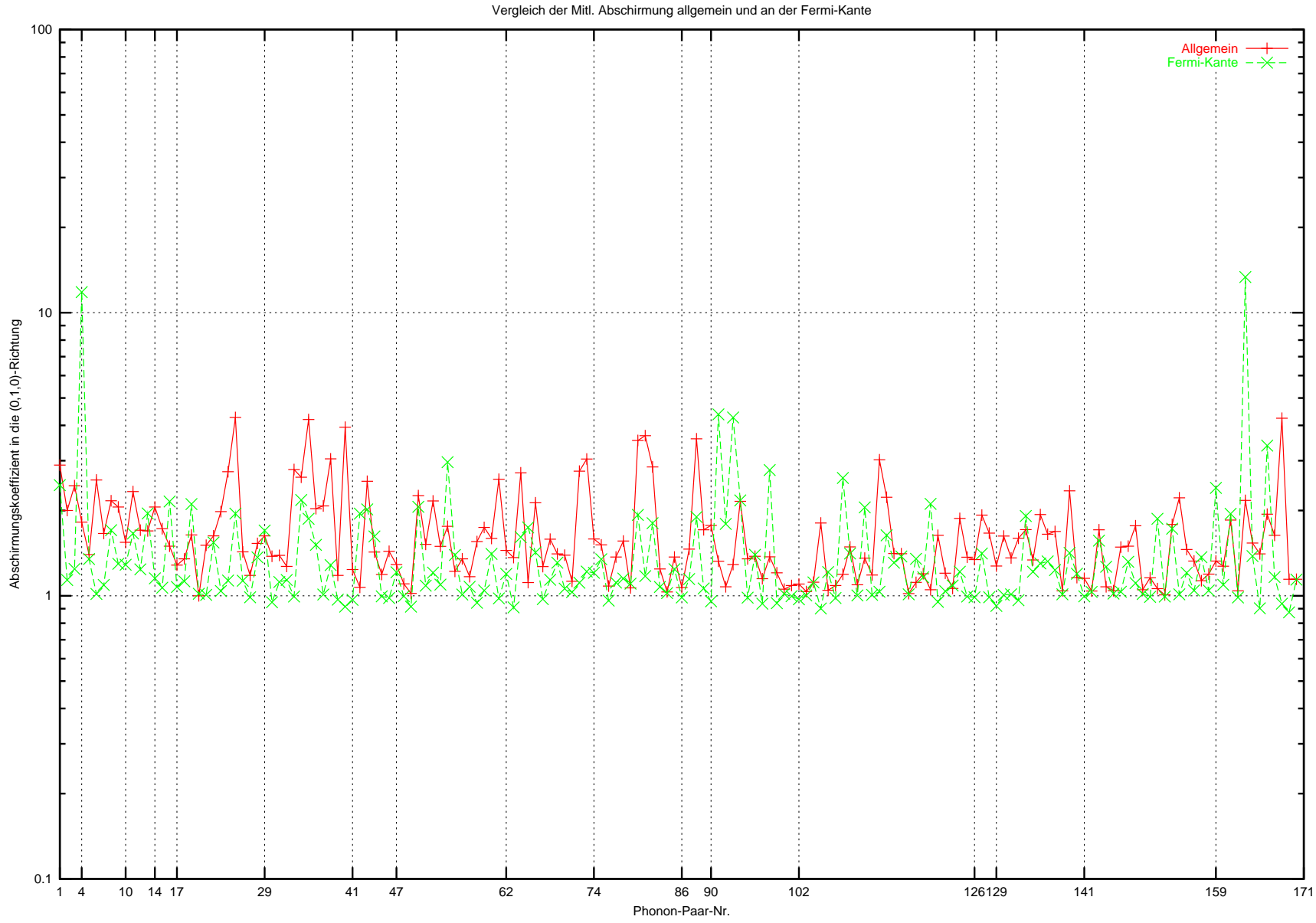


Abbildung 3.23: Vergleich mittlerer Abschirmungskoeffizienten in 1-0-0-Richtung

Abbildung 3.24: Vergleich mittlerer Abschirmungskoeffizienten in 0-1-0-Richtung



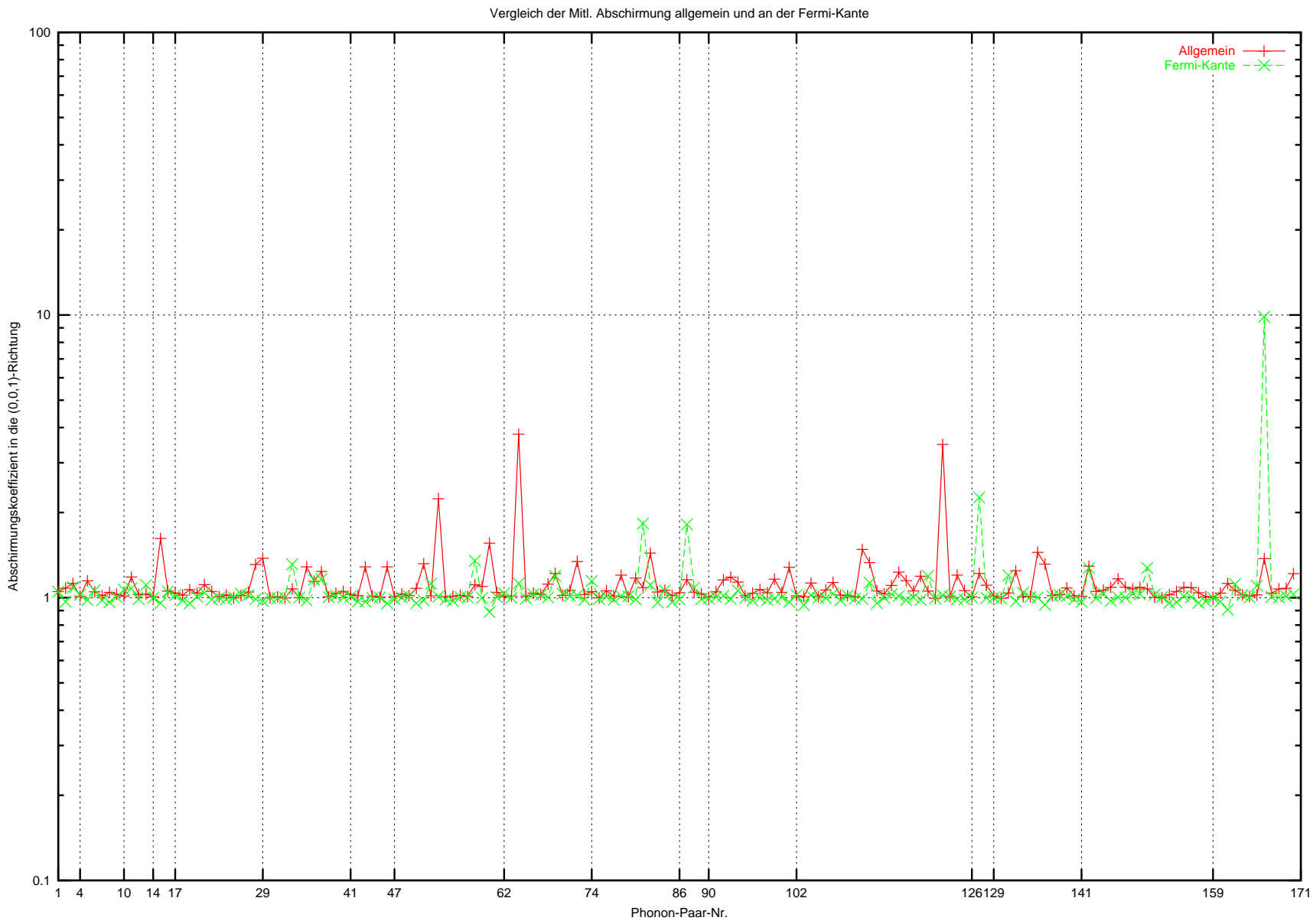


Abbildung 3.25: Vergleich mittlerer Abschirmungskoeffizienten in 0-0-1-Richtung

Kapitel 4

Transporttheorie

4.1 Die Boltzmann-Gleichung der Leitungselektronen und die begrenzte Gültigkeit der Relaxationszeitnäherung

Schränkt man die Elektron–Phonon–Wechselwirkung auf die zeitabhängige Störungstheorie erster Ordnung ein, so kann die klassische kinetische Boltzmann-Gleichung auch im nicht Gleichgewichtsfall als gute Näherung der quantenmechanischen kinetischen Gleichung für die Leitungselektronen in einem Metall oder Halbleiter angenommen werden (siehe [98]).

Bloch hat als erster die klassische kinetische Boltzmann-Gleichung herangezogen, um die Transportphänomene in Metallen zu beschreiben. Seine Überlegungen basieren auf der Analogie zur klassischen kinetischen Gas-Theorie. In der klassischen kinetischen Theorie liefert die Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial f(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla}_{\vec{p}} f(\vec{p}, \vec{r}, t) \frac{d\vec{p}}{dt} + \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(\vec{p}, \vec{r}, t) \frac{d\vec{r}}{dt} = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} \quad (4.1)$$

die Gleichgewichtsverteilungsfunktion¹ eines Systems unter äußeren Einflüssen. \vec{p} ist der klassische Impuls, \vec{r} der Ortsvektor und t die Zeitvariable. Die linke Seite von Gleichung (4.1) ist das Strömungsglied. Es umfaßt die Wirkung der äußeren Kräfte bzw. Felder auf das System. Das Stoßintegral $(\frac{\partial f}{\partial t})_{\text{Stöße}}$, auch Stoßterm genannt, gibt die klassischen Stoßvorgänge zweier Teilchen im System an. Im physikalischen Sinne beschreibt die Boltzmann-Gleichung damit das Gleichgewicht zwischen den äußeren Kräften und den inneren Kräften. Die Verteilungsfunktion der Elektronen in einem Metall verändert sich aufgrund äußerer elektromagnetischer Felder und räumlicher Inhomogenitäten. Die räumlichen Inhomogenitäten entstehen infolge des Temperaturgradienten und des chemischen Potentials. Die Veränderung findet solange statt, bis sie durch die Streuung der Elektronen an

¹die Wahrscheinlichkeitsdichte im (\vec{p}, \vec{r}) -Raum

den Gitterschwingungen und an den Gitterbaufehlern kompensiert wird und sich ein Gleichgewicht einstellt.

In einem Metall kann die Boltzmann–Gleichung für die Leitungselektronen² gemäß

$$\frac{\partial f(n\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla}_{\vec{k}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t) \frac{d\vec{k}}{dt} + \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t) \frac{d\vec{r}}{dt} + \left(\frac{\partial f_{n\vec{k}}}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = 0 \quad (4.2)$$

angegeben werden. $f(n\vec{k}, \vec{r}, t)$ in (4.2) ist die Verteilungsfunktion der Leitungselektronen. Die ersten drei Terme dieser Gleichung bilden das Strömungsglied. Es schreibt sich als die totale Ableitung der Verteilungsfunktion nach der Zeit

$$\frac{\partial f(n\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla}_{\vec{k}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t) \frac{d\vec{k}}{dt} + \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t) \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{df(n\vec{k}, \vec{r}, t)}{dt}.$$

Der Stoßterm ist wie folgt definiert

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = \sum_{n'\vec{k}'} [f_{n\vec{k}}(1 - f_{n'\vec{k}'}) W(n\vec{k}, n'\vec{k}') - f_{n'\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}}) W(n'\vec{k}', n\vec{k})]. \quad (4.3)$$

Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung (4.3) beschreibt die Streuung eines Elektrons an einer Gitterschwingung, das von dem Zustand $n\vec{k}$ in den Zustand $n'\vec{k}'$ übergeht, der zweite Term gibt den entgegengesetzten Streuvorgang an.

Für die Bloch–Zustände gilt

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}}, \quad (4.4)$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e}{\hbar} \vec{E} + \frac{e}{\hbar^2 c} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \times \vec{H} \quad . \quad (4.5)$$

\vec{E} symbolisiert das elektrische Feld und \vec{H} das Magnetfeld.

Für die Elektronen hat die Boltzmann–Gleichung nach (4.4) und (4.5) die Gestalt

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(n\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \left[\frac{e}{\hbar} \vec{E} + \frac{e}{\hbar^2 c} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \times \vec{H} \right] \vec{\nabla}_{\vec{k}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t) \\ + \left[\frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \right] \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t) + \left(\frac{\partial f_{n\vec{k}}}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = 0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Der zweite Term der obigen Gleichung beschreibt die Auswirkung der äußeren elektromagnetischen Felder. Der dritte Term der Gleichung (4.6) gibt die Auswirkung des räumlichen Temperaturgradienten und des chemischen Potentials wieder³. Aus mathematischer Sicht ist die Boltzmann–Gleichung (4.6) für den

²In der Literatur auch unter dem Namen Bloch–Gleichung zu finden.

³Dies wird im Abschnitt 4.2 für die linearisierte Form der Boltzmann–Gleichung gezeigt.

allgemeinen Fall eine nichtlineare Integro–Differentialgleichung. Daher ist es praktisch nicht möglich, sie für den allgemeinen Fall zu lösen. Für die approximative Lösung der Boltzmann–Gleichung sind zwei Aspekte von Bedeutung:

1. Bei den schwachen Störungen ist die Linearisierung erlaubt.
2. Die Lösung der linearisierten Boltzmann–Gleichung kann bei der speziellen Struktur der Übergangswahrscheinlichkeiten sehr stark vereinfacht werden.

Falls die Übergangswahrscheinlichkeiten isotrop sind, d.h. falls

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k} - \vec{k}') = W(\hat{\alpha}(\vec{k} - \vec{k}')), \quad (4.7)$$

mit $\hat{\alpha}$ als eine beliebige Drehmatrix in drei Dimensionen, so gilt für die linearisierte Boltzmann–Gleichung die Relaxationszeitnäherung

$$\left(\frac{\partial f_{n\vec{k}}}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = \frac{f_{n\vec{k}} - f_0(n\vec{k})}{\tau}, \quad (4.8)$$

mit τ als Relaxationszeit und $f_0(n\vec{k})$ als Verteilungsfunktion ohne äußere Felder. Das Modell des homogenen Elektronengases und das Debye–Modell für die Gitterschwingungen liefert isotrope Übergangswahrscheinlichkeiten.

Die in dieser Arbeit verwendeten Übergangskoeffizienten lassen sich aus den Übergangskoeffizienten zu (2.15) durch Multiplikation mit Amplituden gewinnen, welche entsprechend der Bose–Einstein–Statistik als temperaturabhängig angenommen werden. Die Übergangskoeffizienten sind anisotrop. Dies kann man deutlich am Beispiel der Abschirmungsdiagramme in den Abbildungen 3.11–3.25 sehen. Dort sind die Abschirmungskoeffizienten zu den Phononen mit gleichen Impulsbeträgen aber verschiedenen Impulsrichtungen zwischen den vertikalen Linien eingetragen. Die Phononen–Impulse sind dabei bis auf einen passend gewählten reziproken Gittervektor \vec{K} auf die Differenzen $\vec{k} - \vec{k}'$ eingeschränkt. Im Falle der isotropen Übergängen müßte man in den Abbildungen horizontale Geraden zwischen den vertikalen Geraden sehen.

Zusätzlich zu den Übergangskoeffizienten liefert das Schwingungsspektrum der Phononen einen Beitrag zur Anisotropie der Übergangswahrscheinlichkeiten (siehe [27]). Damit kann die Relaxationszeitnäherung zur Lösung der Boltzmann–Gleichung hier nicht verwendet werden.

Nimmt man kleine äußere Felder an, so läßt sich die Boltzmann–Gleichung linearisieren und mit Hilfe des Kohlerschen Variationsverfahrens in der linearisierten Form lösen.

4.2 Linearisierung der Boltzmann-Gleichung für Leitungselektronen

Die folgenden Überlegungen basieren auf den Mitteilungen von Bross [24]. Setzt man Gleichung (1.29) in Gleichung (4.3) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}} = & \frac{2\pi N}{\hbar} \sum_{\substack{q, j \\ n', \vec{k}'}} |\eta(q, j)|^2 \\
& \cdot \left\{ f_{n\vec{k}}(1 - f_{n'\vec{k}'}) |\vec{e}(q, j) \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{\text{screen}} | n\vec{k} \rangle_{\text{WSZ}}|^2 \right. \\
& \quad \cdot n_{j, \vec{q}} \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}+\vec{K}} \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) \\
& + f_{n\vec{k}}(1 - f_{n'\vec{k}'}) |\vec{e}^*(q, j) \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{\text{screen}}^* | n\vec{k} \rangle_{\text{WSZ}}|^2 \\
& \quad \cdot (n_{j, \vec{q}} + 1) \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{K}} \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} - \hbar\omega(\vec{q}, j)) \\
& - f_{n'\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}}) |\vec{e}(q, j) \langle n\vec{k} | \vec{V}_{\text{screen}} | n' \vec{k}' \rangle_{\text{WSZ}}|^2 \\
& \quad \cdot n_{j, \vec{q}} \delta_{\vec{k}'-\vec{k}+\vec{q}+\vec{K}} \delta(E_{n'\vec{k}'} - E_{n\vec{k}} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) \\
& - f_{n'\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}}) |\vec{e}^*(q, j) \langle n\vec{k} | \vec{V}_{\text{screen}}^* | n' \vec{k}' \rangle_{\text{WSZ}}|^2 \\
& \quad \cdot (n_{j, \vec{q}} + 1) \delta_{\vec{k}'-\vec{k}-\vec{q}+\vec{K}} \delta(E_{n'\vec{k}'} - E_{n\vec{k}} - \hbar\omega(\vec{q}, j)) \left. \right\}. \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Da

$$\begin{aligned}
& \left| \vec{e}(q, j) \langle n\vec{k} | \vec{V}_{\text{screen}} | n' \vec{k}' \rangle_{\text{WSZ}} \right|^2 \\
& = \vec{e}(q, j) \langle n\vec{k} | \vec{V}_{\text{screen}} | n' \vec{k}' \rangle_{\text{WSZ}} \vec{e}^*(q, j) \langle n\vec{k} | \vec{V}_{\text{screen}}^* | n' \vec{k}' \rangle_{\text{WSZ}} \\
& = |\vec{e}^*(q, j) \langle n\vec{k} | \vec{V}_{\text{screen}}^* | n' \vec{k}' \rangle_{\text{WSZ}}|^2 \tag{4.10}
\end{aligned}$$

gilt, läßt sich das Stoßintegral schreiben als

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}} = & \frac{2\pi N}{\hbar} \sum_{\substack{q, j \\ n', \vec{k}'}} |\eta(q, j)|^2 \left\{ [f_{n\vec{k}}(1 - f_{n'\vec{k}'})n_{j, \vec{q}} - f_{n'\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}})(n_{j, \vec{q}} + 1)] \right. \\
& \cdot |\vec{e}(q, j) \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{\text{screen}} | n\vec{k} \rangle_{\text{WSZ}}|^2 \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}+\vec{K}} \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) \\
& \quad + [f_{n\vec{k}}(1 - f_{n'\vec{k}'})n_{j, \vec{q}} + 1 - f_{n'\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}})n_{j, \vec{q}}] \\
& \cdot |\vec{e}^*(q, j) \langle n' \vec{k}' | \vec{V}_{\text{screen}}^* | n\vec{k} \rangle_{\text{WSZ}}|^2 \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{K}} \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} - \hbar\omega(\vec{q}, j)) \left. \right\}. \tag{4.11}
\end{aligned}$$

Sind keine äußeren elektromagnetischen Felder und kein Temperaturgradient vorhanden, so ist die Verteilungsfunktion $f_{n\vec{k}}$ die Fermi–Dirac–Funktion

$$f_0(n\vec{k}) = \frac{1}{e^{\beta(E_{n\vec{k}} - \zeta)} + 1} \quad , \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad . \quad (4.12)$$

ζ ist das chemische Potential. Es folgt das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts⁴

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = 0 \quad . \quad (4.13)$$

Nimmt man an, daß nur die linearen Terme in den Feldern der Boltzmann–Gleichung berücksichtigt werden, d.h. geht man von kleinen Feldern aus, so läßt sich die Boltzmann–Gleichung in eine lineare Integralgleichung umformen. Die Ableitung $\frac{d\vec{k}}{dt}$ ist linear in den Feldern. Damit erhält man für den zweiten Term der Boltzmann–Gleichung (4.6)

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_0(n\vec{k}, \vec{r}, t) \frac{d\vec{k}}{dt} &= \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_0(n\vec{k}) \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dt} \\ &= \left[\frac{e}{\hbar} \vec{E} + \frac{e}{\hbar^2 c} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \times \vec{H} \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \quad , \quad (4.14) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} = -\beta f_0(n\vec{k})(1 - f_0(n\vec{k})) \quad . \quad (4.15)$$

Im dritten Term der Gleichung (4.6), d.h. $\left[\frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \right] \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t)$ sind der Temperaturgradient und die Ortsabhängigkeit des chemischen Potentials entscheidend. Man hat

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t) &= \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{1}{e^{(E_{n\vec{k}} - \zeta(\vec{r}))/k_B T(\vec{r})} + 1} \\ &= - \left[\frac{E_{n\vec{k}} - \zeta}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T + \vec{\nabla}_{\vec{r}} \zeta(\vec{r}) \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \\ &= - \left[\frac{E_{n\vec{k}}}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T + T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \quad . \quad (4.16) \end{aligned}$$

Es folgt

$$\left[\frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \right] \vec{\nabla}_{\vec{r}} f(n\vec{k}, \vec{r}, t) = - \left[\frac{E_{n\vec{k}}}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T + T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \quad . \quad (4.17)$$

⁴Dies gilt nach der Identität

$$\begin{aligned} &\left[f_{n\vec{k}}(1 - f_{n'\vec{k}'})n_{j,\vec{q}} - f_{n'\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}})(n_{j,\vec{q}} + 1) \right] \Big|_{f=f_0} \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) = \\ &= \frac{e^{\beta(E_{n'\vec{k}'} - \zeta)} \left[1 - e^{\beta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j))} \right]}{(e^{\beta(E_{n\vec{k}} - \zeta)} + 1)(e^{\beta(E_{n'\vec{k}'} - \zeta)} + 1)(e^{\beta\hbar\omega(\vec{q}, j)} - 1)} \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) = 0 \quad \text{in Ausdruck (4.11)} \end{aligned}$$

Die Boltzmann–Gleichung (4.6) kann nach (4.14) und (4.17) geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(n\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \left[e\vec{E} + \frac{e}{\hbar^2 c} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \times \vec{H} - \frac{E_{n\vec{k}}}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \\ + \left(\frac{\partial f_{n\vec{k}}}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = 0. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Ohne äußeres Magnetfeld gilt dann

$$\frac{\partial f(n\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \left[e\vec{E} - \frac{E_{n\vec{k}}}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} + \left(\frac{\partial f_{n\vec{k}}}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = 0. \quad (4.19)$$

Im folgenden wird die Verteilungsfunktion in der Form

$$f(n\vec{k}, \vec{r}, t) = f_0(n\vec{k}) - \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \Phi(n\vec{k}) \quad (4.20)$$

dargestellt und die Boltzmann–Gleichung (4.19) nach Φ umgeschrieben. Dafür werden zunächst die Ausdrücke in Gleichung (4.11) vom Typ

$$f_{n\vec{k}}(1 - f_{n'\vec{k}'}) n_{j,\vec{q}} - f_{n'\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}})(n_{j,\vec{q}} + 1) \quad (4.21)$$

für Φ linearisiert dargestellt

$$\begin{aligned} A &= f_{n\vec{k}}(1 - f_{n'\vec{k}'}) n_{j,\vec{q}} - f_{n'\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}})(n_{j,\vec{q}} + 1) \\ &= f_0(n\vec{k}) [1 - f_0(n'\vec{k}')] n_{j,\vec{q}} - f_0(n'\vec{k}') [1 - f_0(n\vec{k})] [n_{j,\vec{q}} + 1] \\ &+ \frac{\partial f_0(n'\vec{k}')}{\partial E_{n'\vec{k}'}} \left[f_0(n\vec{k}) n_{j,\vec{q}} + (1 - f_0(n\vec{k}))(n_{j,\vec{q}} + 1) \right] \Phi(n'\vec{k}') \\ &- \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \left[(1 - f_0(n'\vec{k}')) n_{j,\vec{q}} + f_0(n'\vec{k}') (n_{j,\vec{q}} + 1) \right] \Phi(n\vec{k}). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Mit

$$f_0(n\vec{k}) [1 - f_0(n'\vec{k}')] n_{j,\vec{q}} = f_0(n'\vec{k}') [1 - f_0(n\vec{k})] [n_{j,\vec{q}} + 1] \quad (4.23)$$

wird A zu

$$\begin{aligned} A &= \frac{\partial f_0(n'\vec{k}')}{\partial E_{n'\vec{k}'}} \left[f_0(n\vec{k}) n_{j,\vec{q}} + (1 - f_0(n\vec{k}))(n_{j,\vec{q}} + 1) \right] \Phi(n'\vec{k}') \\ &- \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \left[(1 - f_0(n'\vec{k}')) n_{j,\vec{q}} + f_0(n'\vec{k}') (n_{j,\vec{q}} + 1) \right] \Phi(n\vec{k}). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Ersetzt man in der oberen Zeile dieser Gleichung $n_{j,\vec{q}} + 1$ und in der unteren Zeile $n_{j,\vec{q}}$ durch die äquivalenten Ausdrücke nach (4.23), so erhält man

$$A = \frac{\partial f_0(n'\vec{k}')}{\partial E_{n'\vec{k}'}} \frac{f_0(n\vec{k})}{f_0(n'\vec{k}')} n_{j,\vec{q}} \Phi(n'\vec{k}') - \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \frac{f_0(n'\vec{k}')}{f_0(n\vec{k})} (n_{j,\vec{q}} + 1) \Phi(n\vec{k}). \quad (4.25)$$

Nach dem Einsetzen (4.15) und (4.23) in (4.25) erhält man für A

$$A = -\beta (1 - f_0(n'\vec{k}')) f_0(n\vec{k}) n_{j,\vec{q}} [\Phi(n'\vec{k}') - \Phi(n\vec{k})]. \quad (4.26)$$

Die weiteren Umformungen beziehen sich auf den Ausdruck

$$\begin{aligned} B &= \beta (1 - f_0(n'\vec{k}')) f_0(n\vec{k}) \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) \\ &= \beta (1 - f_0(E_{n\vec{k}} + \hbar\omega(\vec{q}, j))) f_0(n\vec{k}) \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) \\ &\simeq \beta \left(1 - f_0(n\vec{k}) - \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \hbar\omega(\vec{q}, j)\right) f_0(n\vec{k}) \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)) \\ &= \beta (1 - f_0(n\vec{k})) f_0(n\vec{k}) - \hbar\omega(\vec{q}, j) \beta \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} f_0(n\vec{k}). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Nach Gleichung (4.15) hat man

$$B = - \left[1 + \frac{\hbar\omega(\vec{q}, j)}{k_B T} f_0(n\vec{k}) \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \delta(E_{n\vec{k}} - E_{n'\vec{k}'} + \hbar\omega(\vec{q}, j)). \quad (4.28)$$

Da sich die Ableitung der Fermi–Dirac–Funktion fast wie eine δ –Funktion mit negativem Vorzeichen verhält⁵ und daher nur in einem sehr schmalen Bereich um die Fermi–Energie einen Beitrag liefert, kann die obige Gleichung verkürzt geschrieben werden als

$$B = \left[1 + \frac{\hbar\omega(\vec{q}, j)}{2k_B T} \right] \delta(E_F - E_{n\vec{k}}) \delta(E_F - E_{n'\vec{k}'}). \quad (4.29)$$

Setzt man A und B aus (4.26) und (4.29) in Gleichung (4.11) ein, so folgt

⁵Siehe Gleichung (A.50) aus Anhang A.3

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = & -\frac{2\pi N}{\hbar} \sum_{\substack{q,j \\ n',\vec{k}'}} |\eta(q,j)|^2 \delta(E_F - E_{n\vec{k}}) \delta(E_F - E_{n'\vec{k}'}) \left[1 + \frac{\hbar\omega(\vec{q},j)}{2k_B T} \right] n_{j,\vec{q}} \\ & \cdot \left\{ |\vec{e}(q,j) \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{\text{screen}} | n\vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}+\vec{K}} \right. \\ & \left. + |\vec{e}^*(q,j) \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{\text{screen}}^* | n\vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{K}} \right\} \left[\Phi(n'\vec{k}') - \Phi(n\vec{k}) \right]. \end{aligned}$$

Es ist sinnvoll, den obigen Teilausdruck

$$\begin{aligned} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') = & \frac{2\pi N}{\hbar} \sum_{q,j} |\eta(q,j)|^2 \delta(E_F - E_{n\vec{k}}) \delta(E_F - E_{n'\vec{k}'}) \left[1 + \frac{\hbar\omega(\vec{q},j)}{2k_B T} \right] n_{j,\vec{q}} \\ & \cdot \left\{ |\vec{e}(q,j) \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{\text{screen}} | n\vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}+\vec{K}} \right. \\ & \left. + |\vec{e}^*(q,j) \langle n'\vec{k}' | \vec{V}_{\text{screen}}^* | n\vec{k} \rangle_{WSZ}|^2 \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{K}} \right\} \quad (4.30) \end{aligned}$$

separat zu definieren. Eine wichtige Eigenschaft von $V(n\vec{k}, n'\vec{k}')$ ist die Symmetrie in den Indizes

$$V(n\vec{k}, n'\vec{k}') = V(n'\vec{k}', n\vec{k}) \quad . \quad (4.31)$$

Mit dieser Definition erhält der Stoßterm

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = - \sum_{n'\vec{k}'} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') \left[\Phi(n'\vec{k}') - \Phi(n\vec{k}) \right] \quad (4.32)$$

sowie die Boltzmann-Gleichung aus (4.19)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(n\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \left[e\vec{E} - \frac{E_{n\vec{k}}}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \\ = \sum_{n'\vec{k}'} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') \left[\Phi(n'\vec{k}') - \Phi(n\vec{k}) \right] \quad (4.33) \end{aligned}$$

eine einfache Struktur. Sucht man nach einem makroskopischen zeitunabhängigen stationären Zustand, so darf keine explizite Zeitabhängigkeit der Verteilungsfunktion vorliegen. Die Boltzmann-Gleichung wird dadurch zu einer linearen, inhomogenen Fredholmschen Integralgleichung zweiter Art

$$\begin{aligned} \left[e\vec{E} - \frac{E_{n\vec{k}}}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \\ = \sum_{n'\vec{k}'} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') \left[\Phi(n'\vec{k}') - \Phi(n\vec{k}) \right], \quad (4.34) \end{aligned}$$

mit der Inhomogenität

$$\left[e\vec{E} - \frac{E_{n\vec{k}}}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \quad .$$

4.3 Lösung der linearisierten Boltzmann-Gleichung und die Verknüpfung mit der makroskopischen Physik

Die folgenden Überlegungen basieren weitestgehend auf der Arbeit von Bross [27]. Die Boltzmann-Gleichung (4.34) zerfällt aufgrund des Ansatzes

$$\Phi(n\vec{k}) = \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(1)} \left[e\vec{E} - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] - \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(2)} \left[\frac{1}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T \right] \quad (4.35)$$

in zwei unabhängige Gleichungen für $\vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(1,2)}$, nämlich in

$$\sum_{n'\vec{k}'} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') \left[\vec{\chi}_{n'\vec{k}'}^{(1)} - \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(1)} \right] = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \quad (4.36)$$

und

$$\sum_{n'\vec{k}'} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') \left[\vec{\chi}_{n'\vec{k}'}^{(2)} - \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(2)} \right] = \frac{1}{\hbar} E_{n\vec{k}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \quad (4.37)$$

Dies läßt sich über die Gleichung

$$\sum_{n'\vec{k}'} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') \left[\vec{\chi}_{n'\vec{k}'}^{(\nu)} - \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(\nu)} \right] = \frac{1}{\hbar} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \quad (4.38)$$

mit $\nu = 1, 2$ zusammenfassen. Die elektrische Stromdichte

$$\vec{j} = e \sum_{n\vec{k}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} f_{n\vec{k}} \quad (4.39)$$

wird durch die Verteilungsfunktion definiert. Nach (4.20) ergibt sich explizit

$$\vec{j} = e \sum_{n\vec{k}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} f_0(n\vec{k}) - e \sum_{n\vec{k}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \Phi(n\vec{k}) \quad . \quad (4.40)$$

Wegen der Inversionssymmetrie von $E_{n\vec{k}}$ trägt die erste Summe nicht bei. \vec{j} wird zu

$$\vec{j} = -\frac{e}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \Phi(n\vec{k}) \quad . \quad (4.41)$$

Setzt man für $\Phi(n\vec{k})$ die Terme $\chi^{1,2}$ nach Gleichung (4.35) ein, so hat man

$$\vec{j} = -\frac{e}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \left\{ \chi_{n\vec{k}}^{(1)} \left[e \vec{E} - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] - \chi_{n\vec{k}}^{(2)} \left[\frac{1}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T \right] \right\}. \quad (4.42)$$

In diesem Ausdruck ist die Funktion $\partial f_0(n\vec{k})/\partial E_{n\vec{k}}$ entscheidend. Ihre Eigenschaft, siehe (A.50), führt dazu, daß die unmittelbare Umgebung der Fermi-Kante den größten Beitrag zum elektrischen Strom liefert.

Man führt die Tensoren

$$\underline{\underline{K}}_{\nu} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \otimes \chi_{n\vec{k}}^{(\nu)}, \quad (4.43)$$

mit $\nu = 1, 2$ und \otimes als Tensorprodukt ein. Die elektrische Stromdichte kann dann als

$$\vec{j} = \underline{\underline{K}}_1 \left[e^2 \vec{E} - eT \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] - \frac{e}{T} \underline{\underline{K}}_2 \vec{\nabla}_{\vec{r}} T \quad (4.44)$$

geschrieben werden. Die obige Gleichung läßt sich für das elektrische Feld nach

$$\vec{E} = \frac{1}{e} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \zeta(\vec{r}) + \frac{1}{e^2} \underline{\underline{K}}_1^{-1} \vec{j} + \frac{1}{eT} \left[\underline{\underline{K}}_1^{-1} \underline{\underline{K}}_2 - \zeta(\vec{r}) \right] \vec{\nabla}_{\vec{r}} T \quad (4.45)$$

umformen. Die spezifische elektrische Leitfähigkeit ist somit

$$\underline{\underline{\sigma}} = e^2 \underline{\underline{K}}_1. \quad (4.46)$$

Für den Peltier-Koeffizient gilt

$$\underline{\underline{\Pi}} = -\frac{1}{e} \left[\underline{\underline{K}}_1^{-1} \underline{\underline{K}}_2 - \zeta(\vec{r}) \right], \quad (4.47)$$

und für die Thermokraft folgt

$$\underline{\underline{\Theta}} = \frac{1}{T} \underline{\underline{\Pi}}. \quad (4.48)$$

Analog zur elektrischen Stromdichte kann die Wärmeleitstromdichte

$$\begin{aligned} \vec{w} &= \frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} E_{n\vec{k}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} f_{n\vec{k}} \\ &= \sum_{n\vec{k}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} f_0(n\vec{k}) - e \sum_{n\vec{k}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \Phi(n\vec{k}) \\ &= -e \sum_{n\vec{k}} \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \Phi(n\vec{k}) \end{aligned} \quad (4.49)$$

behandelt werden. Nach Einsetzen in die Gleichung (4.35) ergibt sich die Wärmeleitstromdichte

$$\vec{w} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} E_{n\vec{k}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \left\{ \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(1)} \left[e\vec{E} - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] - \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(2)} \left[\frac{1}{T} \vec{\nabla}_{\vec{r}} T \right] \right\}. \quad (4.50)$$

Führt man die Abkürzungen

$$\underline{\underline{K}}_{\nu} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} E_{n\vec{k}} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \otimes \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(\nu-2)} \quad (4.51)$$

ein, mit $\nu = 3, 4$, so ist

$$\underline{\underline{K}}_3 = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} [E_{n\vec{k}} - \zeta] \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \otimes \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(1)} + \zeta \underline{\underline{K}}_1 \quad (4.52)$$

$$\underline{\underline{K}}_4 = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} [E_{n\vec{k}} - \zeta] \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \otimes \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(2)} + \zeta \underline{\underline{K}}_2, \quad (4.53)$$

oder in der Kurzform für $\nu = 3, 4$

$$\underline{\underline{K}}_{\nu} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} [E_{n\vec{k}} - \zeta] \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \otimes \vec{\chi}_{n\vec{k}}^{(\nu-2)} + \zeta \underline{\underline{K}}_{\nu-2}. \quad (4.54)$$

Da $-\partial f_0(n\vec{k})/\partial E_{n\vec{k}}$ nach (A.50) in die δ -Funktion bei $T=0$ übergeht, verschwindet die Summe über $n\vec{k}$ in $\underline{\underline{K}}_{\nu}$ bei $T=0$. Die Wärmeleitstromdichte kann dann als

$$\vec{w} = \underline{\underline{K}}_3 \left[e\vec{E} - T \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{\zeta(\vec{r})}{T} \right] - \frac{1}{T} \underline{\underline{K}}_4 \vec{\nabla}_{\vec{r}} T \quad (4.55)$$

geschrieben werden. Ersetzt man \vec{E} nach Gleichung (4.45), so hat der obige Ausdruck die Gestalt

$$\vec{w} = \frac{1}{e} \underline{\underline{K}}_3 \underline{\underline{K}}_1^{-1} \vec{j} + \frac{1}{T} \left[\underline{\underline{K}}_3 \underline{\underline{K}}_1^{-1} \underline{\underline{K}}_2 - \underline{\underline{K}}_4 \right] \vec{\nabla}_{\vec{r}} T. \quad (4.56)$$

Die spezifische Wärmeleitfähigkeit ist

$$\mathcal{K} = \frac{1}{T} \left[\underline{\underline{K}}_3 \underline{\underline{K}}_1^{-1} \underline{\underline{K}}_2 - \underline{\underline{K}}_4 \right]. \quad (4.57)$$

4.4 Die Enskogsche Lösungsmethode für die linearisierte Boltzmann-Gleichung

Die Lösungsmethoden auf der Grundlage des Variationsprinzips werden häufig zur Lösung von Integralgleichungen herangezogen. Dabei wird nach einem Funktional gesucht, dessen Extremalwerte mit den Lösungen der Integralgleichung übereinstimmen. Die Extremalwerte können exakt oder näherungsweise (z.B. nach der Ritzschen Methode) berechnet werden. Der größte Vorteil derartiger Methoden ist die numerische Stabilität und hohe Genauigkeit.

Der Kohlersche Linearoperator wird hier zunächst⁶ für einen beliebig integrierbaren Funktionensatz $\xi_{n\vec{k}}$ eingeführt

$$\widehat{L}[\xi_{n\vec{k}}] = \sum_{n'\vec{k}'} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') (\xi_{n\vec{k}} - \xi_{n'\vec{k}'}) \quad . \quad (4.58)$$

$V(n\vec{k}, n'\vec{k}')$ ist dabei in den Indizes symmetrisch, d.h. $V(n\vec{k}, n'\vec{k}') = V(n'\vec{k}', n\vec{k})$. Man definiert das Skalarprodukt

$$\begin{aligned} \sum_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}} \widehat{L}[\xi_{n\vec{k}}] &= \sum_{\substack{n\vec{k} \\ n'\vec{k}'}} \psi_{n\vec{k}} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') (\xi_{n\vec{k}} - \xi_{n'\vec{k}'}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\vec{k} \\ n'\vec{k}'}} (\psi_{n\vec{k}} - \psi_{n'\vec{k}'}) V(n\vec{k}, n'\vec{k}') (\xi_{n\vec{k}} - \xi_{n'\vec{k}'}), \end{aligned} \quad (4.59)$$

mit den Eigenschaften

$$\sum_{n\vec{k}} \psi_{n\vec{k}} \widehat{L}[\xi_{n\vec{k}}] = \sum_{n\vec{k}} \xi_{n\vec{k}} \widehat{L}[\psi_{n\vec{k}}] \quad (4.60)$$

$$\sum_{n\vec{k}} \xi_{n\vec{k}} \widehat{L}[\xi_{n\vec{k}}] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\vec{k} \\ n'\vec{k}'}} V(n\vec{k}, n'\vec{k}') (\xi_{n\vec{k}} - \xi_{n'\vec{k}'})^2 \geq 0. \quad (4.61)$$

Die Boltzmann-Gleichung ergibt sich nach den Gleichungen (4.36)–(4.38) zu

$$\widehat{L}[\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)}] = \frac{1}{\hbar} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial k_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}}, \quad (4.62)$$

siehe [39]. Dabei ist $\nu = 1, 2$ und $i = 1, 2, 3$. Für ein festes i betrachten wir eine

⁶Für weitere Details siehe [56] oder [25]

weitere Funktion $Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}$, die folgende Nebenbedingungen

$$\sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} = 0 \quad (\text{Erhaltung der Teilchenzahl}), \quad (4.63)$$

$$\sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} E_{n\vec{k}} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} = 0 \quad (\text{Erhaltung der Gesamtenergie}), \quad (4.64)$$

$$\sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \hat{L}[Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] = \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \hat{L}[\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)}] = \frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \quad (\text{Enskogsche Zusatzbedingungen}) \quad (4.65)$$

erfüllt. Wird die Eigenschaft des Skalarprodukts aus Gleichung (4.61) für die Funktion $(\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)} - Y_{n\vec{k}}^{(\nu)})$ ausgeschrieben und die Enskogsche Zusatzbedingung aus Gleichung (4.65) eingesetzt, so erhält man das Enskogsche Maximumprinzip

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sum_{n\vec{k}} [\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)} - Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] \hat{L}[\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)} - Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] \\ &= \sum_{n\vec{k}} \chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)} \hat{L}[\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)}] - 2 \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \hat{L}[\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)}] + \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \hat{L}[Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] \\ &= \sum_{n\vec{k}} \chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)} \hat{L}[\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)}] - \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \hat{L}[Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] \quad . \end{aligned} \quad (4.66)$$

In Kurzform lautet es

$$\sum_{n\vec{k}} \chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)} \hat{L}[\chi_{n\vec{k}i}^{(\nu)}] - \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \hat{L}[Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] \geq 0 \quad . \quad (4.67)$$

Die linearisierte Boltzmann–Gleichung kann damit auf ein Extremalwert–Problem eines Variationsprinzips für das Funktional

$$\sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \hat{L}[Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] \quad , \quad (4.68)$$

mit der Nebenbedingung (4.65), abgebildet werden. Die Diagonalelemente der Tensoren $\underline{\underline{K}}_{1,ii}$ und $\underline{\underline{K}}_{4,ii}$ werden dann durch das Funktional aus Gleichung (4.68) ausgedrückt

$$\underline{\underline{K}}_{1,ii} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} = -\sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(1)} \hat{L}[Y_{n\vec{k}}^{(1)}] \quad (4.69)$$

$$\underline{\underline{K}}_{4,ii} = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(2)} E_{n\vec{k}} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial \vec{k}_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} = -\sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(2)} \hat{L}[Y_{n\vec{k}}^{(2)}] \quad , \quad (4.70)$$

d.h. durch Größen, welche extremal gemacht werden. Dies erhöht die Berechnungsgenauigkeit für die Diagonalelemente und in gleicher Weise jene der spezifischen elektrischen Leitfähigkeit im Vergleich zur Wärmeleitfähigkeit und zur Thermokraft.

Die Extremalforderung mit der Nebenbedingung (4.65) kann geschrieben werden als

$$\delta \left\{ \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \widehat{L} [Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] + \lambda' \left[\sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \widehat{L} [Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] - \frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial k_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \right] \right\} = 0, \quad (4.71)$$

wobei λ' der Lagrangesche Faktor ist. Mit

$$\lambda = \frac{\lambda'}{1 + \lambda'} \quad (4.72)$$

wird die Extremalforderung zu

$$\delta \left\{ \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} \widehat{L} [Y_{n\vec{k}}^{(\nu)}] - \lambda \frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial k_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \right\} = 0 \quad (4.73)$$

Die Lösung von Gleichung (4.73) zusammen mit Gleichung (4.65) kann mittels des Ritzschen Ansatzes

$$Y_{n\vec{k}}^{(\nu)} = \sum_{\tau} \alpha_{\tau} \varphi_{n\vec{k}}^{\tau} \quad (4.74)$$

gefunden werden. $\varphi_{n\vec{k}}^{\tau}$ $\tau = 1, 2, \dots$ ist ein vollständiger inversionssymmetrischer Funktionensatz, d.h.

$$\varphi_{n\vec{k}}^{\tau} = \varphi_{n-\vec{k}}^{\tau} \quad (4.75)$$

Dadurch werden die Nebenbedingungen (4.63) und (4.64) identisch erfüllt. Weiter sind α_{τ} die gesuchten Ansatzkoeffizienten. Damit ergibt sich für (4.73)

$$\delta \left\{ \sum_{\tau\tau'} \alpha_{\tau} \alpha_{\tau'} \sum_{n\vec{k}} \varphi_{n\vec{k}}^{(\tau)} \widehat{L} [\varphi_{n\vec{k}}^{(\tau')}] - \lambda \sum_{\tau} \alpha_{\tau} \frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} \varphi_{n\vec{k}}^{(\tau)} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial k_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \right\} = 0 \quad (4.76)$$

Dies ist äquivalent zu

$$\sum_{\tau'} 2\alpha_{\tau'} \sum_{n\vec{k}} \varphi_{n\vec{k}}^{(\tau')} \widehat{L} [\varphi_{n\vec{k}}^{(\tau')}] = \lambda \frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} \varphi_{n\vec{k}}^{(\tau)} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial k_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} \quad (4.77)$$

Für die Nebenbedingung aus (4.65) hat man

$$\sum_{\tau\tau'} \alpha_\tau \alpha_{\tau'} \sum_{n\vec{k}} \varphi_{n\vec{k}}^{(\tau)} \widehat{L}[\varphi_{n\vec{k}}^{(\tau')}] = \sum_{\tau} \alpha_\tau \frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} \varphi_{n\vec{k}}^{(\tau)} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial k_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} . \quad (4.78)$$

Multipliziert man die Gleichung (4.77) mit α_τ und summiert über τ , so erhält man die Nebenbedingung (4.78), wenn $\lambda = 2$ ist. Daraus folgt der endgültige Ausdruck für die Extremalbedingung

$$\sum_{\tau'} \alpha_{\tau'} \sum_{n\vec{k}} \varphi_{n\vec{k}}^{(\tau)} \widehat{L}[\varphi_{n\vec{k}}^{(\tau')}] = \frac{1}{\hbar} \sum_{n\vec{k}} \varphi_{n\vec{k}}^{(\tau)} E_{n\vec{k}}^{(\nu-1)} \frac{\partial E_{n\vec{k}}}{\partial k_i} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} . \quad (4.79)$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem, welches die Ritzschen Entwicklungskoeffizienten α_τ liefert.

Die Symmetrie-Eigenschaft (1.39) erlaubt es auch bei der Lösung der Boltzmann-Gleichung, \vec{k} nur aus dem irreduziblen Keil und \vec{k}' aus der ganzen ersten Brillouin-Zone mitzunehmen.

Der in dieser Arbeit verwendete Ansatz und die Ergebnisse der Berechnung des spezifischen elektrischen Widerstandes bzw. der spezifischen Leitfähigkeit werden im nächsten Kapitel vorgestellt.

Kapitel 5

Diskussion der Ergebnisse

5.1 Übersicht über die experimentellen Daten

In den vorangegangenen Berechnungen wurde angenommen, daß das Metallgitter absolut rein und von idealer periodischer Struktur ist. Derartige Anforderungen sind im Experiment nur näherungsweise bei Messungen an hochreinen metallischen, vornehmlich einkristallinen Proben erfüllt.

Hochreine Einkristalle werden in erster Linie im Labor gezüchtet, da sie sehr selten in der Natur zu finden sind. Die Messungen zum spezifischen elektrischen Widerstand nach Grüneisen sind allerdings an natürlich gewachsenen Einkristallen vorgenommen [44].

Das Züchten von hochreinen Kupfer-Kristallen im Labor wird in mehreren Schritten durchgeführt. Als Ausgangsmaterial dient das chemisch hochreine Kupfer. Dieses wird in speziellen Graphit-gefütterten Quarz-Behältern mehrfach geätzt (z.B. in HNO_3) und anschließend im Vakuum bei einem Druck $p < 10^{-5}$ Torr in Quarz-Schmelzöfen mehrere Stunden (ca. 15 h) stark erhitzt (auf ca. 1273 K) und langsam abgekühlt [43].

Die Qualität der Probe wird durch das Restwiderstandsverhältnis RRR (Residual Resistant Ratio)

$$RRR = \frac{\rho(300K)}{\rho(4.2K)} \quad (5.1)$$

charakterisiert. Mit dem obigen Verfahren kann man Kupferproben mit RRR bis zur Größenordnung von 60000 herstellen [85].

Die Meßverfahren von sehr kleinen Widerständen und sehr niedrigen Temperaturen sind zudem äußerst komplex [66, 86]. Die Anzahl der Daten hochwertiger Messungen ist gering, obwohl Kupfer sehr gut erforscht ist und an verschiedensten Kupfer-Proben zahlreiche Messungen durchgeführt wurden. In den drei folgenden Tabellen sind die Daten hochwertiger Messungen zusammengefaßt.

In der ersten Tabelle 5.1 ist der spezifische elektrische Widerstand von Kupfer

über den Bereich bis zum Schmelzpunkt von Kupfer (1357.6 K) dargestellt. Die Zahl x vor N ist der Reinheitsgrad der Probe.¹ Bei der besten Messung von Dugdale aus dieser Tabelle liegt offenbar bei 14.558 K eine große Meßunsicherheit des spezifischen elektrischen Widerstandes vor.

In der zweiten Tabelle 5.2 sind die häufig zitierten Werte von Matula aus [73] präsentiert. Sie gründen sich auf einer Analyse von zweihundertneundsechzig Veröffentlichungen über die Messungen des spezifischen elektrischen Widerstandes von Kupfer. Die hochwertige Messung von Dugdale ist allerdings in der Arbeit von Matula nicht berücksichtigt. Zudem ist bei den Daten unter 50 K eine Ungenauigkeit hinsichtlich der richtigen Verunreinigungsbehandlung zu vermuten. In der dritten Tabelle 5.3 sind die Daten von Rumbo aus [86] für hochreine Kupfer-Einkristalle zusammengestellt. Die graphische Darstellung dazu findet sich in den Abbildungen 5.1–5.6.

Tabelle 5.1: *Spezifischer elektr. Widerstand von Kupfer bis zum Schmelzpunkt*

T in K , ρ in $\mu\Omega\text{cm}$							
Dugdale (1965)		Moore (1967)		Laubitz (1967)		Roeser (1941)	
6N,RRR=3400		5N+,RRR=900		5N+,RRR=900		x,RRR sind unbekannt	
T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ
4.200	0.00050	4.2	0.001718	300	1.723	77	0.1825
14.558	0.00016	85	0.248	400	2.396	173	0.8689
23.278	0.00157	90	0.282	500	3.077	273	1.560
30.972	0.00638	100	0.350	600	3.769	373	2.232
36.680	0.01380	110	0.418	700	4.479	473	2.905
43.162	0.02744	120	0.488	800	5.211	573	3.586
49.032	0.04516	130	0.558	900	5.971	673	4.285
57.528	0.08050	140	0.631	1000	6.764	773	5.008
66.449	0.12628	150	0.702	1100	7.594	873	5.764
73.680	0.16937	175	0.876	1200	8.469	973	6.564
84.921	0.24208	200	1.047	1250	8.923	1073	7.413
98.169	0.33307	225	1.219			1173	8.321
110.620	0.42132	250	1.389			1273	9.298
117.178	0.46746	273.16	1.546				
133.033	0.58023	275	1.556				
152.720	0.7191	300	1.725				
175.550	0.8784	325	1.893				
188.174	0.9687	350	2.062				
208.061	1.1017	375	2.229				
250.187	1.3865						
297.855	1.7055						

¹ xN bezeichnet den Reinheitsgrad von $99.\overbrace{9\dots9}^{x\text{-Mal}}\%$. + nach N bedeutet, daß die Zahl nach der letzten 9 des Reinheitsgrades größer als 5 ist.

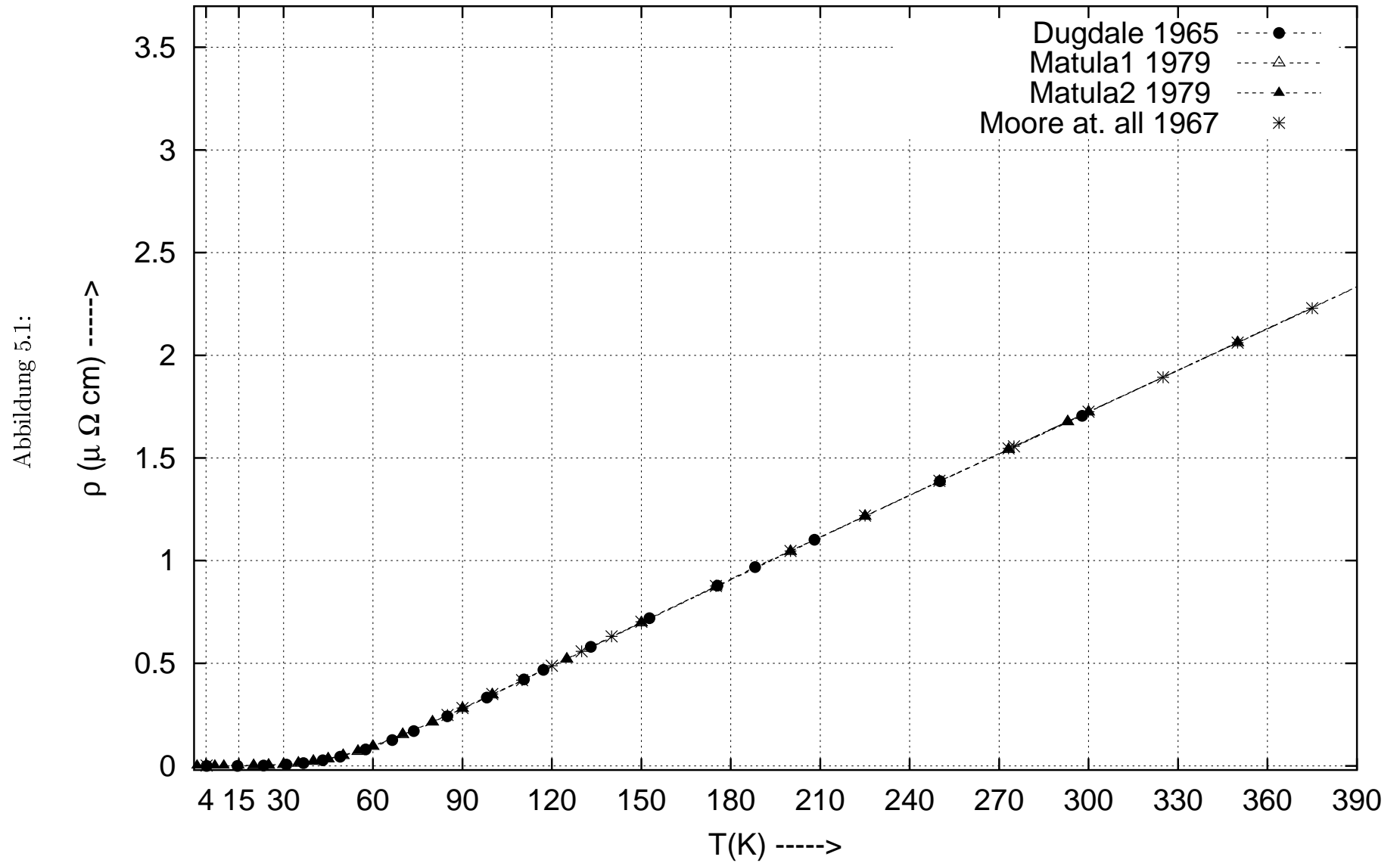
Tabelle 5.2: Spezifischer elektr. Widerstand von Kupfer bis zum Schmelzpunkt

Analyse von Matula (1979)		
T in K , ρ in $\mu\Omega cm$		
	Matula 1 ($\rho_0 = 0.000$)	Matula 2 ($\rho_0 = 0.002$)
T	ρ	ρ
1		0.00200
4		0.00200
7		0.00200
10		0.00200
15		0.00202
20	0.000798	0.00280
25	0.00249	0.00449
30	0.00628	0.00828
35	0.0127	0.0147
40	0.0219	0.0239
45	0.0338	0.0358
50	0.0498	0.0518
55	0.0707	0.0727
60	0.0951	0.0971
70	0.152	0.154
80	0.213	0.215
90	0.279	0.281
100	0.346	0.348
125	0.520	0.522
150	0.697	0.699
175	0.872	0.874
200	1.044	1.046
225	1.215	1.217
250	1.385	1.387
273.15	1.541	1.543
293	1.676	1.678
300	1.723	1.725
350	2.061	2.063
400	2.400	2.402
500	3.088	3.090
600	3.790	3.792
700	4.512	4.514
800	5.260	5.262
900	6.039	6.041
1000	6.856	6.858
1100	7.715	7.717
1200	8.624	8.626
1300	9.590	9.592
1357.6	10.169	10.171

Tabelle 5.3: Spezifischer elektr. Widerstand von Kupfer unter 8.5 K

Rumbo (1975)					
T in K , ρ in $10^{-12}\Omega m=10^{-4}\mu\Omega cm$					
Cu1		Cu3		Cu4	
6N,RRR=13690		6N,RRR=8810		6N,RRR=7380	
T	ρ	T	ρ	T	ρ
0.000	1.131555	0.000	1.7591	0.000	2.1010
1.183	1.132	1.160	1.7596	1.173	2.1010
1.201	1.133	1.430	1.7597	1.194	2.1012
1.379	1.132	1.978	1.7605	1.406	2.1010
1.804	1.132	2.203	1.7611	1.653	2.1013
2.085	1.133	2.302	1.7613	1.936	2.1015
2.381	1.135	2.561	1.7621	2.220	2.1020
2.590	1.133	2.833	1.7630	2.470	2.1028
2.922	1.136	2.866	1.7630	2.798	2.1026
3.300	1.137	3.082	1.7638	3.034	2.1037
3.606	1.140	3.274	1.7649	3.312	2.1065
4.007	1.142	3.520	1.7660	3.748	2.1080
4.361	1.147	3.810	1.7676	4.105	2.1103
4.591	1.149	4.028	1.7690	4.512	2.1148
4.862	1.151	4.358	1.7719	4.716	2.1171
5.170	1.156	4.607	1.7743	5.210	2.1232
5.520	1.162	4.814	1.7763	5.480	2.1271
5.752	1.167	5.133	1.7804	5.776	2.1319
5.909	1.170	5.356	1.7837	6.069	2.1371
6.158	1.176	5.588	1.7876	6.265	2.1409
6.429	1.184	5.793	1.7911	6.614	2.1488
6.737	1.193	6.014	1.7955	6.930	2.1525
6.984	1.198	6.270	1.8010	7.272	2.1610
7.218	1.205	6.467	1.8059	7.647	2.1752
7.418	1.212	6.729	1.8129	7.838	2.1820
7.664	1.225	6.980	1.8220	8.099	2.1923
7.872	1.232	7.280	1.8305	8.324	2.2035
8.087	1.243	7.451	1.8365	8.496	2.2133
8.314	1.254	7.728	1.8471		
8.504	1.261	8.003	1.8626		
		8.251	1.8748		
		8.457	1.8840		

Experimentell gemessener Spezifischer elektrischer Widerstand von Kupfer



Experimentell gemessener Spezifischer elektrischer Widerstand von Kupfer

Abbildung 5.2:

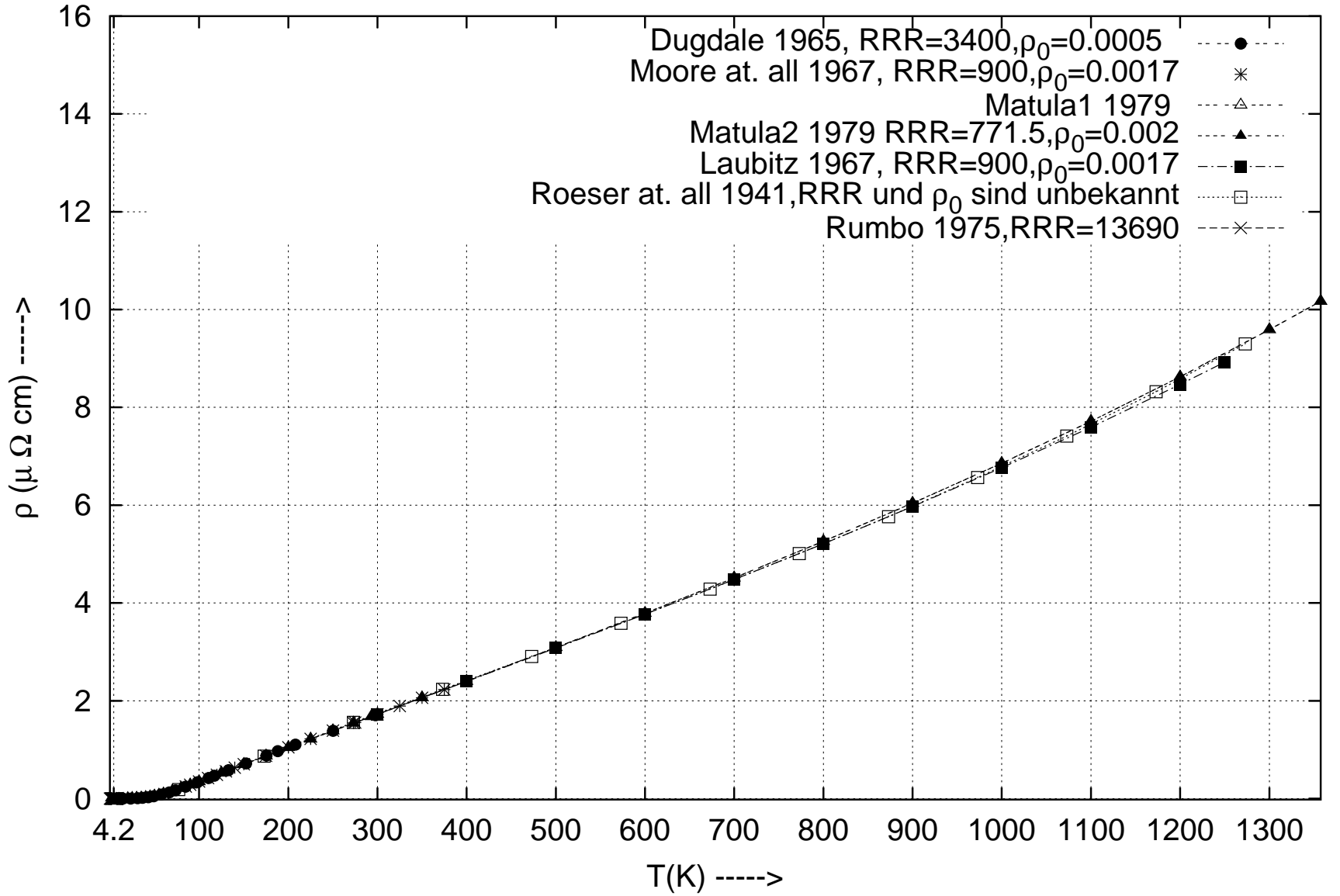
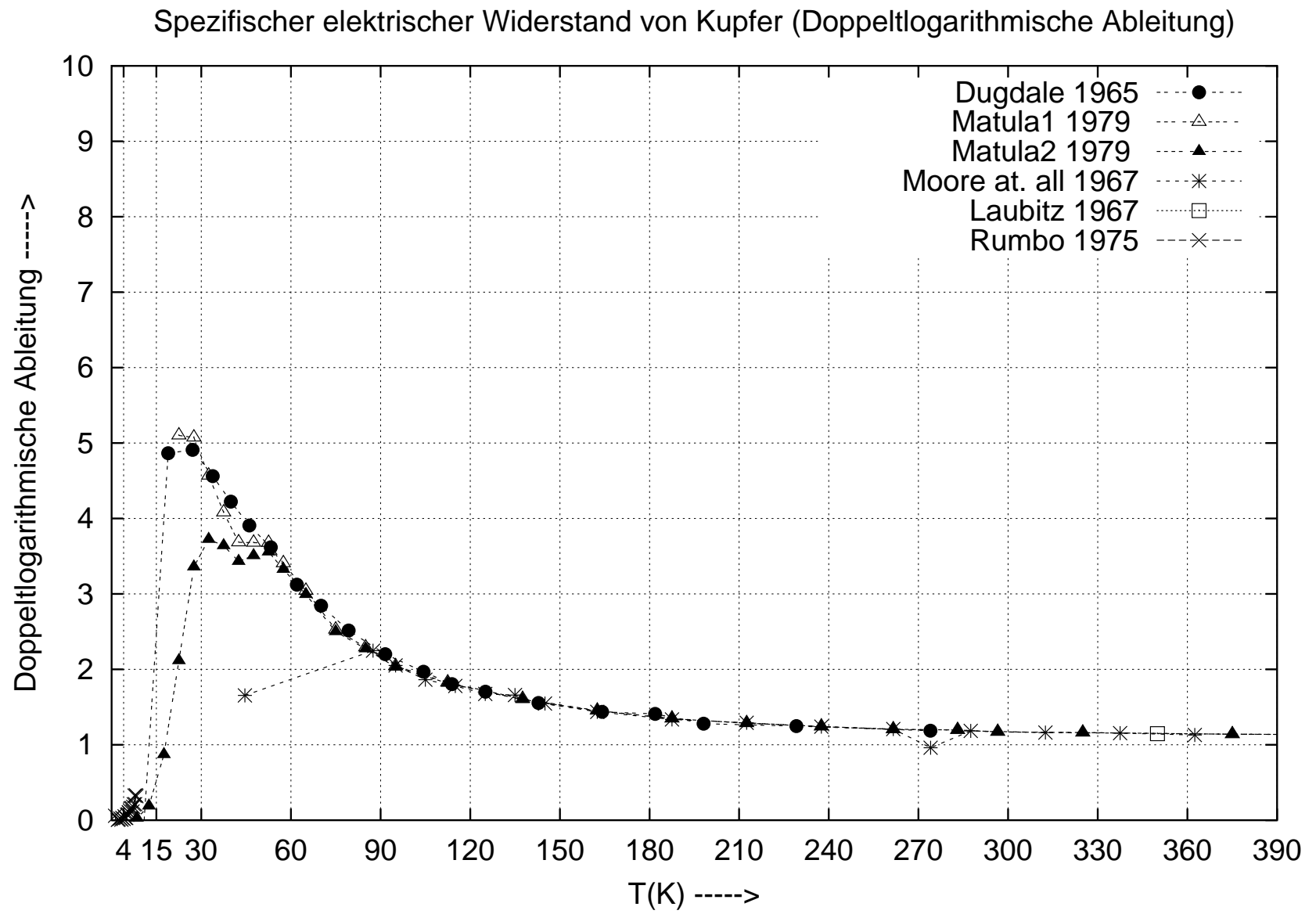


Abbildung 5.3:



Spezifischer elektrischer Widerstand von Kupfer (Doppeltlogarithmische Ableitung)

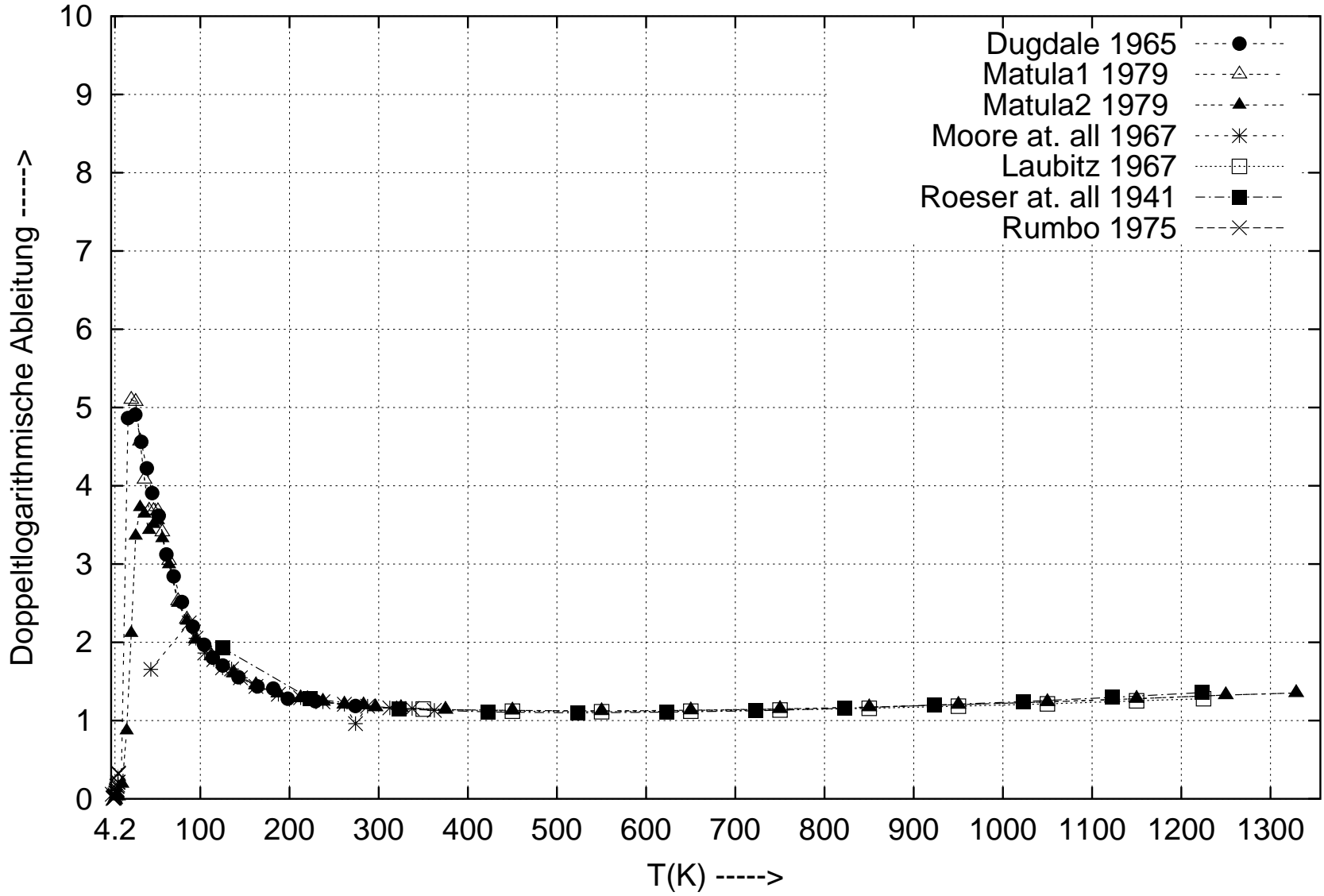
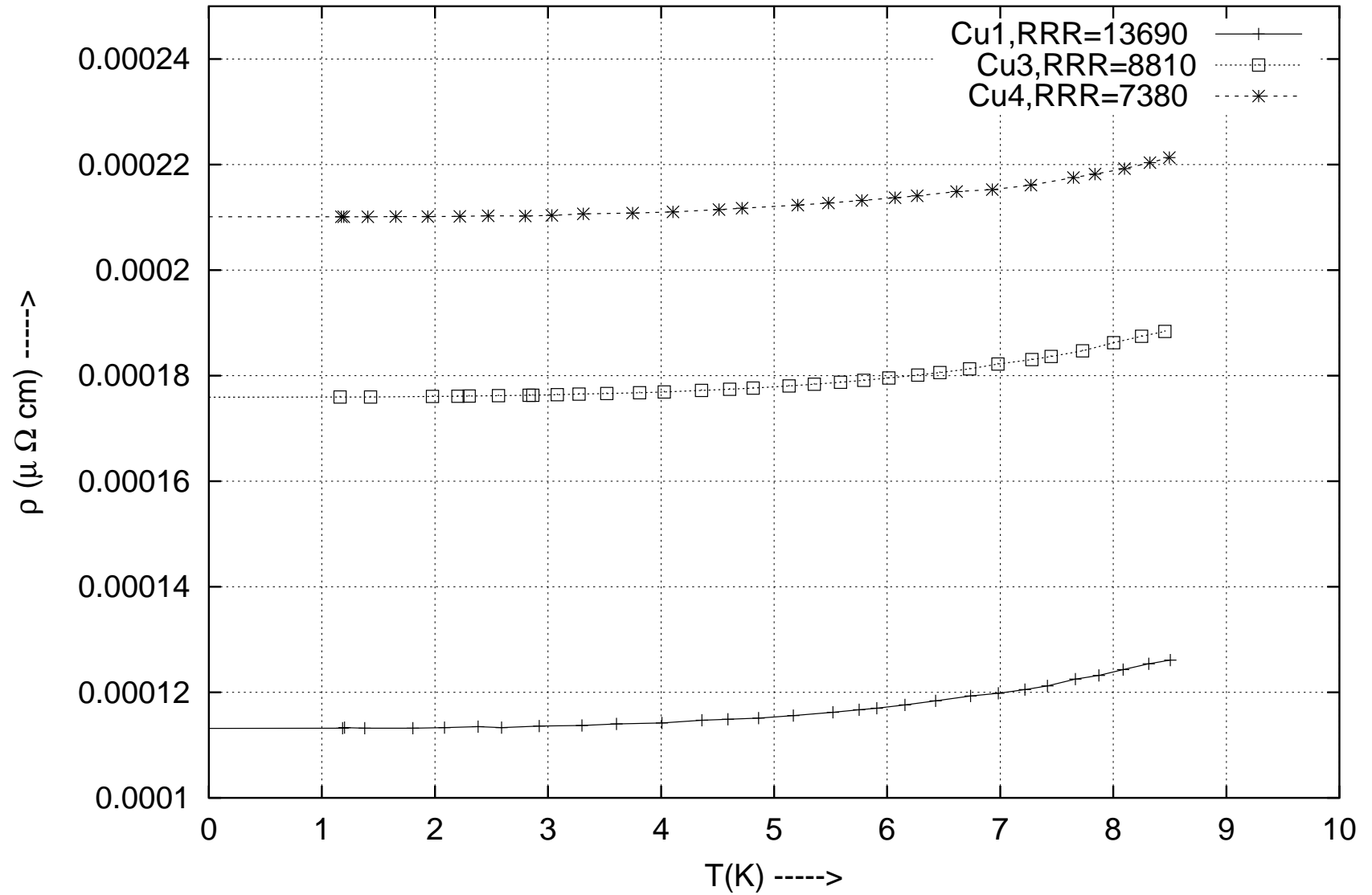


Abbildung 5.4:

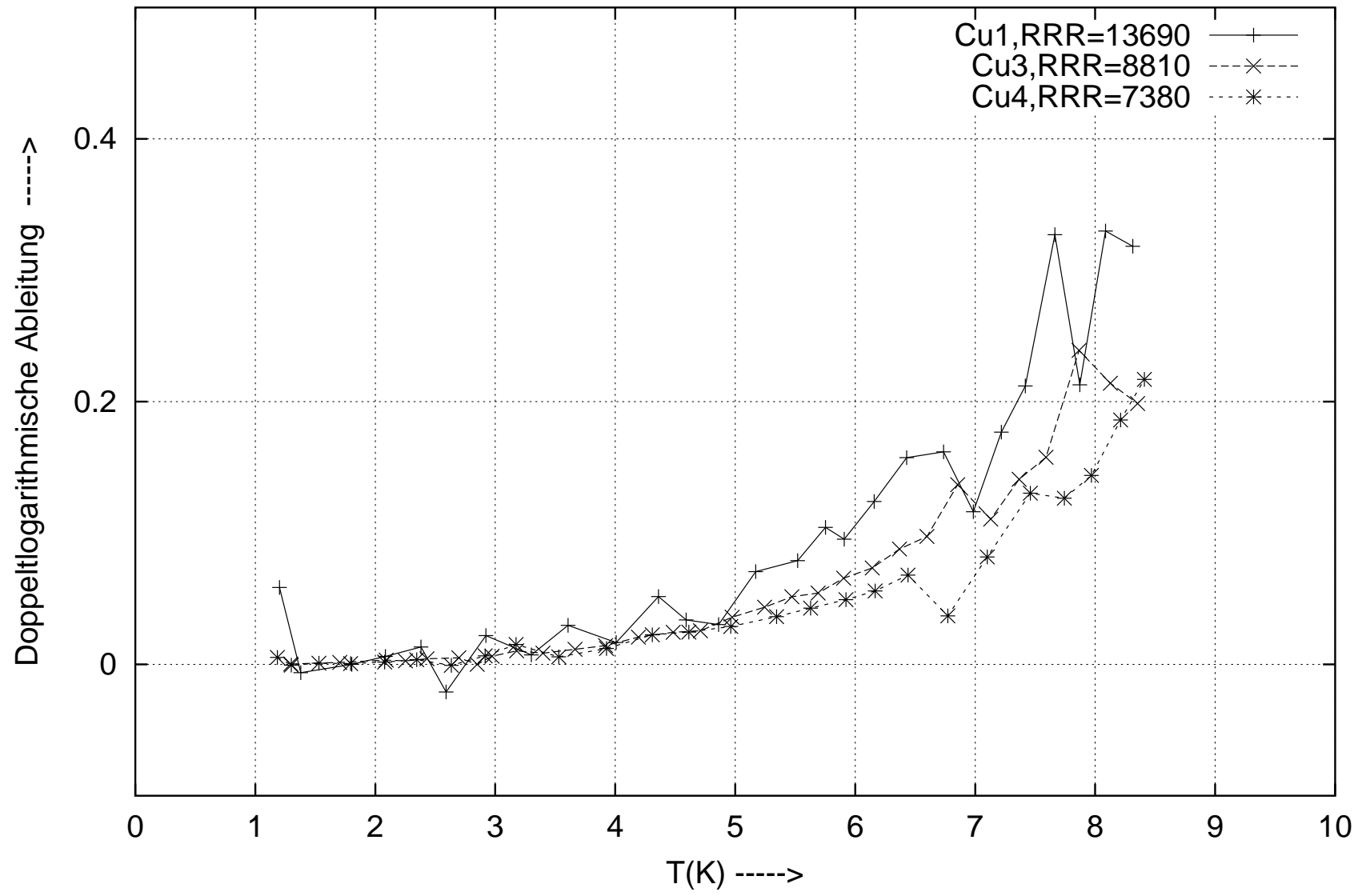
Spezifischer el. Widerstand von hochreinem monokristallinem Kupfer nach Rumbo(1975)

Abbildung 5.5:



Doppeltlogarithmische Ableitung des spez. el. Widerstands von Kupfer nach Rumbo(1975)

Abbildung 5.6:



In den Abbildungen 5.7 – 5.9 sind die Tieftemperaturmessungen an einzelnen Kupfer-Proben von Rumbo zusammen mit den Fit-Kurven vom Typ

$$\rho_{Fit}(T) = \rho_{Fit}^0 + \rho_\nu T^\nu \equiv \rho_{Fit}^0 + \rho_{Fit}^\nu(T) \quad (5.2)$$

dargestellt. Die Fit-Kurven werden nach der Methode der kleinsten Quadrate in zwei Schritten bestimmt. Zunächst werden die Koeffizienten ρ_{Fit}^0 und ρ_ν bei einem festen Wert von ν aus den Experimentaldaten berechnet, so daß

$$\sigma_0(\rho_{Fit}^0, \rho_{Fit}^\nu) = \sum_{i=1}^{N_{Me\beta}} (\rho_{Fit}(T_i) - \rho_i^{Exp}(T_i))^2 \quad (5.3)$$

minimal wird. Dabei ist $N_{Me\beta}$ die Anzahl der Meßpunkte, $\rho_i^{Exp}(T_i)$ der gemessene elektrische spezifische Widerstand bei der Temperatur T_i . Im zweiten Schritt wird der optimale Wert von ν

$$\sigma_\nu = \min_{\nu} \sigma_0(\rho_{Fit}^0, \rho_{Fit}^\nu) \quad (5.4)$$

gesucht. Abbildung 5.10 gibt den Wert von

$$\sigma = \frac{\sigma_0(\rho_{Fit}^0, \rho_{Fit}^\nu)}{N_{Me\beta} \sum_{i=1}^{N_{Me\beta}} \rho_i^{Exp}(T_i)} \quad (5.5)$$

an. Der Ausdruck im Nenner ist konstant. Er bringt die entsprechenden mathematischen Größen in einen Maßstab. Abbildung 5.10 zeigt die Minima bei 3.370 (Cu1), 3.690 (Cu3) und 3.395 (Cu4). Die geeigneten Fitkurven in $\mu\Omega\text{ cm}$ lauten also

$$\begin{aligned} \rho_{Fit}(T) &= 1.132 \cdot 10^{-4} + 9.584 \cdot 10^{-9} \cdot T^{3.370} & (\text{Cu1}), \\ \rho_{Fit}(T) &= 1.760 \cdot 10^{-4} + 4.680 \cdot 10^{-9} \cdot T^{3.690} & (\text{Cu3}), \\ \rho_{Fit}(T) &= 2.101 \cdot 10^{-4} + 7.592 \cdot 10^{-9} \cdot T^{3.395} & (\text{Cu4}). \end{aligned}$$

Anhand der Fitkurven wird deutlich, wie stark der temperaturabhängige Anteil des spezifischen elektrischen Widerstandes von der Beschaffenheit der Kupfer-Proben abhängt. Zudem ist die Verletzung der Matthiessenschen Regel erkennbar.² Die doppeltlogarithmische Ableitung von $\rho_{Fit}(T)$ in der Form (5.2) kann dargestellt werden als

$$\frac{d \ln(\rho_{Fit}(T))}{d \ln T} = \nu \frac{\rho_\nu T^\nu}{\rho_{Fit}^0 + \rho_\nu T^\nu} = \nu \frac{1}{1 + \frac{\rho_{Fit}^0}{\rho_{Fit}^\nu(T)}}. \quad (5.6)$$

Für eine nahezu ideale Probe muß $\rho_{Fit}^0 \ll \rho_{Fit}^\nu(T)$ gelten. In dem Fall ist

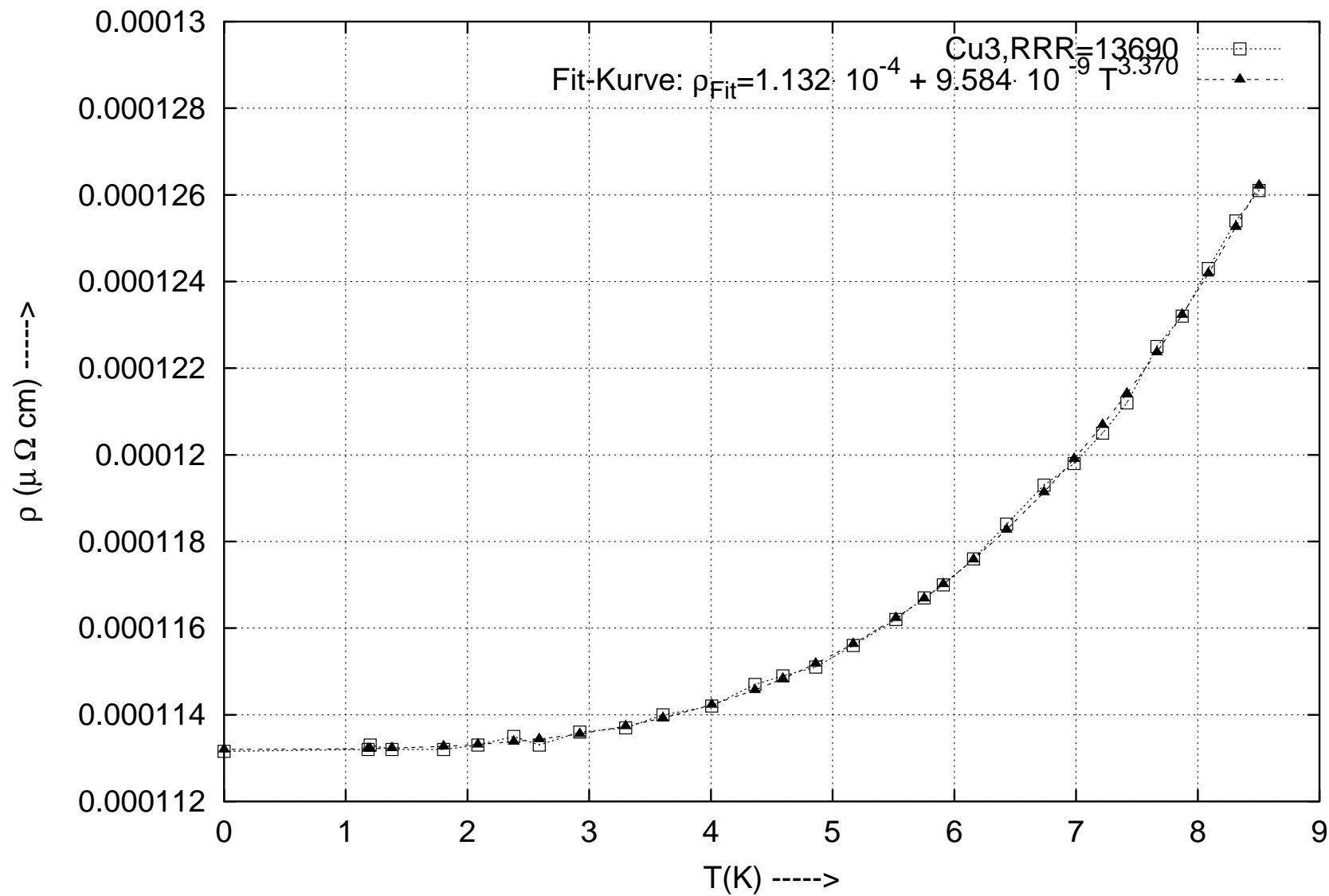
$$\frac{d \ln(\rho_{Fit}(T))}{d \ln T} = \nu. \quad (5.7)$$

Aus diesem Grund ist die Untersuchung der doppeltlogarithmischen Ableitung des spezifischen elektrischen Widerstandes einer hochreinen Probe von Interesse.

²Die Regel besagt, daß der gesamte elektrische Widerstand $\rho(T)$ als Summe des temperaturabhängigen Restwiderstandes ρ_0 und des temperaturabhängigen Widerstandes $\rho_{elph}(T)$, der durch die Elektron-Phonon-Streuung erzeugt wird, geschrieben werden kann $\rho(T) = \rho_0 + \rho_{elph}(T)$.

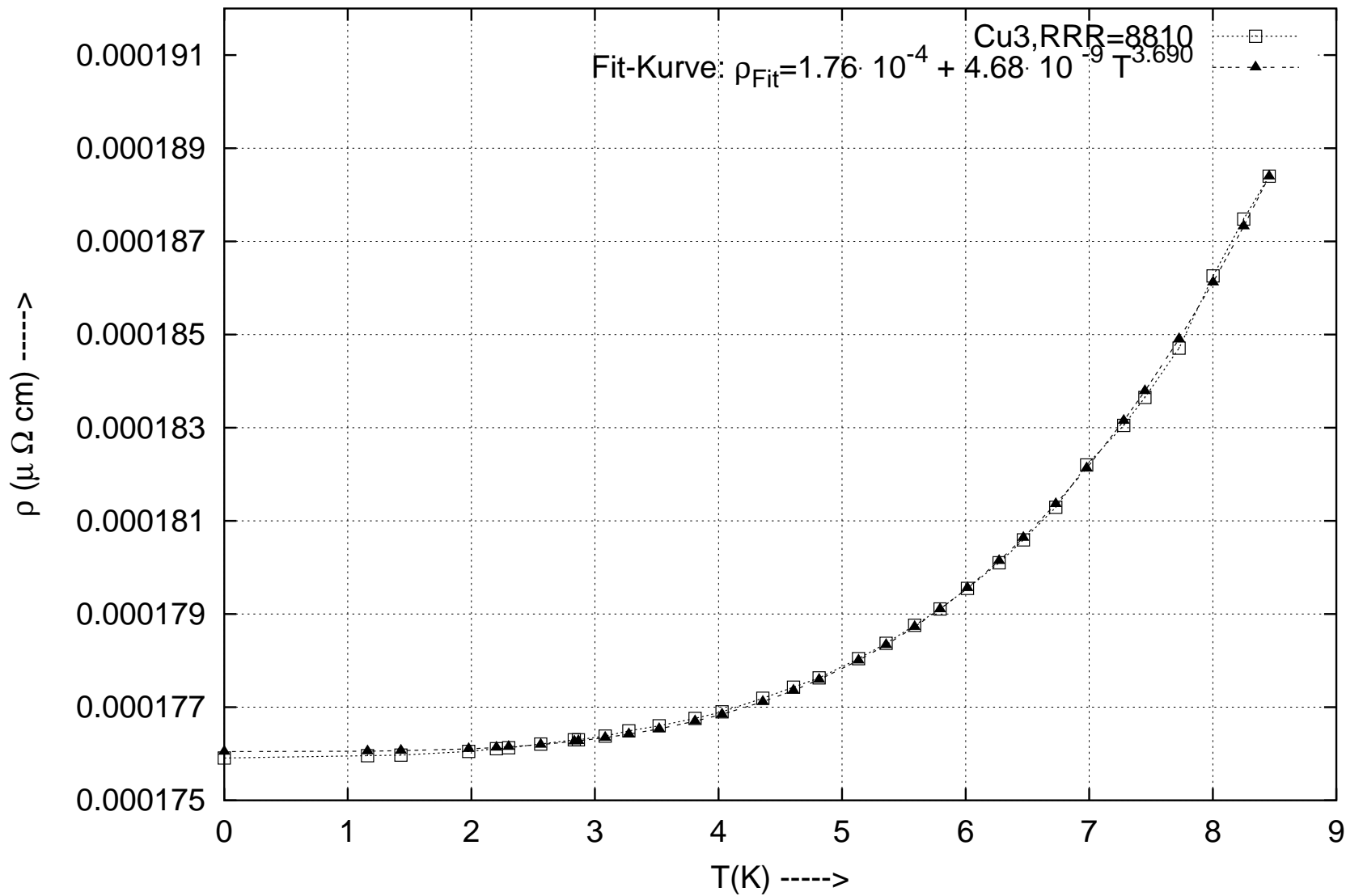
Spezifischer el. Widerstand von hochreinem monokristallinem Kupfer nach Rumbo(Cu1)

Abbildung 5.7:



Spezifischer el. Widerstand von hochreinem monokristallinem Kupfer nach Rumbo(Cu3)

Abbildung 5.8:



Spezifischer el. Widerstand von hochreinem monokristallinem Kupfer nach Rumbo(Cu4)

Abbildung 5.9:

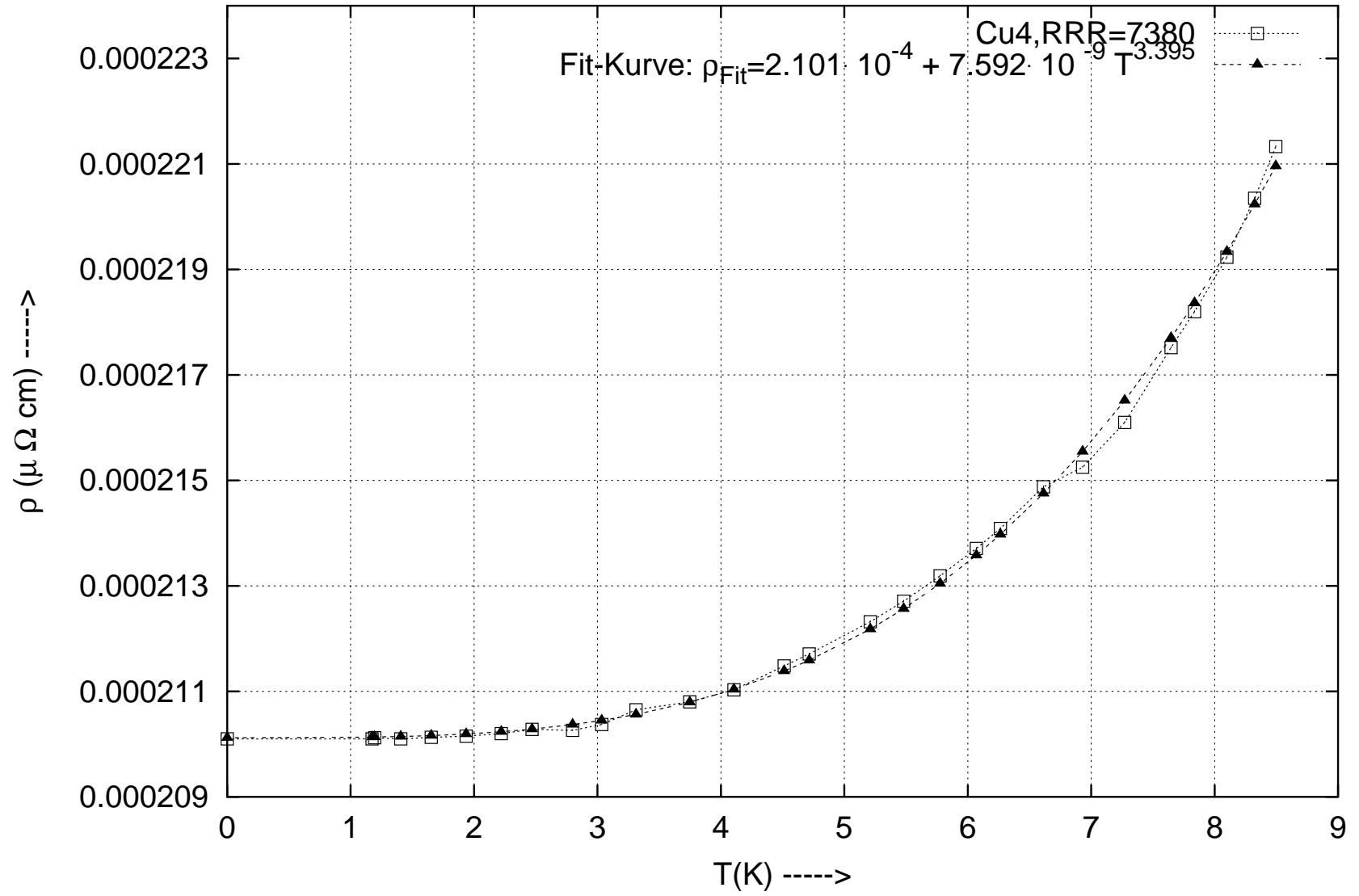
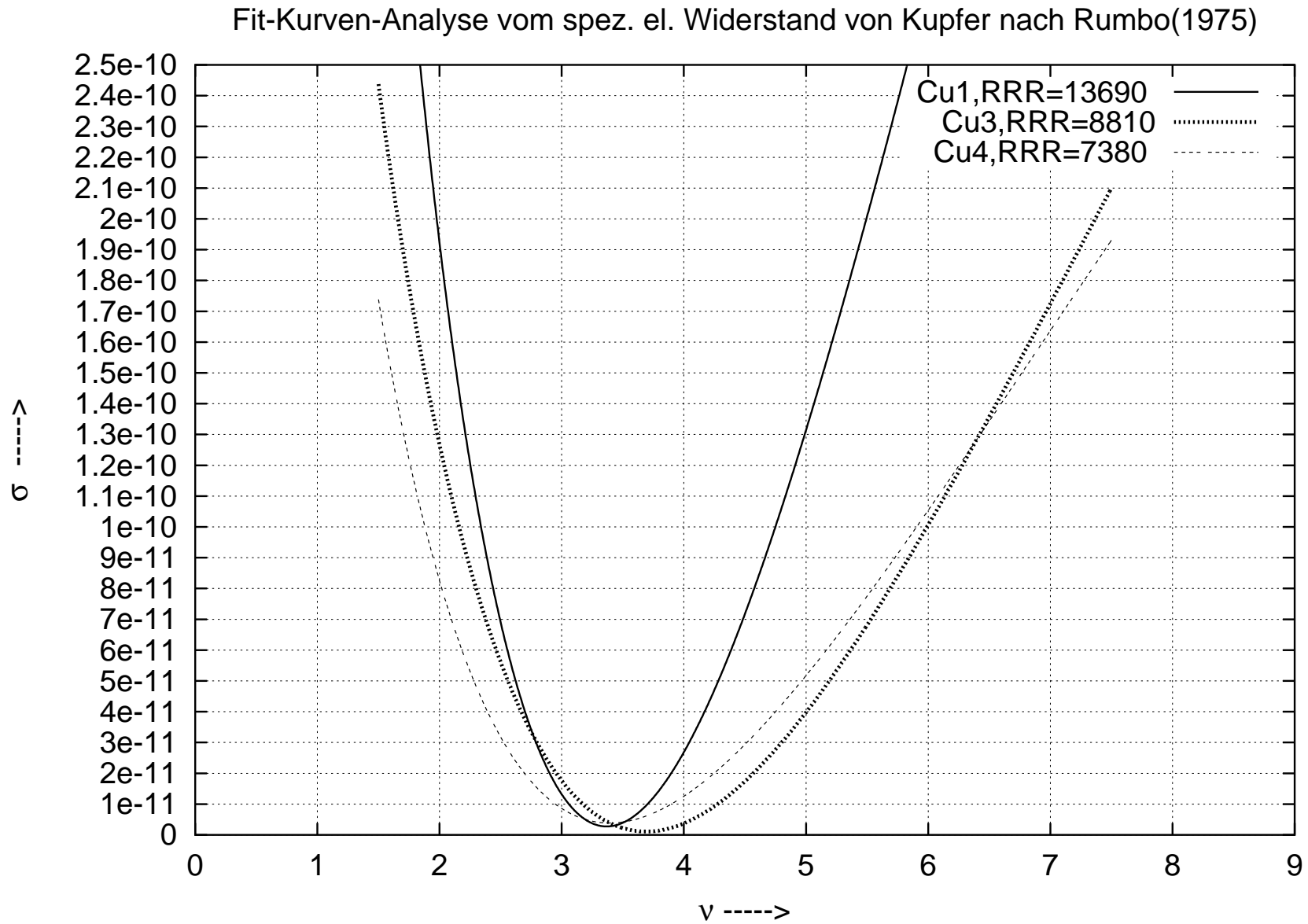


Abbildung 5.10:



Die graphische Darstellung des spezifischen elektrischen Widerstandes von hochreinem Kupfer bei extrem tiefen Temperaturen aus [53] sind der Vollständigkeit wegen in 5.11 zu finden. Die kleinen Kreise sind hier die Meßpunkte, die schwarzen Linien die von Khosnevisan gefitteten Kurven der Form (5.2). Explizit ist

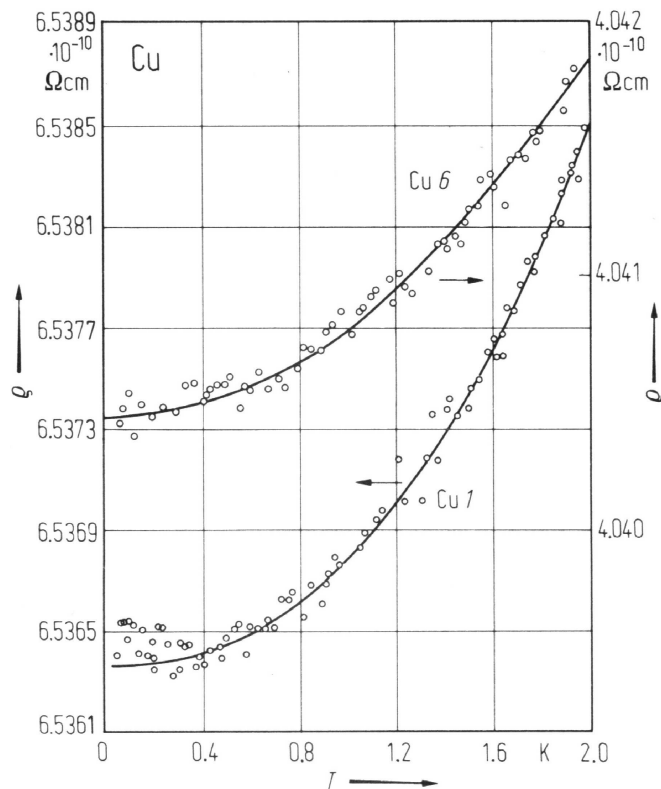
$$\rho_{Fit}(T) = 6.53902 \cdot 10^{-4} + 5.10 \cdot 10^{-9} \cdot T^{3.93} \quad (\text{Cu1}) \quad \text{und}$$

$$\rho_{Fit}(T) = 4.04212 \cdot 10^{-4} + 3.00 \cdot 10^{-9} \cdot T^{3.994} \quad (\text{Cu6}), \quad \text{wobei}$$

$$\rho_{Fit}(T) \text{ in } \mu\Omega \text{ cm angegeben wird.}$$

Die Daten sind mit einer großen Unsicherheit behaftet. Die beiden Kurven verlaufen nicht parallel zueinander. Dies ist ein Hinweis auf die Verletzung der Matthiessenschen Regel. Nach [95] führen die anisotropen Streumechanismen zur Verletzung der Matthiessenschen Regel. Damit folgt, daß die Streumechanismen, die für den elektrischen Widerstand verantwortlich sind, nicht isotrop sind. Auch die Streuung an den statischen Gitterbaufehlern kann neben der in dieser Arbeit im Detail beschriebenen Elektron-Phonon-Wechselwirkung anisotrope Anteile enthalten.

Abbildung 5.11: Tieftemperaturmessungen nach Khosnevisan



Trotz der zahlreichen, veröffentlichten Messungen des spezifischen elektrischen Widerstandes von Kupfer gibt es keine Messung an einem sehr reinen ($RRR > 10000$) Kupfer-Einkristall in kleinen Temperatur-Schritten im Bereich oberhalb von Null Kelvin bis zu einigen hundert Kelvin.

5.2 Übersicht über die theoretischen Arbeiten

Die erste konsistente theoretische Beschreibung des elektrischen Widerstandes im Rahmen der Quantenmechanik wurde von Bloch in seiner Doktorarbeit im Jahr 1928 [17]³ und im einem Artikel von 1929 [18] vorgenommen. Sie beruht auf der Annahme, daß die Elektronen im Modell des homogenen Elektronengases und die Gitterschwingungen durch die Debyesche Näherung beschrieben werden. Somit kann die Boltzmann-Gleichung in der Relaxationszeitnäherung gelöst werden. Das wesentliche Ergebnis dieser Arbeit ist die Temperaturabhängigkeit des spezifischen elektrischen Widerstandes infolge der Elektronen-Streuung an den Gitterschwingungen: Bei sehr tiefen Temperaturen ergibt sich das T^5 -Verhalten und bei höheren Temperaturen der Übergang zum linearen Verhalten.

Peierls erkannte 1930, daß die Übergänge in benachbarte Brillouin-Zonen, die sogenannten Umklapp-Prozesse, eine Abweichung von dem Bloch-Verhalten bei tiefen Temperaturen zeigen und eine Anisotropie der Übergangswahrscheinlichkeiten auch für das homogene Elektronengas erzeugen [79]. Das T^4 -Tieftemperaturgesetz wurde über einige fehlerhafte Näherungen formuliert, die Peierls 1932 in einer Veröffentlichung korrigierte [80]. Dabei postulierte er, daß das Tieftemperaturverhalten des spezifischen elektrischen Widerstandes eher dem Blochschen T^5 - als dem T^4 -Gesetz folgt, und entfachte damit die Diskussion über das Problem der Wirkung von Umklapp-Prozessen.

Erst Bardeen berechnete 1937 den absoluten Wert des spezifischen elektrischen Widerstandes [12]. Seine Rechnung basiert im wesentlichen auf den Annahmen von Bloch. Er konnte jedoch die Matrixelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung mit Hilfe eines selbstkonsistenten Hartree-Verfahren für das Elektronengas bestimmen. Zudem berechnete er über ein Streuwinkelintegral die Relaxationszeit und gab unter Modellannahmen für die Umklapp-Prozesse den Streuquerschnitt der Elektron-Phonon-Streuung an. Für einen speziellen Grenzfall der Rechnung von Bardeen ergibt sich die Blochsche Theorie. Der relative Fehler, den die Bardeen-Theorie im Vergleich mit dem Experiment liefert, liegt für Kupfer im Bereich von ca. 28%. Ziman verfeinerte die Berechnungen von Bardeen [92] und reduzierte den relativen Fehler auf ca. 20%.

Die Wirkung der Umklapp-Prozesse auf die Transporteigenschaften im allgemeinen und auf den spezifischen elektrischen Widerstand im speziellen wurde bis in die siebziger Jahre diskutiert und um den geeigneten Lösungsansatz des Problems heftig gerungen. An dieser Stelle sind vor allem die Arbeiten in chronologischer Reihenfolge von [92, 7, 29, 81, 8, 19] zu erwähnen.

Durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung wird auch die Gleichgewichtsverteilung von Phononen gestört. Hierfür hat sich der Begriff „*phonon drag*“ ein-

³Die Veröffentlichung der Doktorarbeit in der Zeitschrift für Physik kam 1929

gebürgert,⁴ der vor allem in der Halbleiterphysik ausführlich untersucht wurde. Die Auswirkung des Effekts und die Möglichkeit, diesen bei den Berechnungen der Transporteigenschaften zu berücksichtigen, wurden in den vierziger, fünfziger und sechziger Jahren des letzten Jahrhunderts in den Arbeiten von [46, 47, 49, 6, 36, 8, 9, 10, 93, 94, 88, 27] ausgiebig untersucht.

Seit Ende der vierziger Jahre werden die modernen Festkörper-Theorien entwickelt. Vor allem seien hier die Entwicklung der Gitterdynamik und jene der verschiedenen Verfahren zur Berechnung der Bandstruktur genannt.

Die Gitterdynamik ermöglicht es, anhand der experimentell⁵ bestimmten mechanischen Kopplungskonstanten zwischen den Gitterbausteinen das Schwingungsspektrum und die Polarisationsvektoren der Phononen zu bestimmen. Ihre Verknüpfung mit den Elektronenzuständen führt bereits in der Näherung des homogenen Elektronengases zur Anisotropie der Übergangswahrscheinlichkeiten. Dies hat einen starken Einfluß auf die Transporteigenschaften der Metalle im ganzen und die des Kupfers im partiellen. Der Einfluß wurde in den Arbeiten von Bross, siehe [27] und [29], ausführlich untersucht.

In den Arbeiten von Bailyn [7]-[11] wurde die Transporttheorie aufbauend auf dem Modell des homogenen Elektronengases konsequent diskutiert. Bailyn analysierte in [11] u.a die Auswirkungen von Austausch- und Korrelationseffekten auf die Elektron-Phonon-Streuung. Die Austauscheffekte sind nach der Hartree-Fock-Methode, die Korrelationseffekte im Rahmen der sogenannten *rigid correlation hole approximation* berechnet. Bailyn stellte fest, daß trotz größter Sorgfalt und Berücksichtigung fast aller denkbaren Effekte, die Übereinstimmung mit dem Experiment nicht immer gegeben ist. In der 1960 erschienenen Arbeit [9] ist der spezifische elektrische Widerstand für die monovalenten s-Metalle berechnet. Die Ergebnisse stimmen gut mit dem Experiment bei Kalium und Natrium überein. Der relative Fehler für den theoretisch berechneten spezifischen elektrischen Widerstand von Lithium, Rubidium und Cesium lag c.a um einen Faktor 2 bis 4.7 zu niedrig. Es zeigten sich die Schwächen des Modells des homogenen Elektronengases in bezug auf die Elektron-Phonon-Wechselwirkung und die Transportphänomene.

Einen besseren Zugang zu den elektronischen Eigenschaften der Festkörper ermöglichen die modernen Verfahren zur Berechnung der Bandstruktur⁶. Sie liefern sowohl Einteilchenwellenfunktionen als auch Einteilchenenergien. Für die Transporttheorie ist die genaue Kenntnis der Geometrie des Fermi-Körpers entscheidend. Die Darstellungen der Elektronen-Einteilchenfunktionen sowie die Berechnung der Matrixelemente aus diesen sind allerdings kompliziert. Es gibt daher nur wenige Arbeiten, in denen die Transporteigenschaften der Metalle ausgehend von

⁴Dies ist auch unter dem Namen „Peierlsches Ungleichgewichtsproblem der Phononen“ in der Literatur zu finden.

⁵durch die Röntgenstrahlung bzw. thermische Neutronenstreuung

⁶Ein schneller Überblick über die einfachen Bandstrukturberechnungsverfahren findet sich in [42] und [51].

Berechnungsverfahren der Bandstruktur behandelt werden. Diese Verfahren sind zur Zeit der einzige Zugang, um die Anisotropie der Elektron–Phonon–Streuung präzise zu beschreiben. In diesem Zusammenhang ist die Arbeit von Borchì [19] zu erwähnen, in der mit Hilfe der *orthogonal plane waves*–Methode (OPW) [51] die Wirkung der komplexen Struktur der Fermi–Oberfläche auf den spezifischen elektrischen Widerstand bei tiefen Temperaturen untersucht wurde. Anhand eines ab initio Pseudopotentials von Harrison und Moriarty [75] wurden die Matrixelemente der Elektron–Phonon–Wechselwirkung berechnet. Die OPW–Methode lieferte die Störung der zunächst als sphärisch angenommenen Fermi–Fläche. Zudem wurde zur Berechnung der Frequenzen und Polarisationsvektoren von Phononen sowie zur korrekten Behandlung der Umklapp–Prozesse die Gitterdynamik herangezogen. Der letzte aufwendige Versuch, die Elektron–Phonon–Wechselwirkung und die Transporttheorie anhand realistischer Bandstrukturberechnungen in realen Metallen zu beschreiben, sind die Arbeiten [4, 84, 52, 16]. Die Lösungsmethode der Boltzmann–Gleichung mit Hilfe eines Variationsprinzips wurde in [4, 84] formuliert und eine Lösung von Beaulac angegeben [16]. Die notwendigen Kopplungen der Elektron–Phonon–Streuung stammen dabei aus der Arbeit [52].

In den genannten Veröffentlichungen wurden die KKR–Wellenfunktionen verwendet, um die Matrixelemente und Einteilchenenergien zu ermitteln. Abschirmungseffekte wurden dabei allerdings nicht behandelt.

In den weiteren Jahren wurden die Matrixelemente der Elektron–Phonon–Wechselwirkung über Bandstrukturverfahren bestimmt. Die Matrixelemente wurden dann jedoch nicht für die Transporttheorie genutzt. Zu erwähnen ist hier die Arbeit von Gutdeutsch [48], in der die Matrixelemente der Elektron–Phonon–Wechselwirkung in Aluminium ausgehend von dem MAPW–Verfahren berechnet wurden. Zudem wurde die Gitterdynamik verwendet; die Austausch–Korrelationseffekte wurden in der LDA–Näherung berücksichtigt.

Ein völlig anderer Zugang zum Verständnis der Transportphänomene findet sich bei Kubo [59]: Unter Verzicht auf die halbklassische Transporttheorie nach Boltzmann wird die Antwort der Leitungselektronen auf die äußeren Felder quantenmechanisch angegeben.

Die wichtigsten Ergebnisse für Kupfer und eine Zusammenfassung der Annahmen sind in den Tabellen 5.4–5.5 zu finden.

Abbildung 5.12: Fermi-Fläche von fcc-Kupfer

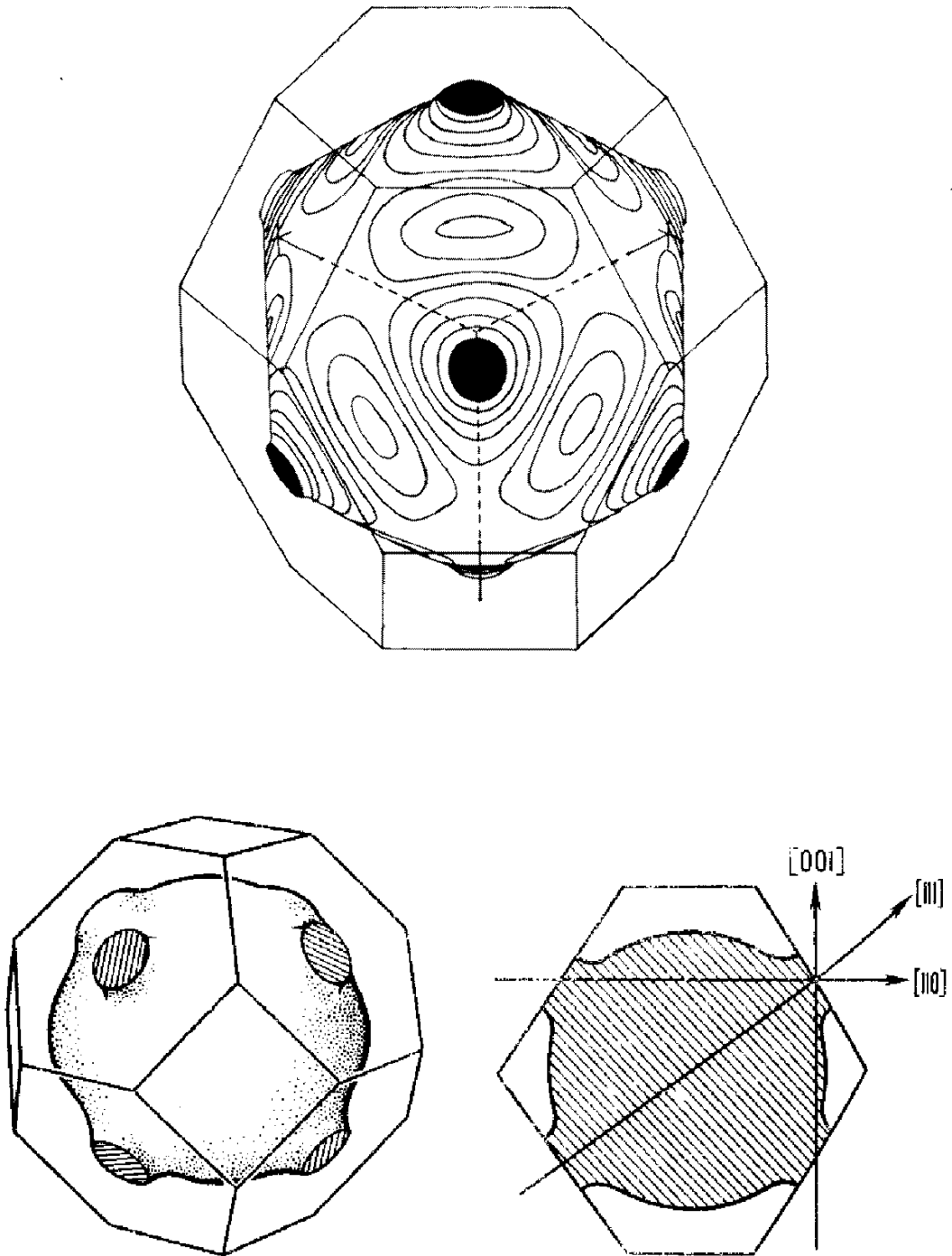


Tabelle 5.4: Theoretische Berechnungen des spezifischen elektrischen Widerstandes von Kupfer

Autor	Jahr	Wichtige Annahmen	T(K)	$\epsilon(\%)^a$
Bloch	1928 1929	Elektronengas, Debye–Theorie der elastischen Wellen, thermisches Gleichgewicht von elastischen Wellen, Energie des Elektronengases ist nur von $ \vec{k} $ abhängig, keine Umklapp–Prozesse. Es wird nur der relative Widerstand bestimmt.	Beliebig	s.B. ^b
Bardeen	1937	Energie des Elektronengases ist nur von $ \vec{k} $, Übergangswahrscheinlichkeiten sind nur von $ \vec{q} $ abhängig, die WSZ ist durch die Kugel des gleichen Volumens ersetzt, Fermi–Fläche wird als Sphäre angenommen, Umklapp–Prozesse sind durch die Überschreitung des Streuwinkels vom Grenzwert $2\arcsin(2^{-2/3}) \simeq 78.1^\circ$ definiert, Bestimmung der Matrixelemente durch das Hartree–Verfahren, die Relaxationszeit wird als Integral berechnet. Der Streuquerschnitt definiert die Bethe–Sommerfeldsche Wechselwirkungskonstante und zusammen mit der Relaxationszeit den spezifischen elektrischen Widerstand.	Beliebig	28
Ziman	1954	Energie des Elektronengases ist nur von $ \vec{k} $, Übergangswahrscheinlichkeiten sind nur von $ \vec{q} $ abhängig, die WSZ ist durch die Kugel des gleichen Volumens ersetzt, Fermi–Fläche wird als Sphäre angenommen, Umklapp–Prozesse sind durch die Überschreitung des Streuwinkels vom Grenzwert $2\arcsin(2^{-2/3}) \simeq 78.1^\circ$ definiert. Für die Umklapp–Prozesse wird die Debye–Näherung der Phononen–Frequenzen herangezogen. Keine Veränderung der Phononen–Zustandsfunktion. Es wird sowohl der Bardeensche Streuquerschnitt als auch ein vereinfachter Streuquerschnitt mit einem Abschneidekriterium zur Berechnung des Stoßintegrals verwendet, der spezifische elektrische Widerstand ist im Rahmen des Kohlerschen Variationsprinzips mit dem Ansatz von Sondheimer gelöst.	Beliebig	20

^aTypischer relativer Fehler^bSiehe Abbildung 5.18

Autor	Jahr	Wichtige Annahmen	T(K)	ϵ (%)
Bross	1958	Die verwendeten Teilübergangswahrscheinlichkeiten entstammen der Bardeenschen Theorie und sind nur von $ \vec{q} $ abhängig. Dispersionsrelationen für Phononen werden anhand der Gitterdynamik mit den experimentell bestimmten mechanischen Kopplungskonstanten berechnet. Damit wird die Anisotropie in die Übergänge eingeführt. Die vollständigen Wahrscheinlichkeiten hängen von \vec{k} und \vec{k}' ab. Die explizite Kristallsymmetrie ist berücksichtigt. Die Lösung wird im Rahmen des Kohlerschen Variationsfehreffahrens mit dem Sondheimer-ähnlichen Ansatz gewonnen.	20.4 77.4 273.15	21
Borchi et al.	1975	Es werden Pseudopotentiale von Moriarty zur Berechnung von Wellenfunktionen und Matrixelementen verwendet. Die Teilmatrixelemente sind anisotrop, d.h. \vec{k} und \vec{k}' abhängig. Die nicht sphärische Form der Fermi-Oberfläche wird durch die OPW-Korrekturen berücksichtigt. Es wird die Gitterdynamik zur Berechnung der Phononen-Polarisation und die Dispersionsrelation sowie ein aus dem Variationsverfahren gewonnener verallgemeinerter Ausdruck für den spezifischen elektrischen Widerstand, die sogenannte LOVA-Näherung verwendet.	0-15	s.g ^a
Beaulac et al.	1982	Die Matrixelemente werden über KKR-Wellenfunktionen und -Energien bestimmt. Gitterdynamik wird zur Berechnung der Phononen-Polarisation und Dispersionsrelation verwendet. Es wird sowohl die LOVA-Näherung als auch ein echtes Variationsverfahren mit der Lösungsmethode von Allen und Beaulac zur Bestimmung des spezifischen elektrischen Widerstandes angewandt. Die Anisotropie der Übergangswahrscheinlichkeiten ist für die damalige Zeit so präzise wie möglich berücksichtigt.	0-282	s.B.

^asehr groß

Tabelle 5.5: Theoretische Berechnungen des spez. elektr. Widerstands von Kupfer

Bloch		Borchi		Beulac	
T(K)	$\rho(\mu\Omega cm)$	T(K)	$\rho(\mu\Omega cm)$	T(K)	$\rho(\mu\Omega cm)$
6.66	0.000003250820	1	$0.132 \cdot 10^{-9}$	26.9231	0.0035
33.3	0.0095015491351	2	$0.821 \cdot 10^{-8}$	30.7692	0.0070
66.6	0.1313144338405	3	$0.837 \cdot 10^{-7}$	34.6154	0.0113
99.9	0.3500069710245	4	$0.408 \cdot 10^{-6}$	38.4615	0.0183
133.2	0.5882438867250	5	$0.134 \cdot 10^{-5}$	42.3077	0.0271
166.5	0.823892170717	6	$0.344 \cdot 10^{-5}$	46.1538	0.0369
199.8	1.0537236422865	7	$0.749 \cdot 10^{-5}$	50.0000	0.0499
233.1	1.2783849769140	8	$0.144 \cdot 10^{-4}$	53.8462	0.0644
266.4	1.4990102924105	9	$0.256 \cdot 10^{-4}$	57.6923	0.0816
273.06	1.5427403561237	10	$0.423 \cdot 10^{-4}$	61.5385	0.1003
299.7	1.7165651274149	11	$0.662 \cdot 10^{-4}$	65.3846	0.1196
333.0	1.9317777996194	12	$0.991 \cdot 10^{-4}$	69.2308	0.1407
366.3	2.145182820630	13	$0.143 \cdot 10^{-3}$	73.0769	0.1629
399.6	2.3571726240169	14	$0.200 \cdot 10^{-3}$	76.9231	0.1845
432.9	2.5680382772916	15	$0.272 \cdot 10^{-3}$	80.7692	0.2086
466.2	2.7779986066047			84.6154	0.2318
499.5	2.9872204992181			88.4615	0.2559
532.8	3.1958330279478			92.3077	0.2811
566.1	3.4039373527219			96.1538	0.3067
599.4	3.6116137428525			100.0000	0.3331
632.7	3.8189266229494			184.6154	0.8603
666.0	4.0259282476183			207.6923	0.9922
				230.7692	1.1256
				253.8462	1.2543
				276.9231	1.3829
				281.5385	1.4086

Theoretische Berechnungen vom spezifischen el. Widerstand von Kupfer

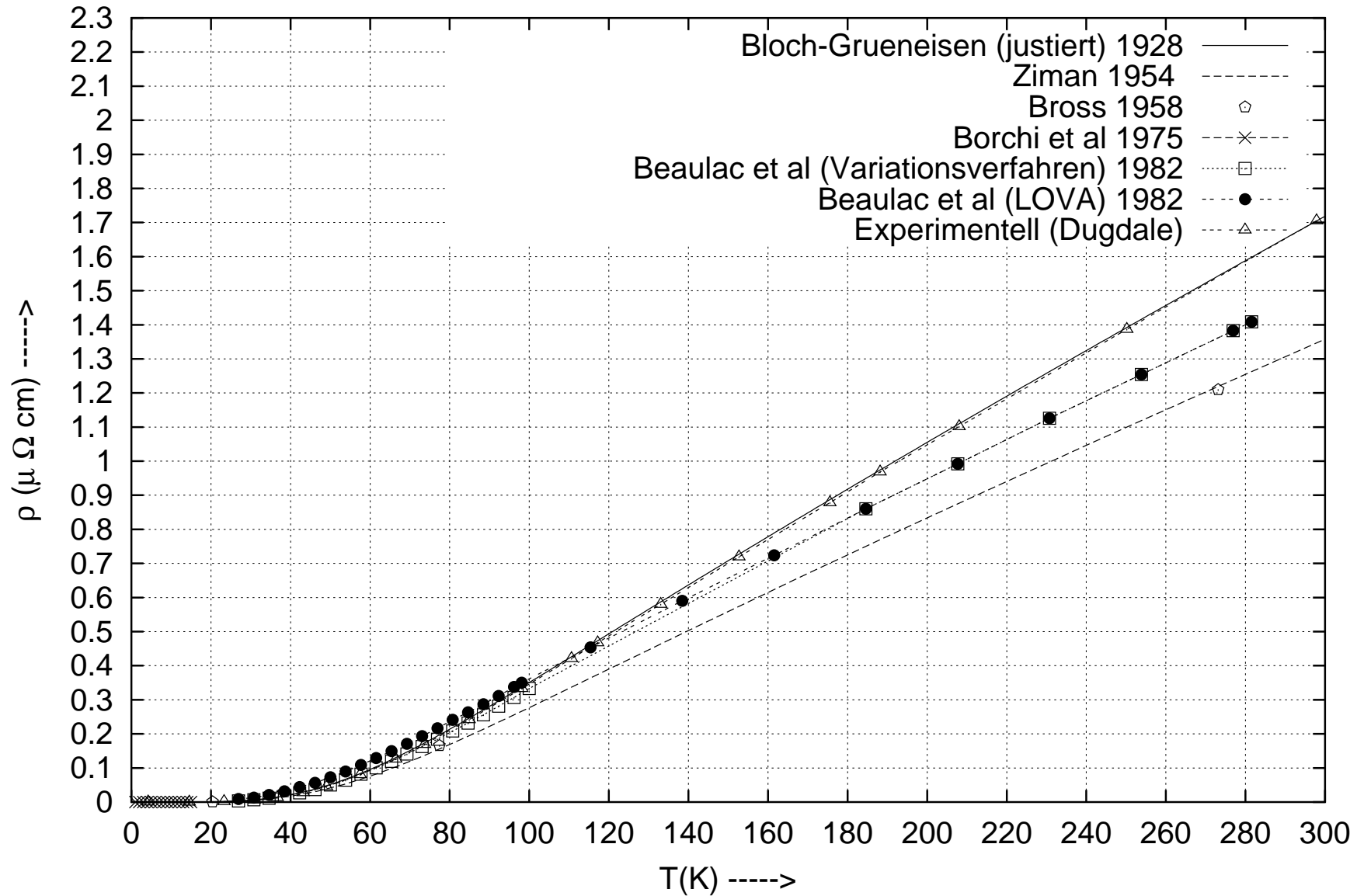
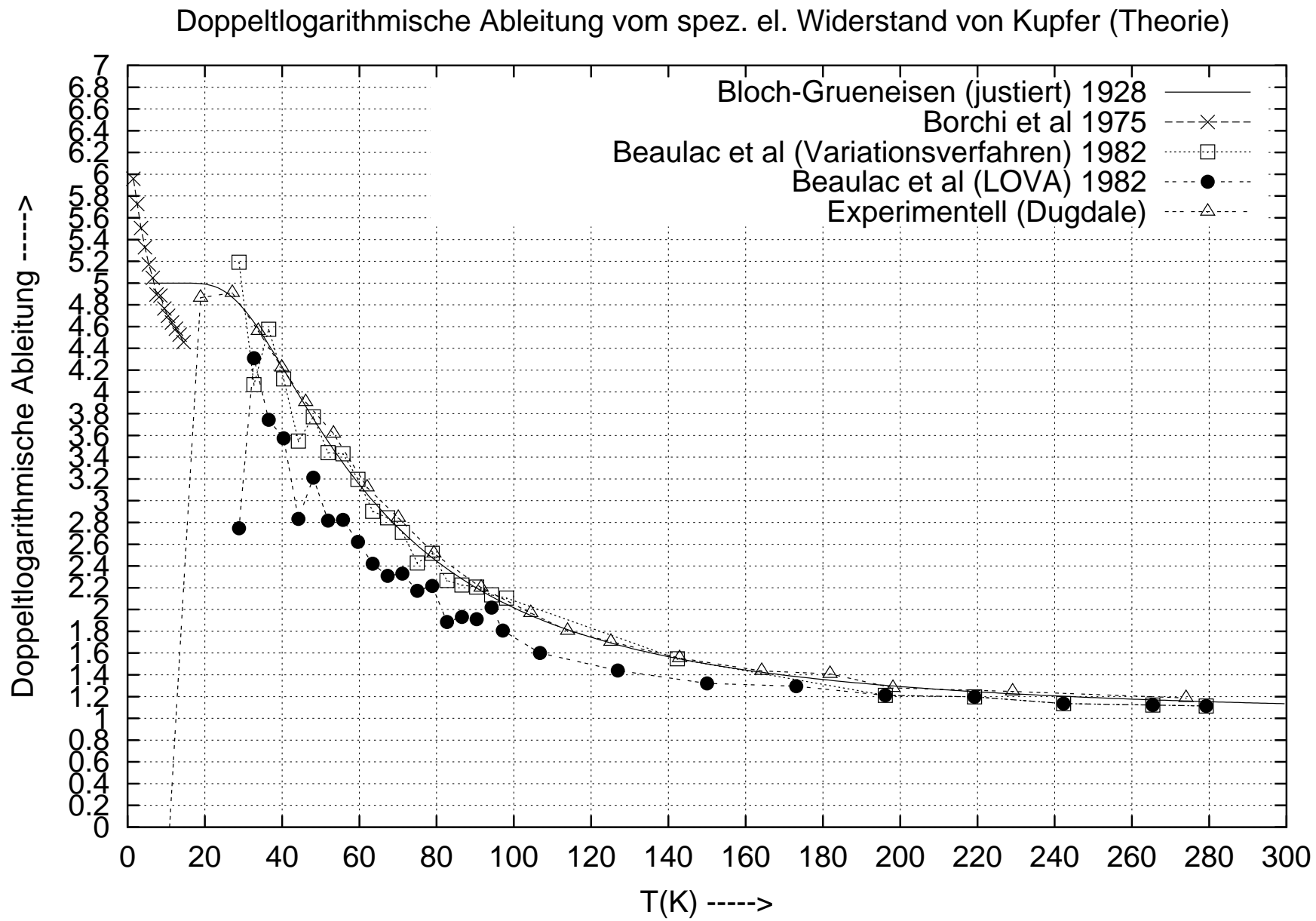


Abbildung 5.13:

Abbildung 5.14:



Spezifischer el. Widerstand von Kupfer nach Borch (1975)

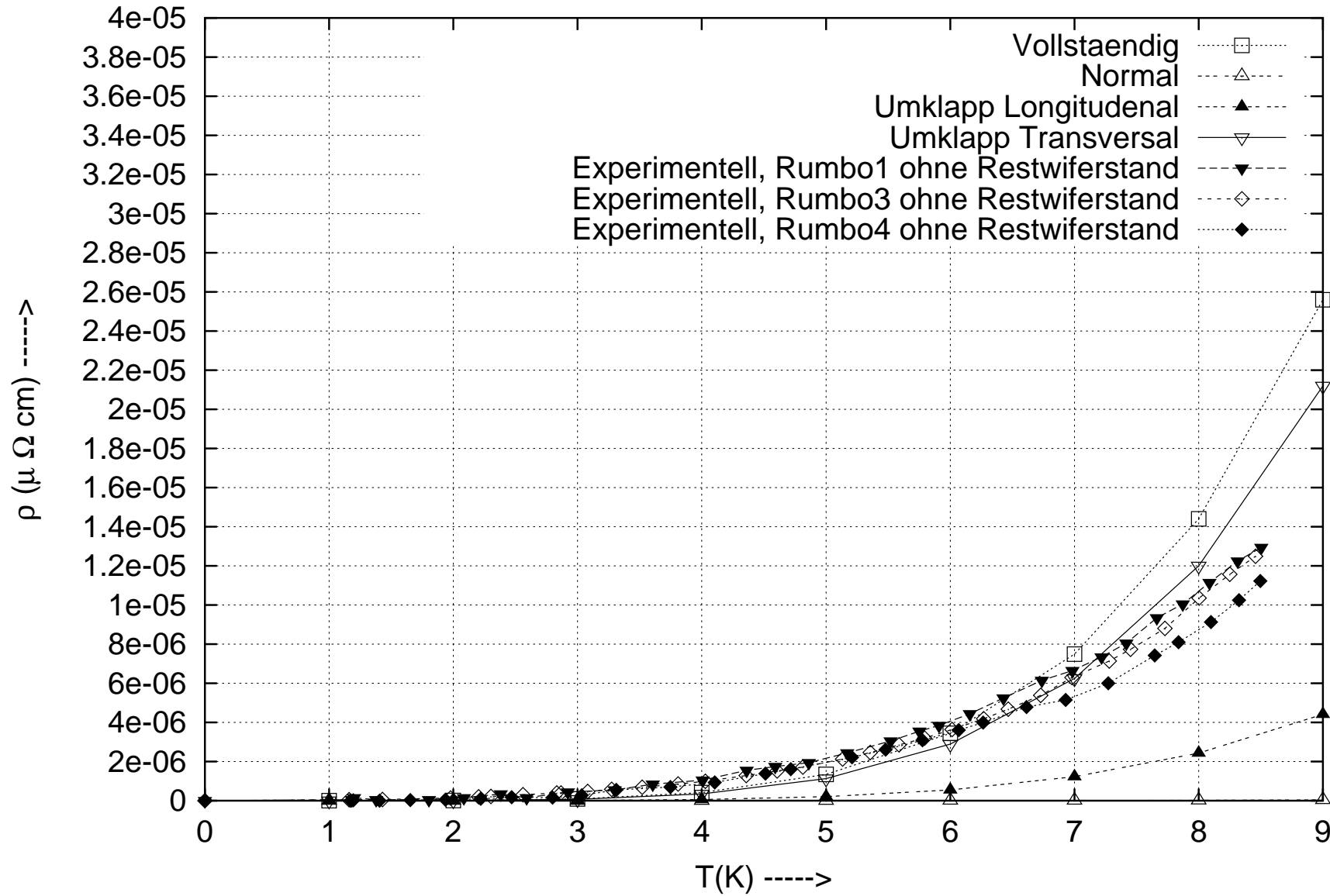


Abbildung 5.15:

5.3 Ergebnisse der Arbeit

Die wichtigsten Annahmen der Arbeit werden im folgenden im Vergleich zu den anderen theoretischen Arbeiten zusammengefaßt.

Tabelle 5.6: *Theoretische Berechnungen des spez. elektr. Widerstand von Kupfer*

Autor	Jahr	Wichtige Annahmen	T(K)	ϵ (%)
Dunaevskiy	2002	Es werden MAPW–Wellenfunktionen und Energien zur Berechnung von Matrixelementen unter Berücksichtigung der Vielteilchenabschirmung im Rahmen eines selbstkonsistenten Lösungsverfahrens der Integralgleichung nach der LDA–Näherung verwendet. Informationen über Phononen wurden mittels der harmonischen Näherung und gemessenen Kopplungskonstanten gewonnen. Die komplexe Form der Fermi–Fläche wird berücksichtigt. Der spezifische elektrische Widerstand wird aus der Boltzmann–Gleichung mit anisotropen Übergangswahrscheinlichkeiten nach dem Kohlerschen Variationsprinzip durch einen originären Ansatz erhalten. Die Berechnungen wurden mit zehn \vec{k} -Ansatzvektoren im irreduziblen Keil durchgeführt.	beliebig	s.B. 5.18

Der in der Arbeit verwendete Ansatz

$$\vec{\varphi}_{n\vec{k}}^{(\tau)} = \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \sum_{\vec{R}_m \in \text{Schalen-Nr. } \tau} e^{i\vec{k}\vec{R}_m}, \quad (5.8)$$

mit $\tau = 0$ als zentrale Zelle ($\vec{R}_m = 0$), erfüllt die richtige Symmetrie

$$\hat{\alpha} \vec{\varphi}_{n\hat{\alpha}\vec{k}}^{(\tau)} = \vec{\varphi}_{n\vec{k}}^{(\tau)}. \quad (5.9)$$

$\hat{\alpha}$ ist ein Element der zugehörigen Raumgruppe. Durch die Inversionssymmetrie des Ansatzes (5.8) sind die Bedingungen (4.63) und (4.64) identisch erfüllt. Ebenso gilt die Periodizität im reziproken Raum, nämlich

$$\vec{\varphi}_{n\vec{k}}^{(\tau)} - \vec{\varphi}_{n'(\vec{k}'+\vec{K})}^{(\tau)} = \vec{\varphi}_{n\vec{k}}^{(\tau)} - \vec{\varphi}_{n'\vec{k}'}^{(\tau)}. \quad (5.10)$$

Mit dem Ansatz (5.8) ist es nicht mehr relevant, Elektron–Phonon–Streuprozesse in die Normal– und die Umklapp–Prozesse aufzuspalten. Die in der Literatur viel diskutierte Fragestellung über die Wirkung der Umklapp–Prozesse verliert damit an Bedeutung. Für eine nicht gitterperiodische Vergleichsfunktion $\Phi(\vec{k})$ im Transportproblem gilt, daß für die Umklapp–Prozesse die Differenz

$$\Phi(\vec{k}) - \Phi(\vec{k}') \sim (\vec{k} - \vec{k}') \simeq \vec{K} \quad (5.11)$$

groß wird, mit \vec{K} als reziproker Gittervektor. Bei einer gitterperiodischen Vergleichsfunktion (wie z.B. (5.8)) ist die obige Differenz hingegen sehr klein.

Ein Transportproblem mit einer nicht gitterperiodischen Vergleichsfunktion als Lösungsansatz führt dazu, daß der Einfluß der Umklapp–Prozesse auf den spezifischen elektrischen Widerstand Übergewicht erlangt. Die zu starke Gewichtung wird mit dem obigen schnell konvergierenden, stabilen Ansatz (5.8) beseitigt. Der spezifische elektrische Widerstand kann für eine beliebige Temperatur berechnet werden.

In Tabelle 5.7 sind die Werte bei gleichen Temperaturen wie bei Dugdale in nullter ($\tau = 0$) und erster Ordnung ($\tau = 0, 1$) Variationsrechnung im Vergleich zu dessen Experimentaldaten zusammengefaßt. Die theoretischen Werte bei 4.2 K sind offensichtlich ein numerisches Rauschen. Unter 30 K sind die Werte ungenau, da nur ein Ansatz mit zehn \vec{k} -Vektoren im irreduziblen Keil verwendet wurden. Das daraus resultierende Netz von \vec{q} -Vektoren ist zu grob, um den für das Tieftemperaturverhalten notwendigen Übergang $\vec{q} \rightarrow 0$ korrekt zu beschreiben.

Die 0. und 1. Ordnung der Variationsrechnung liefert – in überraschender Weise – nahezu identische Ergebnisse für den spezifischen elektrischen Widerstand. Dies zeigt, daß der Ansatz (5.8) mit $\tau = 0$ physikalisch vernünftig ist.

In den Abbildungen 5.16–5.18 sind die Daten aus Tabelle 5.7, die doppellogarithmische Ableitung und die relative Abweichung der berechneten Daten für den spezifischen elektrischen Widerstand von Kupfer im Vergleich zu den experimentellen Daten von Dugdale und Matula graphisch gegenübergestellt. Zudem ist die an die experimentellen Daten von Dugdale angepaßte Blochsche Widerstandskurve mit $T_{Debye} = 333$ K und ihre doppellogarithmische Ableitung sowie die Abweichung der Daten von denen Dugdales gezeigt. Die berechneten Werte und gemessenen Daten sind linear interpoliert. Abbildung 5.18 gibt deutlich wieder, daß unter 100 K auch die experimentellen Referenzdaten beträchtlich voneinander abweichen. Die relativen Abweichungen der Daten von Beaulac sind in Abbildung 5.18 angegeben.

Tabelle 5.7: Spezifischer elektr. Widerstand von Kupfer bis 300 K

T in K, ρ in $=\mu\Omega cm$			
	Dugdale (1965)	0-Ordnung	1-Ordnung
T	ρ	ρ	ρ
4.200	0.00050	$3.56006 \cdot 10^{-10}$	$4.56772 \cdot 10^{-10}$
14.558	0.00016	$4.76017 \cdot 10^{-5}$	$1.20614 \cdot 10^{-5}$
23.278	0.00157	$8.04933 \cdot 10^{-4}$	$8.04260 \cdot 10^{-4}$
30.972	0.00638	0.00482	0.00481
36.680	0.01380	0.01198	0.01197
43.162	0.02744	0.02561	0.02559
49.032	0.04516	0.04309	0.04307
57.528	0.08050	0.07623	0.07620
66.449	0.12628	0.11912	0.11910
73.680	0.16937	0.15848	0.15848
84.921	0.24208	0.22541	0.22541
98.169	0.33307	0.30999	0.30999
110.620	0.42132	0.39263	0.39263
117.178	0.46746	0.43683	0.43683
133.033	0.58023	0.54460	0.54458
152.720	0.7191	0.67880	0.67876
175.550	0.8784	0.83362	0.83356
188.174	0.9687	0.91861	0.91854
208.061	1.1017	1.05152	1.05142
250.187	1.3865	1.32921	1.32905
297.855	1.7055	1.63809	1.63788

Spezifischer elektrischer Widerstand von Kupfer

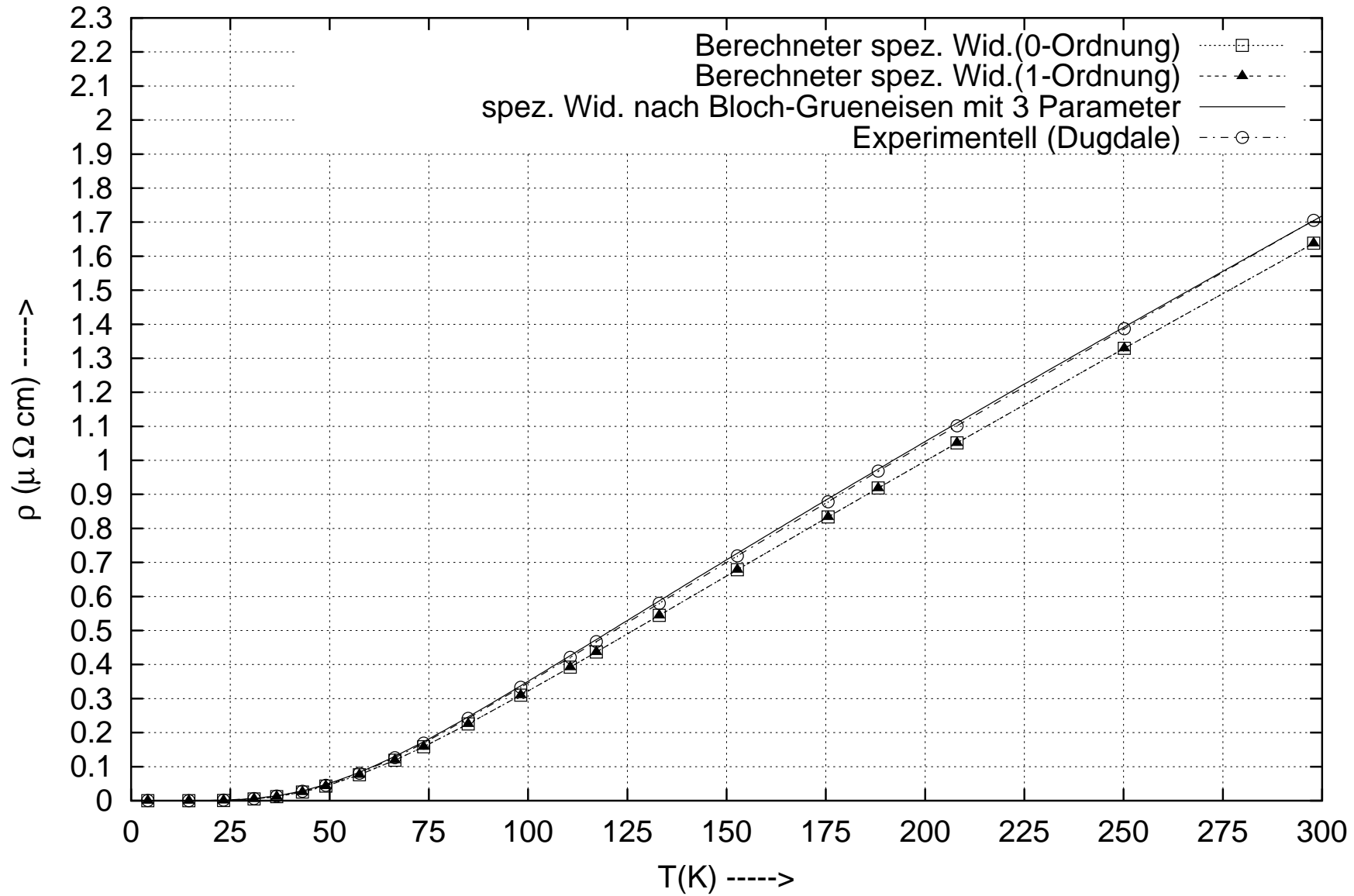


Abbildung 5.16:

Spezifischer elektrischer Widerstand von Kupfer (Doppeltlogarithmische Ableitung)

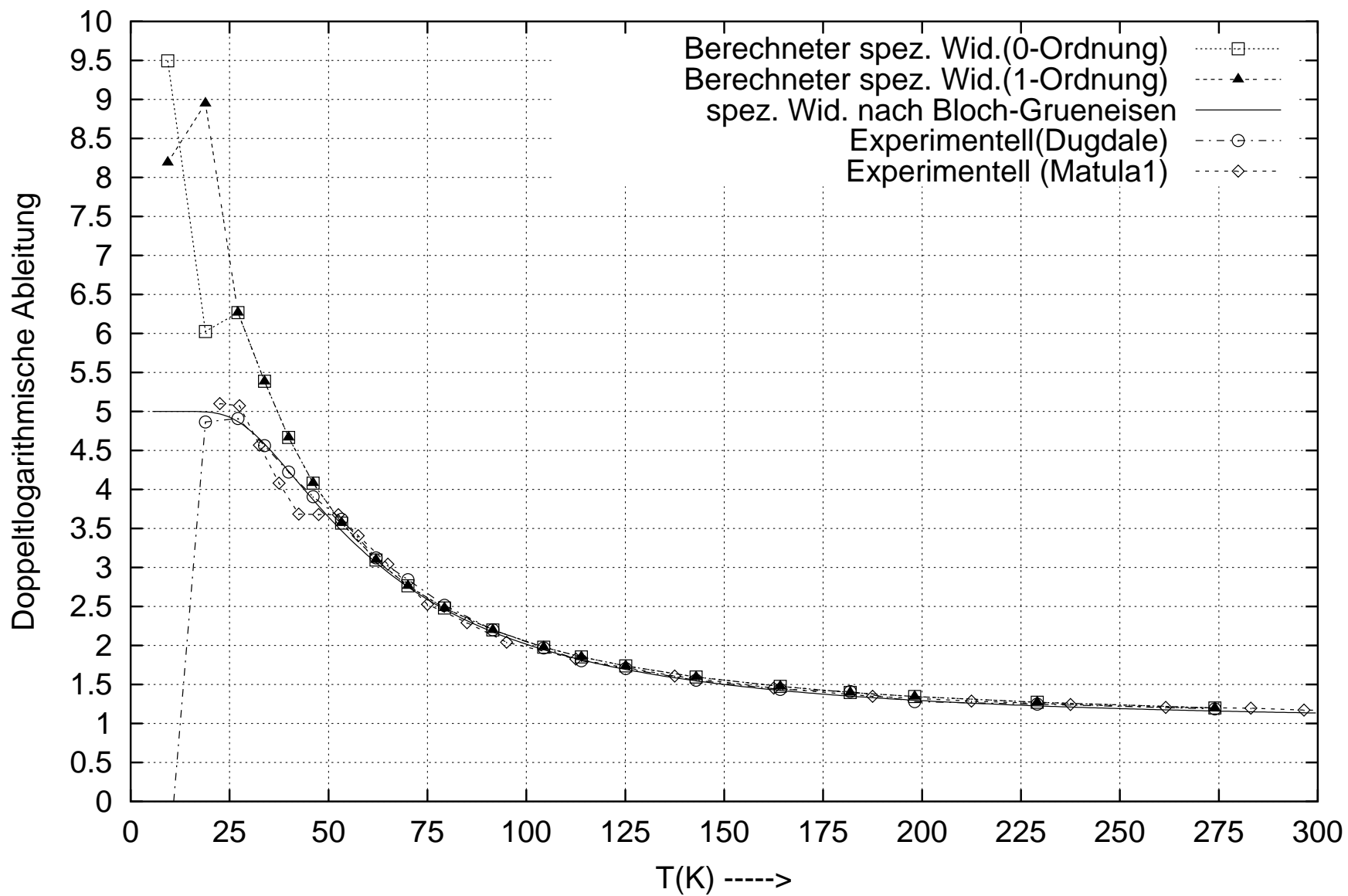


Abbildung 5.17:

Rel. Abweichung des berechneten spez. el. Widerstandes von Kupfer vom Experiment

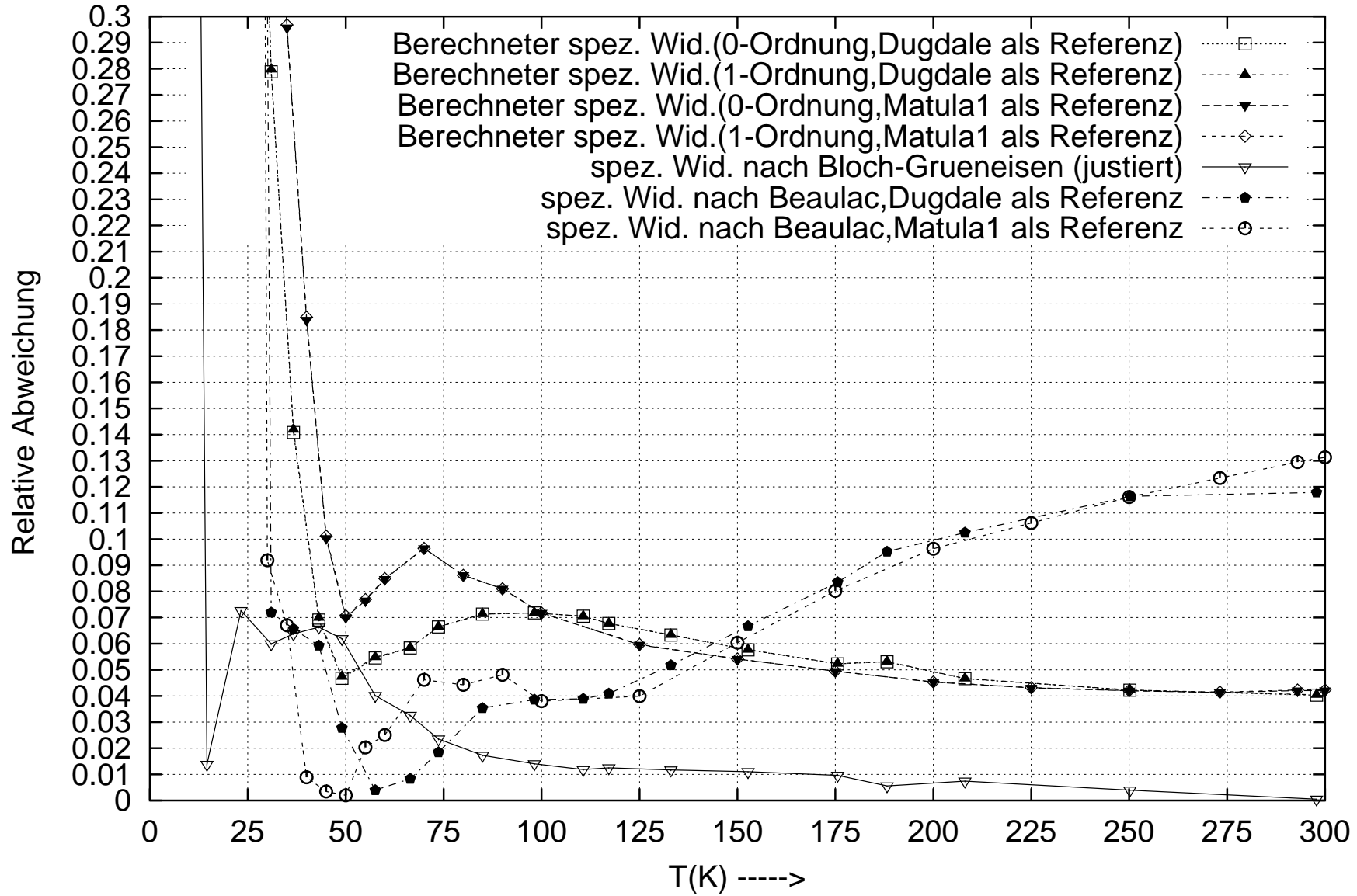


Abbildung 5.18:

Wesentlich für die weiteren Überlegungen ist die Auswirkung der zusätzlichen Austausch–Korrelations–Abschirmung aus Kapitel 3.

Die Transporttheorie kann anstelle der vollständigen Matrixelemente mit den Matrixelementen durchgeführt werden, die diese zusätzliche XC–Abschirmung nicht berücksichtigen. Die Abbildung 5.19 stellt die mit zusätzlicher XC–Abschirmung sowie jene ohne diese Abschirmung ermittelten Daten in einem dichten Temperaturwertennetz dar. Zudem sind die B–Spline–interpolierten Experimentaldaten und die theoretischen Ergebnisse von Beaulac angegeben. Der Unterschied zwischen den berechneten Werten des spezifischen elektrischen Widerstandes für $\tau = 0$ und $\tau = 1$ ist sehr klein und kaum sichtbar. Die obere Kurve in Abbildung 5.19 gibt die B–Spline–interpolierten Experimentaldaten von Dugdale, die darunter liegende Kurve die Daten ohne zusätzliche XC–Abschirmung an. Die zweite Kurve von unten stellt die Daten mit zusätzlicher XC–Abschirmung und die unterste die theoretischen Ergebnisse von Beaulac dar. Alle Werte zur Abbildung sind den Tabellen C.1–C.5 aus Anhang C zu entnehmen.

In Abbildung 5.20 ist die doppeltlogarithmische Ableitung der obigen Kurven zu finden. Die Werte dazu sind in den Tabellen C.6–C.10 aufgelistet. Die Widerstandskurven, die ohne die zusätzliche Austausch–Korrelations–Abschirmung berechnet wurden, liegen ab 50 K aufwärts näher an den Experimentaldaten als jene, bei denen diese zusätzliche Abschirmung berücksichtigt wurde. Die Widerstandswerte ohne zusätzliche XC–Abschirmung sind unter 48 K kleiner als jene mit zusätzlicher XC–Abschirmung. Über 50 K liegen alle Kurven nahe beieinander. Unter 50 K weichen sie stark voneinander ab.

Die doppeltlogarithmischen Ableitungen der Widerstandskurven ohne Berücksichtigung der zusätzlichen XC–Abschirmung nehmen im Vergleich zu den Werten mit Berücksichtigung dieses Abschirmungseffekts deutlich höhere Werte an. Die Basis–Spline–präparierten experimentellen Referenzdaten weisen einen unterschiedlichen Verlauf auf. Es ergibt sich in der Matula–Kurve ein Knick zwischen 40 K und 50 K. Es folgen unterschiedliche Temperaturmaximalwerte. Zudem liegt der maximale Wert der doppeltlogarithmischen Ableitung der beiden experimentellen Referenzkurven deutlich über dem Wert von fünf. Bei Dugdale hat man explizit einen Wert von 5.40 bei 20 K und bei Matula einen Wert von 5.30 bei 24 K. Zusätzlich dazu verschiebt der Restwiderstand die Werte nach unten.

In der Natur wurde eine weit größere Abweichung von der Bloch–Widerstandsfunktion im Tieftemperaturbereich bei Kalium gemessen. Der maximale Wert der doppeltlogarithmischen Ableitung der Widerstandskurve von Kalium liegt bei neun, siehe [37]. Die theoretisch ermittelten Kurven mit zusätzlicher XC–Abschirmung weisen ein Maximum bei 22 K auf, d.h. genau in der Mitte der beiden experimentellen Referenzkurven.

In Abb. 5.21 ist die relative Abweichung der Widerstandskurven, in denen die zusätzliche XC–Abschirmung berücksichtigt bzw. vernachlässigt wurde, gezeigt. Die XC–Abschirmung spielt damit bei der theoretischen Beschreibung des spezifischen elektrischen Widerstandes im Tieftemperaturbereich eine große Rolle.

Spezifischer elektrischer Widerstand von Kupfer mit und ohne zus. XC-Abschirmung

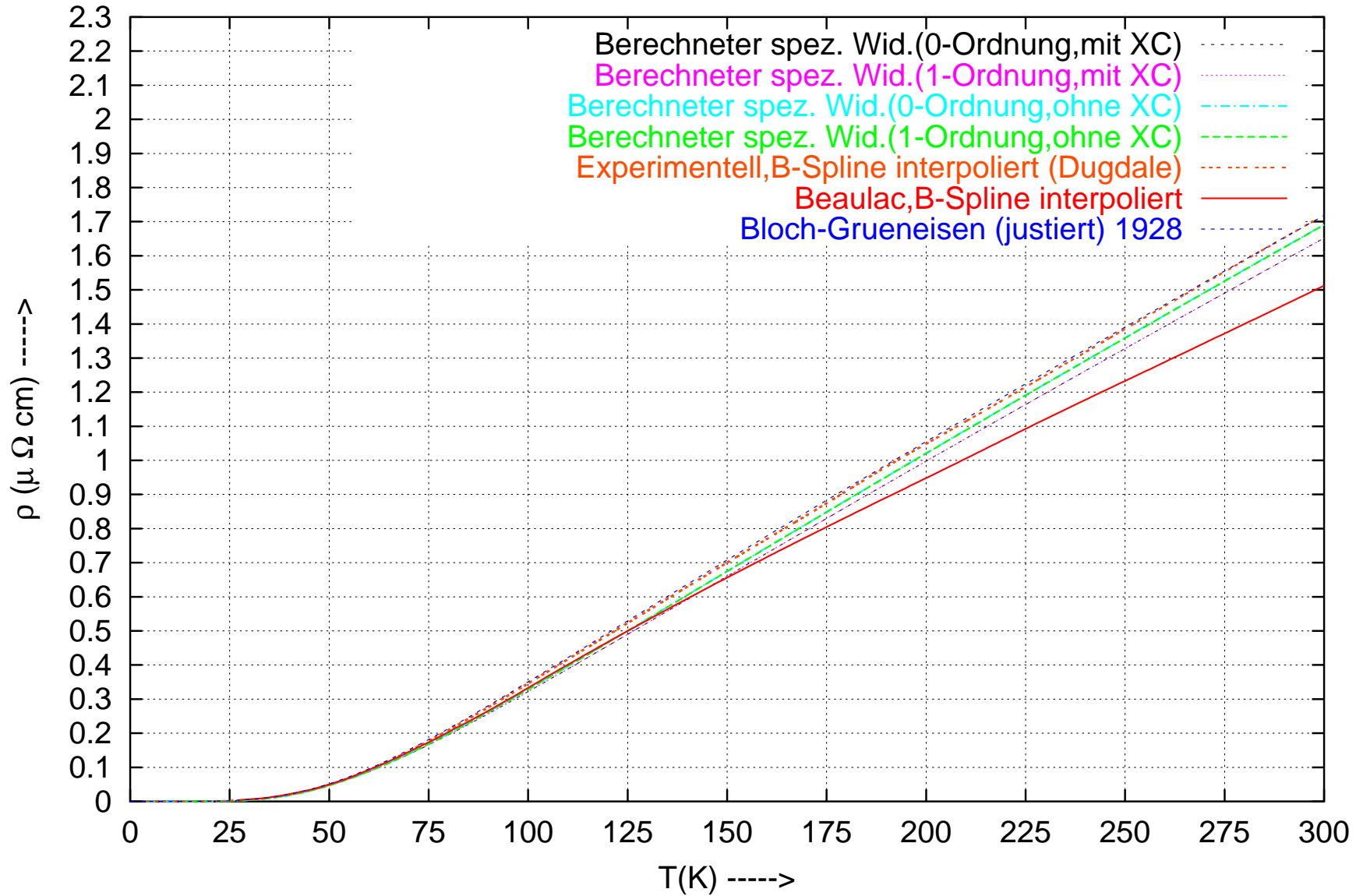


Abbildung 5.19:

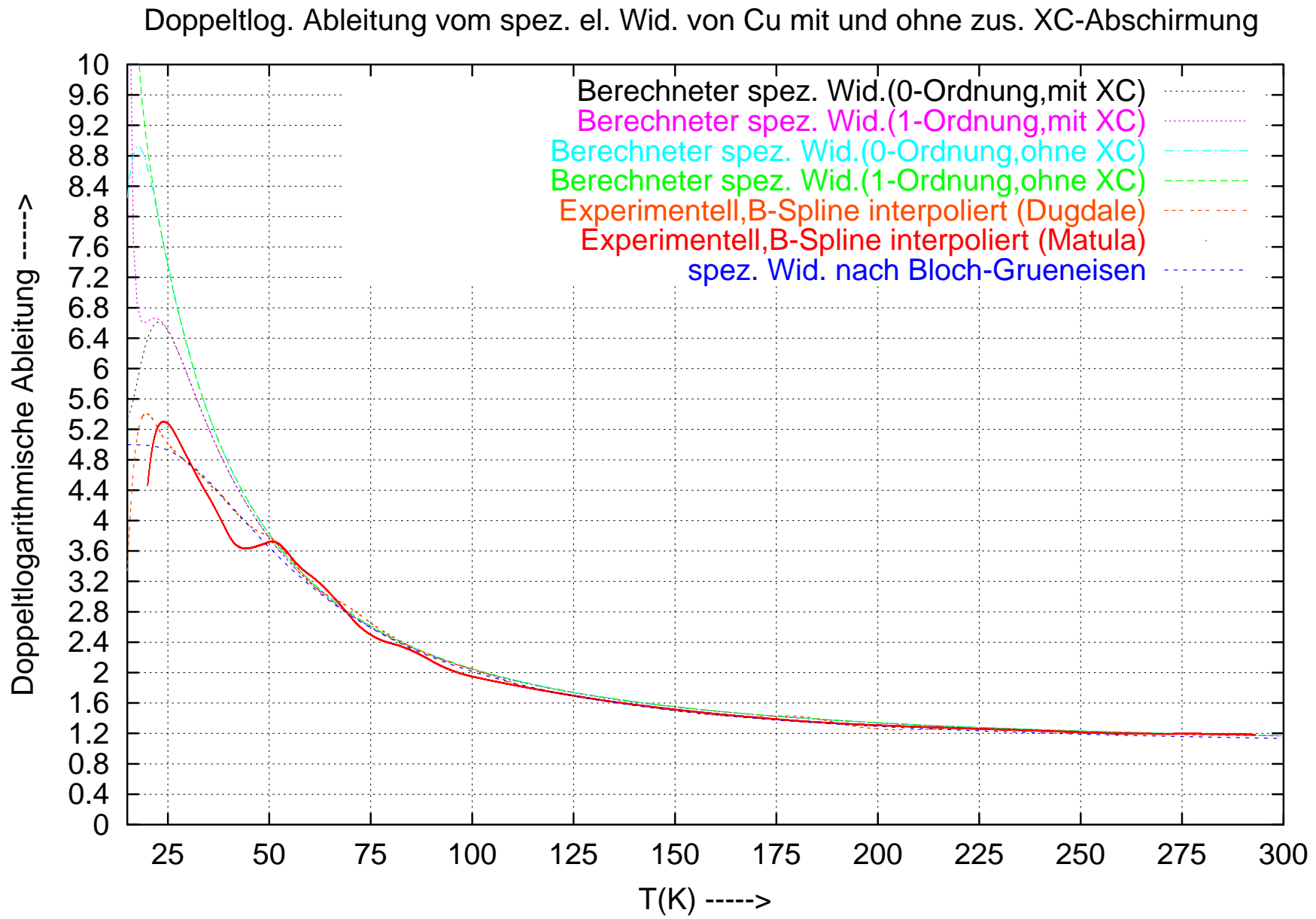


Abbildung 5.20:

Der relative Unterschied des spez. el. Wid. von Cu mit und ohne zus. XC-Abschirmung

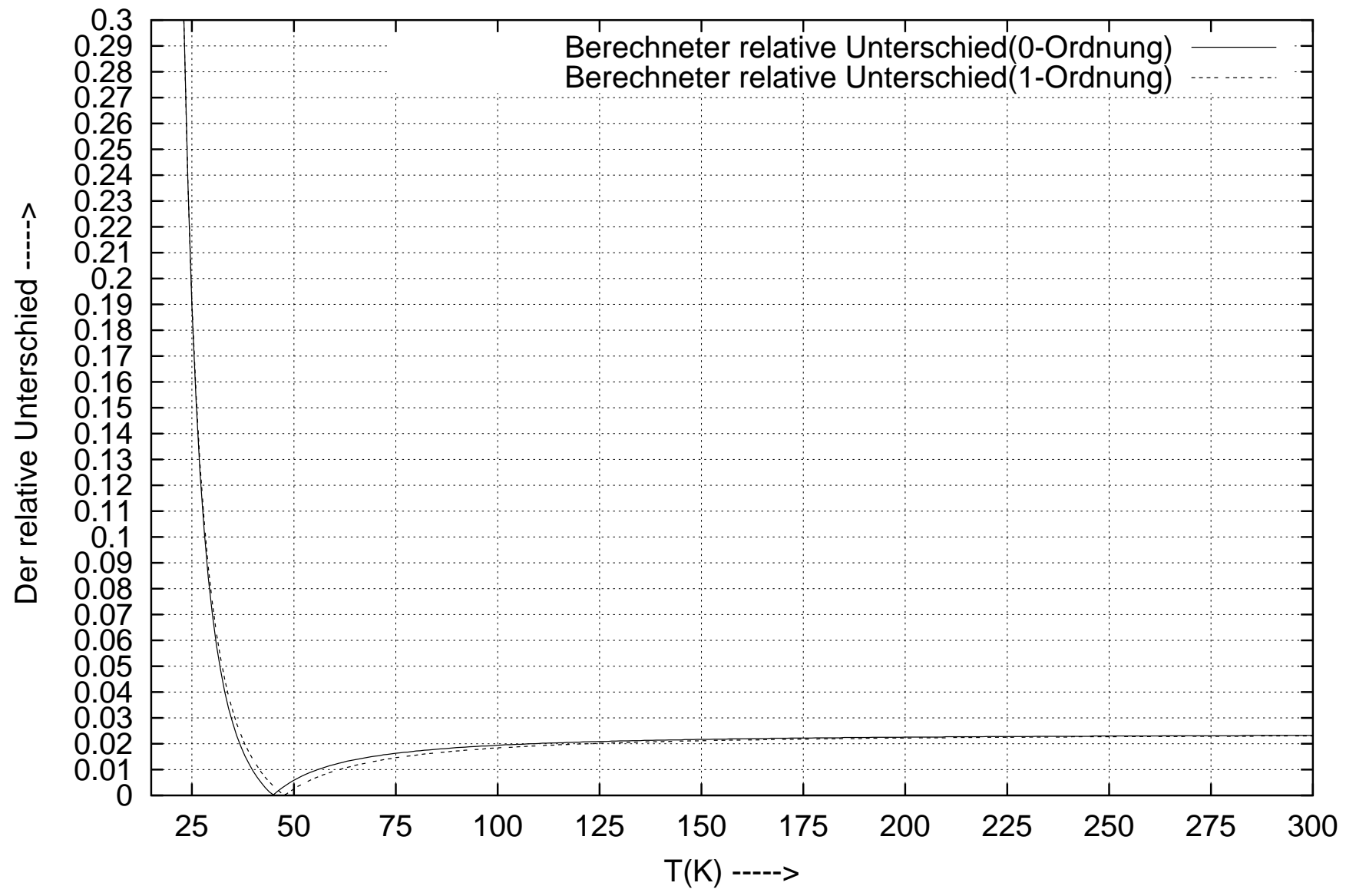


Abbildung 5.21:

Resumé

In dieser Arbeit sind die Übergangswahrscheinlichkeiten unter dem Einfluß der Elektron-Phonon-Wechselwirkung aufbauend auf dem MAPW-Verfahren berechnet worden. Im Gegensatz zu früheren theoretischen Arbeiten, siehe vor allem die Arbeit von Beaulac [16], sind zusätzlich spezifische Austausch-Korrelations-Abschirmungseffekte im Rahmen der LDA berücksichtigt.

Analog zu den zitierten Arbeiten [12, 92, 27, 29] und [16] liefert die Berechnung des spezifischen elektrischen Widerstandes von Kupfer im Bereich von ca. 50 K und aufwärts einen etwas zu niedrigen Wert.

Die systematischen Fehler der Theorie rühren daher, daß die LDA als Methode verwendet wird, die Vielteilcheneffekte in der lokalen Näherung berücksichtigt.

In der vorliegenden Arbeit wird mit der scharfen Fermi-Kante gearbeitet. Die Aufweichung der Fermi-Kante wird vernachlässigt. Die Temperaturabhängigkeit des spezifischen elektrischen Widerstandes entsteht durch die Bose-Einstein Funktion.

Die Ergebnisse der Transporttheorie für den spezifischen elektrischen Widerstand mit zusätzlicher XC-Abschirmung der Elektronen sind mit jenen ohne eine derartige Abschirmung verglichen und die Bedeutung dieser Effekte für den Tieftemperaturbereich gezeigt worden.

Das derzeit verwendete Netz von k -Vektoren ist zu grob, um das Tieftemperaturverhalten korrekt zu bestimmen. Die rapide Entwicklung der Computertechnologien läßt allerdings hoffen, daß es in der nahen Zukunft möglich wird, identische Berechnungen an einem wesentlich dichteren Netz von k -Vektoren durchzuführen. Das Tieftemperaturverhalten des Elektron-Phonon-Anteils des spezifischen elektrischen Widerstandes könnte so besser verstanden werden.

Die Interpolation der bereits bestimmten Übergangswahrscheinlichkeiten auf ein dichteres Netz kommt alternativ zu den direkten Berechnungen der Übergangswahrscheinlichkeiten in Frage. Eine derartige Interpolation erweist sich mathematisch als äußerst kompliziert. Trotz mehrerer Versuche konnte lediglich gezeigt werden, daß die interpolierten Übergangswahrscheinlichkeiten das Tieftemperaturverhalten des spezifischen elektrischen Widerstandes in die richtige Richtung verändern. Dieser Widerstand wird größer, d.h. seine doppeltlogarithmische Ableitung wird im Bereich unter 43 K nach unten gedrückt. Die genauen Werte sind von dem Interpolationsverfahren so stark abhängig, daß dies einer

weiteren Bearbeitung bedarf. Um das Tieftemperaturverhalten des spezifischen elektrischen Widerstandes bestimmen zu können, muß man zusätzlich den *phonon drag*-Effekt in die Transporttheorie einbauen. Dies erfordert allerdings, daß die Veränderung der Elektronen-Zustandsfunktion simultan zur Veränderung der Phononen-Zustandsfunktion in einem gekoppelten Integralgleichungssystem ermittelt werden müßte.

Von Interesse könnte ebenfalls der Vergleich zwischen den Berechnungen der Abschirmung unter Ausnutzung verschiedener Dichtefunktionale sein. Dies gilt auch für die Ergebnisse der Transporttheorie mit den auf diese Weise bestimmten Übergangswahrscheinlichkeiten.

Mit Hilfe der gewonnenen Übergangswahrscheinlichkeiten der Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist es möglich, die weiteren Transportgleichungen für Kupfer zu lösen und dadurch die Wärmeleitfähigkeit und die Thermokraft zu ermitteln. Analoge Berechnungen könnten für alle nicht relativistischen kubischen Metalle durchgeführt werden. Dafür müssen die Eingangs-MAPW-Daten und die Parameter in den Berechnungen der Übergangswahrscheinlichkeiten sowie der Gitterdynamik umgestellt werden. Interessant wäre Silber, Kalium wäre vor allem hinsichtlich der Messung aus [37] von Bedeutung.

Die in dieser Arbeit vorgestellte Berechnungsmethode für die anisotropen Übergangswahrscheinlichkeiten der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in kubischen Metallen könnte ebenfalls bei der Behandlung anderer Phänomene, welche auf diese Wechselwirkung zurückzuführen sind, nützlich sein. In diesem Zusammenhang ist die konventionelle Supraleitung zu erwähnen.

Anhang A

Mathematische Details

A.1 Reellwertige Kugelflächenfunktionen

Die reellwertigen Kugelflächenfunktionen werden gemäß der Definition

$$Y_{l\nu}(\vec{r}) = \frac{(l-m)!}{l!} P_l^m(\cos\Theta) \begin{cases} \cos(m\phi) & : m \text{ ist gerade} \\ \sin(m\phi) & : m \text{ ist ungerade} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

verwendet. Dabei ist

$$m = \left[\frac{\nu}{2} \right], 1 \leq \nu \leq 2l+1 \quad . \quad (\text{A.2})$$

Weiter gelten die Relationen für die Orthogonalität

$$\int d\Omega Y_{l\nu}(\vec{r}) Y_{l_1\nu_1}(\vec{r}) = \frac{4\pi}{2l+1} \frac{1}{\eta_{l\nu}} \delta_{ll_1} \delta_{\nu\nu_1} \quad , \quad (\text{A.3})$$

mit den Koeffizienten

$$\eta_{l\nu} = \begin{cases} 1 & : \nu = 1 \\ \frac{2(l!)^2}{(l-m)!(l+m)!} & : \text{sonst} \end{cases} \quad , \quad (\text{A.4})$$

das Additionstheorem

$$P_l(\vec{\kappa}\vec{r}) = \sum_{\nu} \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{\kappa}) Y_{l\nu}(\vec{r}) \quad (\text{A.5})$$

und die Partialwellenentwicklung einer ebenen Welle

$$e^{i\vec{\kappa}\vec{r}} = \sum_{l\nu} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{\kappa}) Y_{l\nu}(\vec{r}) j_l(\kappa r) \quad . \quad (\text{A.6})$$

Für die Multipolentwicklung folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} &= \Theta(r - r') \sum_{l\nu} \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}) Y_{l\nu}(\vec{r}') \frac{r'^l}{r^{l+1}} \\ &+ \Theta(r' - r) \sum_{l\nu} \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}) Y_{l\nu}(\vec{r}') \frac{r^l}{r'^{l+1}} \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Die \vec{r}^0 -Darstellung lautet

$$\vec{r}^0 = \frac{\vec{r}}{r} = \begin{pmatrix} Y_{13}(\vec{r}^0) \\ Y_{12}(\vec{r}^0) \\ Y_{11}(\vec{r}^0) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Der Gradient der harmonischen Funktion der Ordnung l $r^l Y_{l\nu}$ kann als Linearkombination der harmonischen Funktionen der Ordnung $l-1$ $r^{l-1} Y_{l-1\nu}$

$$\vec{\nabla} r^l Y_{l\nu}(\vec{r}^0) = \sum_{\nu'=1,2l-1} \vec{h}_{l-1\nu'} Y_{l-1\nu'}(\vec{r}^0) \quad (\text{A.9})$$

dargestellt werden. Die Vektorkoeffizienten $\vec{h}_{l-1\nu'}$ werden nach der expliziten Darstellung der reelwertigen Kugelflächenfunktionen gewonnen.

Die sogenannten Gaunt-Integrale haben die Form

$$\langle l\nu | l'\nu' | l''\nu'' \rangle_G = \int d\Omega Y_{l\nu}(\vec{r}^0) Y_{l'\nu'}(\vec{r}^0) Y_{l''\nu''}(\vec{r}^0) \quad (\text{A.10})$$

Das Gaunt-Integral ist symmetrisch gegenüber paarweiser Index-Vertauschung gemäß

$$\begin{aligned} \langle l\nu | l'\nu' | l''\nu'' \rangle_G &= \langle l'\nu' | l\nu | l''\nu'' \rangle_G = \langle l'\nu' | l''\nu'' | l\nu \rangle_G \\ &= \langle l''\nu'' | l\nu | l'\nu' \rangle_G = \langle l''\nu'' | l'\nu' | l\nu \rangle_G = \langle l\nu | l''\nu'' | l'\nu' \rangle_G. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

A.2 Verallgemeinertes Ewald-Verfahren

Aufgrund der Divergenz der Gittersummen vom Typ $\sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{\pm i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r}-\vec{R}^m|}$ ist es notwendig, eine Regularisierung vorzunehmen, um diese als

$$\sum_{\vec{R}^m \neq 0} \frac{e^{\pm i\vec{q}\vec{R}^m}}{|\vec{r}-\vec{R}^m|} = \sum_{l\nu} r^l Y_{l\nu}(\vec{r}^0) A_{l\nu}(\pm\vec{q}) \quad (\text{A.12})$$

schreiben zu können. Man betrachten zunächst die Funktion

$$F(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{i(\vec{q}+\vec{k}_m)\vec{r}}}{|\vec{q}+\vec{k}_m|^2}, \quad (\text{A.13})$$

wobei \vec{k}_m die reziproken Gittervektoren symbolisieren. Es gilt

$$F(\vec{r} + \vec{R}_m, \vec{q}) = e^{i\vec{q}\vec{R}_m} F(\vec{r}, \vec{q}) \quad (\text{A.14})$$

und

$$\int_{R^3} d^3 r F(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{\delta(\vec{q} + \vec{k}_m)}{|\vec{q} + \vec{k}_m|^2} = 0, \quad \forall \vec{q} \neq 0 \quad . \quad (\text{A.15})$$

Mit der Ewald-Identität

$$\frac{1}{|\vec{q} + \vec{k}_m|^2} = \int_0^\infty dt e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 t} \quad (\text{A.16})$$

hat man

$$F(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{i(\vec{q} + \vec{k}_m)\vec{r}} \int_0^\infty dt e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 t} \quad . \quad (\text{A.17})$$

Wird das Integrationsintervall $[0, \infty[$ in $[0, \eta [\cup] \eta, \infty[$ aufgespalten, so folgt

$$F(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{i(\vec{q} + \vec{k}_m)\vec{r}} \int_0^\eta dt e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 t} + \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{i(\vec{q} + \vec{k}_m)\vec{r}} \int_\eta^\infty dt e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 t} \quad . \quad (\text{A.18})$$

Die Integration von η bis ∞ wird explizit durchgeführt. Damit wird $F(\vec{r}, \vec{q})$ zu

$$F(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 \eta} \frac{e^{i(\vec{q} + \vec{k}_m)\vec{r}}}{|\vec{q} + \vec{k}_m|^2} + \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{i(\vec{q} + \vec{k}_m)\vec{r}} \int_0^\eta dt e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 t} \quad . \quad (\text{A.19})$$

Den zweiten Term betrachten wir getrennt vom Rest von $F(\vec{r}, \vec{q})$

$$S(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{i(\vec{q} + \vec{k}_m)\vec{r}} \int_0^\eta dt e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 t} \quad , \quad (\text{A.20})$$

$$S(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \int_0^\eta dt \int_{R^3} d^3 p e^{i\vec{p}\vec{r}} e^{-p^2 t} \sum_{\vec{k}_m} \delta(\vec{p} - \vec{q} - \vec{k}_m) \quad . \quad (\text{A.21})$$

Nach [22] gilt

$$\sum_{\vec{k}_m} \delta(\vec{p} - \vec{q} - \vec{k}_m) = \frac{V_{WSZ}}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{R}_m} e^{-i(\vec{p} - \vec{q})\vec{R}_m} \quad . \quad (\text{A.22})$$

Dadurch wird

$$S(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{q} \vec{R}_m} \int_0^\eta dt \int_{R^3} d^3 p e^{i \vec{p}(\vec{r} - \vec{R}_m)} e^{-p^2 t} . \quad (\text{A.23})$$

Das dreidimensionale Integral kann analytisch gewonnen werden, man hat

$$\begin{aligned} \int_{R^3} d^3 p e^{i \vec{p}(\vec{r} - \vec{R}_m)} e^{-p^2 t} &= \prod_{\nu=1}^3 \int_{-\infty}^{\infty} d p_\nu e^{i p_\nu (\vec{r} - \vec{R}_m)_\nu} e^{-p_\nu^2 t} \\ &= \prod_{\nu=1}^3 e^{-(\vec{r} - \vec{R}_m)_\nu^2 / 4t} \int_{-\infty}^{\infty} d p_\nu e^{-(p_\nu \sqrt{t} - i \frac{(\vec{r} - \vec{R}_m)_\nu}{2\sqrt{t}})^2} = \\ &= \left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_m)^2}{4t}} , \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

und $S(\vec{r}, \vec{q})$ nimmt die Gestalt

$$S(\vec{r}, \vec{q}) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{q} \vec{R}_m} \int_0^\eta dt \frac{e^{-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_m)^2}{4t}}}{t^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{A.25})$$

an. $F(\vec{r}, \vec{q})$ wird dann

$$F(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 \eta} \frac{e^{i(\vec{q} + \vec{k}_m)\vec{r}}}{|\vec{q} + \vec{k}_m|^2} + \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{q} \vec{R}_m} \int_0^\eta dt \frac{e^{-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_m)^2}{4t}}}{t^{\frac{3}{2}}} . \quad (\text{A.26})$$

Nach Variablenersetzung $u^2 = \frac{(\vec{r} - \vec{R}_m)^2}{4t}$ gilt

$$\int_0^\eta dt \frac{e^{-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_m)^2}{4t}}}{t^{\frac{3}{2}}} = \frac{4}{|\vec{r} - \vec{R}_m|} \int_{\frac{|\vec{r} - \vec{R}_m|}{2\sqrt{\eta}}}^{\infty} du e^{-u^2} , \quad (\text{A.27})$$

und $F(\vec{r}, \vec{q})$ läßt sich schreiben als

$$\begin{aligned} F(\vec{r}, \vec{q}) &= \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{-|\vec{q} + \vec{k}_m|^2 \eta} \frac{e^{i(\vec{q} + \vec{k}_m)\vec{r}}}{|\vec{q} + \vec{k}_m|^2} + \\ &+ \left(\frac{4}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{q} \vec{R}_m} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_m|} \int_{\frac{|\vec{r} - \vec{R}_m|}{2\sqrt{\eta}}}^{\infty} du e^{-u^2} . \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Für die speziell gewählten Werte von η ergibt sich

$$\eta = 0 \quad F(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{i(\vec{q}+\vec{k}_m)\vec{r}}}{|\vec{q} + \vec{k}_m|^2} \quad (\text{A.29})$$

$$\eta = \infty \quad F(\vec{r}, \vec{q}) = \sum_{\vec{R}_m} \frac{e^{i \vec{q} \vec{R}_m}}{|\vec{r} - \vec{R}_m|} \quad . \quad (\text{A.30})$$

Der Ausdruck $e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{R}_m)^2}{4t}}$ kann als $e^{-\frac{\vec{r}^2-\vec{R}_m^2}{4t}} e^{-\frac{\vec{r}\vec{R}_m}{2t}}$ dargestellt werden.

In Gleichung (A.26) können $e^{i(\vec{q}+\vec{k}_m)\vec{r}}$ und $e^{-\frac{\vec{r}\vec{R}_m}{2t}}$ als Teil des oberen Ausdrucks für $e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{R}_m)^2}{4t}}$ nach Gleichung (A.6) zerlegt werden. Damit wird Gleichung (A.28)

$$\begin{aligned} F(\vec{r}, \vec{q}) &= \sum_{l\nu} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}^0) \left[\frac{4\pi}{V_{WSZ}} \left(\sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2 \eta}}{|\vec{q} + \vec{k}_m|^2} Y_{l\nu}(\vec{q} + \vec{k}_m) j_l(|\vec{q} + \vec{k}_m| r) \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dt \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{q} \vec{R}_m} e^{-\frac{\vec{r}^2-\vec{R}_m^2}{4t}} Y_{l\nu}(\vec{R}_m^0) j_l\left(\frac{-irR_m}{2t}\right) \right] \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

$F(\vec{r}, \vec{q})$ kann demnach als

$$F(\vec{r}, \vec{q}) = \sum_{l\nu} (2l+1) i^l \eta_{l\nu} Y_{l\nu}(\vec{r}^0) F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q}) \quad (\text{A.32})$$

geschrieben werden, mit

$$\begin{aligned} F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q}) &= \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2 \eta}}{|\vec{q} + \vec{k}_m|^2} Y_{l\nu}(\vec{q} + \vec{k}_m) j_l(|\vec{q} + \vec{k}_m| r) + \\ &\quad + \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\eta dt \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i \vec{q} \vec{R}_m} e^{-\frac{(\vec{r}^2+\vec{R}_m^2)}{4t}} Y_{l\nu}(\vec{R}_m^0) j_l\left(\frac{-irR_m}{2t}\right) \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Die r -Abhängigkeit von $F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q})$ ist

$$\Delta F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q}) = -\frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{i(\vec{q}+\vec{k}_m)\vec{r}} = -\frac{4\pi}{V_{WSZ}} e^{i \vec{q} \vec{r}} \sum_{\vec{k}_m} e^{i \vec{k}_m \vec{r}} \quad . \quad (\text{A.34})$$

Nach [22] gilt

$$-\frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{i \vec{k}_m \vec{r}} = -\sum_{\vec{R}_m} \delta(\vec{r} - \vec{R}_m) \quad , \quad (\text{A.35})$$

$$\Delta F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q}) = -e^{i\vec{q}\vec{r}} \sum_{\vec{R}_m} \delta(\vec{r} - \vec{R}_m) \quad . \quad (\text{A.36})$$

Damit folgt für $\vec{r} \neq \vec{R}_m$ $\Delta F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q}) = 0$, d.h. $F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q}) \sim r^l$. Es genügt im Grenzfall $r \rightarrow 0$, den Ausdruck für $A_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q})$ aus dem von $F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q})$ abzuleiten. Für $l = 0$ erhält man im Grenzfall

$$\begin{aligned} F_{01}(\vec{r}, \vec{q}) &= \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2\eta}}{|\vec{q}+\vec{k}_m|^2} + \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\eta dt \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{q}\vec{R}_m} e^{-\frac{\vec{R}_m^2}{4t}} \\ &= \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2\eta}}{|\vec{q}+\vec{k}_m|^2} - 4\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{q}\vec{R}_m} \int_0^\eta d\left(\frac{1}{2t^{\frac{1}{2}}}\right) e^{-\left(\frac{R_m}{2t^{\frac{1}{2}}}\right)^2} \\ &= \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2\eta}}{|\vec{q}+\vec{k}_m|^2} + \frac{2}{\pi^{\frac{1}{2}}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{q}\vec{R}_m} \frac{1}{R_m} \int_{\frac{R_m}{2\sqrt{\eta}}}^\infty du e^{-u^2} \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

$$\int_{\frac{R_m}{2\sqrt{\eta}}}^\infty du e^{-u^2} = \int_0^\infty du e^{-u^2} - \int_0^{\frac{R_m}{2\sqrt{\eta}}} du e^{-u^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \int_0^{\frac{R_m}{2\sqrt{\eta}}} du e^{-u^2} \quad . \quad (\text{A.38})$$

Geht $R \rightarrow 0$, so hat man

$$\int_0^{\frac{R}{2\sqrt{\eta}}} du e^{-u^2} \simeq \frac{R}{2\sqrt{\eta}} \quad . \quad (\text{A.39})$$

Der endgültige Ausdruck für $F_{01}(\vec{r}, \vec{q})$ ergibt sich zu

$$\begin{aligned} F_{01}(\vec{r}, \vec{q}) &= \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2\eta}}{|\vec{q}+\vec{k}_m|^2} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\vec{R}_m \neq 0} e^{i\vec{q}\vec{R}_m} \frac{1}{R_m} \int_{\frac{R_m}{2\sqrt{\eta}}}^\infty du e^{-u^2} \\ &\quad + \lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{\sqrt{\pi\eta}} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Für $l \neq 0$ im Grenzfall $r \rightarrow 0$ gilt für die sphärischen Bessel-Funktionen

$$j_l(r) \simeq \frac{r^l}{(2l+1)!!} \quad . \quad (\text{A.41})$$

Ersetzt man in Gleichung (A.33) die sphärischen Bessel-Funktionen, so folgt

$$\begin{aligned}
 F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q}) &= \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2\eta}}{|\vec{q}+\vec{k}_m|^2} Y_{l\nu}(\vec{q}+\vec{k}_m) |\vec{q}+\vec{k}_m|^l r^l \frac{1}{(2l+1)!!} + \\
 &+ \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\eta dt \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{q}\vec{R}_m} e^{-\frac{\vec{R}_m^2}{4t}} Y_{l\nu}(\vec{R}_m^0) \left(\frac{-irR_m}{2t}\right)^l \frac{1}{(2l+1)!!} \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{A.42}$$

d.h.

$$\begin{aligned}
 F_{l\nu}(\vec{r}, \vec{q}) &= \left[\frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2\eta} Y_{l\nu}(\vec{q}+\vec{k}_m) |\vec{q}+\vec{k}_m|^{l-2} + \right. \\
 &+ \left. \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{-i}{2}\right)^l \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{q}\vec{R}_m} Y_{l\nu}(\vec{R}_m^0) R_m^l \int_0^\eta dt \frac{1}{t^{l+\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\vec{R}_m^2}{4t}} \right] \frac{r^l}{(2l+1)!!} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{A.43}$$

Bisher wurden allgemeine Gittersummen behandelt. Für den wichtigen Fall der aus den Summen ausgeschlossenen zentralen Zelle, d.h. für $\vec{R}_m \neq 0$, muß eine weitere Modifikation vorgenommen werden. In Gleichung (A.30) wäre ein einfaches Ersetzen der Summe $\sum_{\vec{R}_m}$ durch die Summe $\sum_{\vec{R}_m \neq 0}$ notwendig. Dies ist dem Subtrahieren von $\frac{1}{r}$ in Gleichung (A.30) sowie dem Subtrahieren von $\frac{1}{r}$ in Gleichung (A.40) äquivalent. Damit erhält man die endgültigen Ausdrücke für $A_{l\nu}(\vec{q})$

$$A_{01}(\vec{q}) = \frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} \frac{e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2\eta}}{|\vec{q}+\vec{k}_m|^2} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{\vec{R}_m \neq 0} e^{i\vec{q}\vec{R}_m} \frac{1}{R_m} \int_{\frac{R_m}{2\sqrt{\eta}}}^\infty du e^{-u^2} - \frac{1}{\sqrt{\pi\eta}}
 \tag{A.44}$$

und für $l > 0$

$$\begin{aligned}
 A_{l\nu}(\vec{q}) &= (2l+1)i^l \eta_{l\nu} \left[\frac{4\pi}{V_{WSZ}} \sum_{\vec{k}_m} e^{-|\vec{q}+\vec{k}_m|^2\eta} Y_{l\nu}(\vec{q}+\vec{k}_m) |\vec{q}+\vec{k}_m|^{l-2} + \right. \\
 &+ \left. \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{-i}{2}\right)^l \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{q}\vec{R}_m} Y_{l\nu}(\vec{R}_m^0) R_m^l \int_0^\eta dt \frac{1}{t^{l+\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\vec{R}_m^2}{4t}} \right] .
 \end{aligned}
 \tag{A.45}$$

A.3 Die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion

Die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion ist definiert als

$$f_0(n\vec{k}) = \frac{1}{e^{\beta(E_{n\vec{k}} - \zeta)} + 1} \quad , \quad (\text{A.46})$$

mit

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (\text{A.47})$$

und

$$\frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} = -\frac{\beta e^{\beta(E_{n\vec{k}} - \zeta)}}{[e^{\beta(E_{n\vec{k}} - \zeta)} + 1]^2} = -\beta f_0(n\vec{k})(1 - f_0(n\vec{k})) \quad . \quad (\text{A.48})$$

In der Nähe von $T = 0$ K wird die Ableitung der Fermi-Dirac-Funktion zur Delta-Funktion, es folgt

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial f_0(n\vec{k})}{\partial E_{n\vec{k}}} = -\delta(\zeta) \quad . \quad (\text{A.49})$$

Bei endlichen Temperaturen ist sie eine scharfe δ -ähnliche Funktion, so daß

$$\int_0^\infty g(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} dE \simeq -g(\zeta) - \frac{\pi^2}{6} \frac{d^2 g}{dE^2} \Big|_{E=\zeta} (k_B T)^2 \quad (\text{A.50})$$

gilt.

Anhang B

Organisation der Berechnungen

Die Berechnungen wurden auf zwei verschiedenen Linux-Clustern, einem Digital-Unix-Cluster und zwei Linux-Workstations durchgeführt.

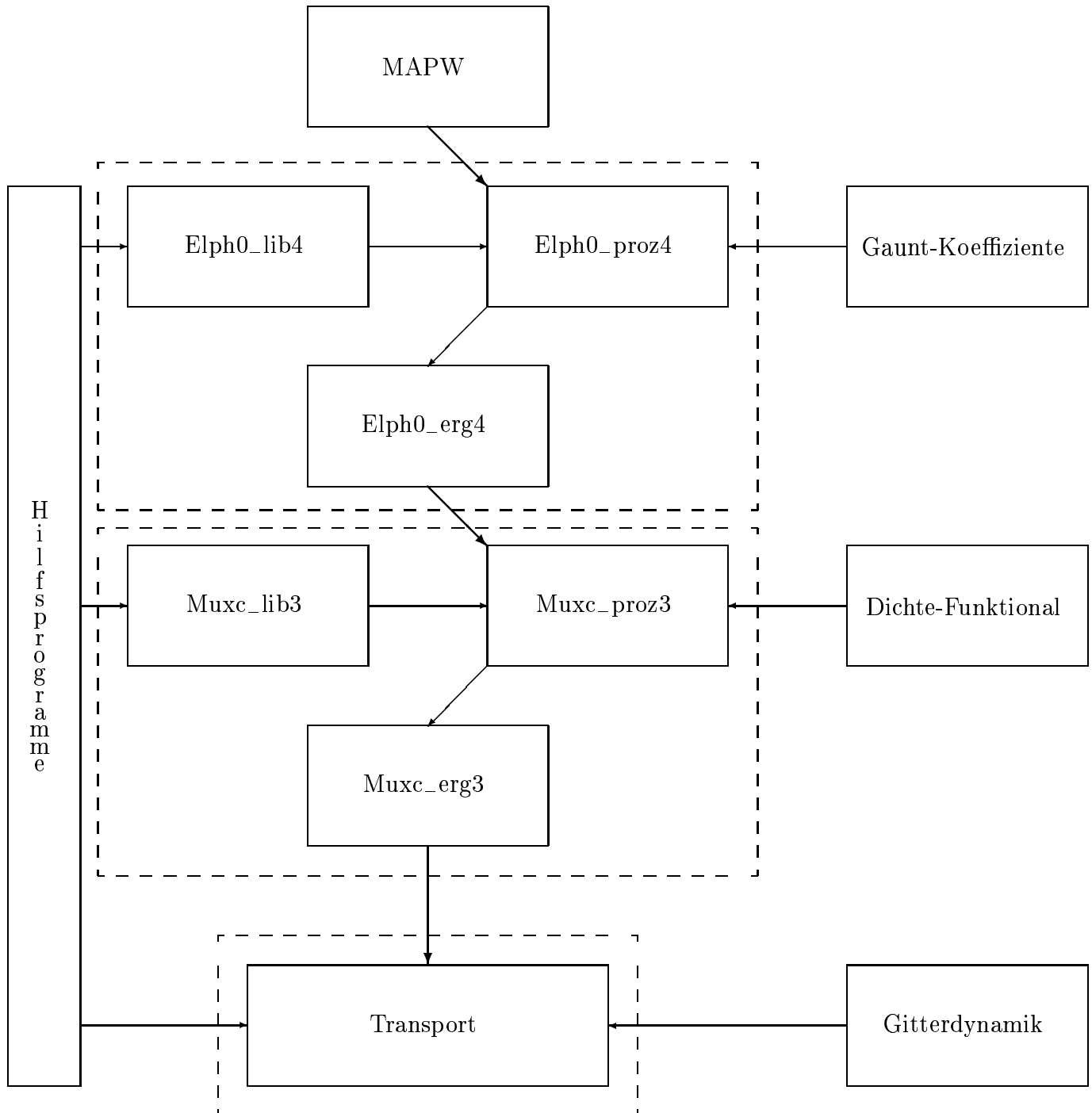
Die Differenzierung zwischen den Betriebssystemen, Compilern, Pfaden und Bibliotheken etc. wurde mit Hilfe von bash-Skripten vorgenommen. Die Skripte wurden seiner Zeit von einem weiteren bash-Skript generiert. Alle Berechnungen wurden in drei unabhängigen Programm-Bibliotheken realisiert, nämlich der Programm-Bibliothek zur Berechnung der Matrixelemente der nackten Elektron-Phonon-Wechselwirkung (**Elph0_lib4**), der Programm-Bibliothek zur Durchführung der Selbstkonsistenzzyklusberechnung der Abschirmung bzw. der Matrixelemente der abgeschirmten Elektron-Phonon-Wechselwirkung (**Muxc_lib3**) sowie der Programm-Bibliothek **Transport**, welche zur Lösung der Transportgleichungen dient.

Zusätzlich wurden die Programm-Pakete zum MAPW-Verfahren für fcc-Kupfer nach Bross, zur gitterdynamischen Berechnung von Phononen-Polarisationen und -Frequenzen nach Bross, zur Bestimmung der Gaunt-Koeffizienten nach Fehrenbach und zum Vosko-Dichte-Funktional nach Engel herangezogen. Eine Reihe der Hilfsprogramme zur Symmetrie-Behandlung, zur Darstellung der symmetrischen Funktionen und zu den Zustandsprojektionen auf die Fermi-Oberfläche wurden ebenfalls von Bross zur Verfügung gestellt.

Aus Präzisionsgründen mußte die LAPACK-Bibliothek umgeschrieben werden. Die Skripte zur Generierung der Skripte wurden im jeweiligen *proz*-Verzeichnis zusammen mit den Skripten zu den entsprechenden Berechnungen untergebracht. Die Ergebnisse und Fehlermeldungen wurden jeweils in den Direktorien *erg* verwaltet. Im folgenden Block-Diagramm der Abbildung B.1 ist die Berechnungsprozedur graphisch veranschaulicht.

Unabhängige Programmpakete sind von gestrichelten Kästen umrahmt. Die fett eingezeichneten Vektoren zeigen auf, von welchem anderen Paket die Eingangsdaten hereinkommen. Die dünn gezeichneten Vektoren geben an, von welchem anderen Paket die Quelltexte benötigt werden bzw. wo die Ergebnisse untergebracht werden.

Abbildung B.1:



Die realen Rechenzeitanforderungen lagen bei c.a. 8200 CPU–Stunden, d.h. 342 CPU–Tagen oder ca. 0.94 CPU–Jahren eines 1.5 GHz P4(RDRAM)-PC mit der Peak–Leistung von ca. 3 GFlop.

Es wurden ausgiebige Stabilitätsuntersuchungen der einzelnen Programme und der gesamten Programm–Pakete durchgeführt. Diese basierten auf dem Vergleich zwischen Berechnungen in der zweifachen und vierfachen Genauigkeit sowie auf dem Einpflanzen eines kleinen künstlichen Fehlers in die Eingangsdaten. Daraus ergab sich, daß die abschließenden Übergangswahrscheinlichkeiten eine numerische Unsicherheit in der fünften relativen Stelle nach dem Komma haben. Dies ist auf das Abschneidekriterium $\epsilon = 10^{-5}$ im Selbstkonsistenzzyklus zurückzuführen. Die Transporttheorie ist ab ca. 15 K im verwendeten Netz der k –Vektoren numerisch stabil. Die durchgeführten numerischen Berechnungen verfälschen die auf dem Papier formulierte Theorie damit nicht.

Anhang C

Tabellarische Werte

In diesem Anhang sind die Werte zum spezifischen elektrischen Widerstand von Kupfer und zu seiner doppeltlogarithmischen Ableitung tabellarisch aufgelistet. Die Temperatur ist in Kelvin (K) und der spezifische elektrische Widerstand in $\mu\Omega\text{ cm}$ angegeben.

Die Tabelle C.1 gibt die berechneten Werte des spezifischen elektrischen Widerstandes von Kupfer bis 300 K an. In den Tabellen C.2 und C.3 folgen die Basis-Spline-interpolierten Experimentaldaten zum spezifischen elektrischen Widerstand nach Dugdale und Matula. Die Tabelle C.4 gibt den spezifischen elektrischen Widerstand nach der Bloch-Grüneisen-Integralformel mit der Debye-Temperatur von 333 K wieder. Diese Ergebnisse sind an die Experimentaldaten von Dugdale angepaßt. Anschließend folgen die berechneten Werte ohne zusätzliche XC-Abschirmung, siehe die Tabelle C.5. In den Tabellen C.6–C.10 sind die entsprechenden doppeltlogarithmischen Ableitungen zu finden.

Tabelle C.1:

Berechneter Spezifischer el. Widerstand von Cu bis 300K											
T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ
18.	0.00015	65.	0.11166	112.	0.40190	159.	0.72147	206.	1.03770	253.	1.34742
19.	0.00021	66.	0.11678	113.	0.40863	160.	0.72826	207.	1.04436	254.	1.35395
20.	0.00029	67.	0.12197	114.	0.41537	161.	0.73505	208.	1.05101	255.	1.36047
21.	0.00041	68.	0.12725	115.	0.42211	162.	0.74184	209.	1.05766	256.	1.36699
22.	0.00055	69.	0.13259	116.	0.42886	163.	0.74862	210.	1.06431	257.	1.37351
23.	0.00074	70.	0.13800	117.	0.43562	164.	0.75541	211.	1.07095	258.	1.38002
24.	0.00098	71.	0.14348	118.	0.44239	165.	0.76219	212.	1.07759	259.	1.38654
25.	0.00129	72.	0.14903	119.	0.44916	166.	0.76896	213.	1.08423	260.	1.39305
26.	0.00166	73.	0.15463	120.	0.45593	167.	0.77574	214.	1.09087	261.	1.39956
27.	0.00210	74.	0.16030	121.	0.46272	168.	0.78251	215.	1.09750	262.	1.40606
28.	0.00264	75.	0.16602	122.	0.46950	169.	0.78928	216.	1.10413	263.	1.41257
29.	0.00327	76.	0.17179	123.	0.47629	170.	0.79605	217.	1.11075	264.	1.41907
30.	0.00400	77.	0.17762	124.	0.48309	171.	0.80281	218.	1.11738	265.	1.42557
31.	0.00484	78.	0.18350	125.	0.48988	172.	0.80958	219.	1.12400	266.	1.43206
32.	0.00580	79.	0.18943	126.	0.49668	173.	0.81634	220.	1.13061	267.	1.43856
33.	0.00687	80.	0.19540	127.	0.50349	174.	0.82309	221.	1.13723	268.	1.44505
34.	0.00808	81.	0.20142	128.	0.51029	175.	0.82984	222.	1.14384	269.	1.45154
35.	0.00942	82.	0.20748	129.	0.51710	176.	0.83660	223.	1.15045	270.	1.45803
36.	0.01089	83.	0.21358	130.	0.52391	177.	0.84334	224.	1.15705	271.	1.46451
37.	0.01250	84.	0.21972	131.	0.53073	178.	0.85009	225.	1.16366	272.	1.47099
38.	0.01425	85.	0.22590	132.	0.53754	179.	0.85683	226.	1.17026	273.	1.47747
39.	0.01615	86.	0.23211	133.	0.54436	180.	0.86357	227.	1.17685	274.	1.48395
40.	0.01819	87.	0.23836	134.	0.55117	181.	0.87030	228.	1.18345	275.	1.49043
41.	0.02037	88.	0.24463	135.	0.55799	182.	0.87704	229.	1.19004	276.	1.49690
42.	0.02270	89.	0.25094	136.	0.56481	183.	0.88377	230.	1.19663	277.	1.50338
43.	0.02517	90.	0.25728	137.	0.57163	184.	0.89049	231.	1.20321	278.	1.50985
44.	0.02779	91.	0.26365	138.	0.57845	185.	0.89722	232.	1.20980	279.	1.51631
45.	0.03055	92.	0.27004	139.	0.58527	186.	0.90394	233.	1.21638	280.	1.52278
46.	0.03344	93.	0.27646	140.	0.59209	187.	0.91065	234.	1.22295	281.	1.52924
47.	0.03648	94.	0.28290	141.	0.59891	188.	0.91737	235.	1.22953	282.	1.53570
48.	0.03965	95.	0.28936	142.	0.60572	189.	0.92408	236.	1.23610	283.	1.54216
49.	0.04296	96.	0.29585	143.	0.61254	190.	0.93079	237.	1.24267	284.	1.54862
50.	0.04640	97.	0.30236	144.	0.61936	191.	0.93749	238.	1.24924	285.	1.55508
51.	0.04997	98.	0.30889	145.	0.62618	192.	0.94420	239.	1.25580	286.	1.56153
52.	0.05366	99.	0.31544	146.	0.63299	193.	0.95089	240.	1.26236	287.	1.56798
53.	0.05748	100.	0.32200	147.	0.63981	194.	0.95759	241.	1.26892	288.	1.57443
54.	0.06141	101.	0.32859	148.	0.64662	195.	0.96428	242.	1.27548	289.	1.58088
55.	0.06546	102.	0.33518	149.	0.65343	196.	0.97097	243.	1.28203	290.	1.58732
56.	0.06963	103.	0.34180	150.	0.66025	197.	0.97766	244.	1.28858	291.	1.59377
57.	0.07390	104.	0.34843	151.	0.66706	198.	0.98434	245.	1.29513	292.	1.60021
58.	0.07828	105.	0.35507	152.	0.67386	199.	0.99102	246.	1.30167	293.	1.60665
59.	0.08277	106.	0.36173	153.	0.68067	200.	0.99770	247.	1.30822	294.	1.61308
60.	0.08735	107.	0.36840	154.	0.68747	201.	1.00438	248.	1.31476	295.	1.61952
61.	0.09203	108.	0.37508	155.	0.69428	202.	1.01105	249.	1.32130	296.	1.62595
62.	0.09681	109.	0.38177	156.	0.70108	203.	1.01772	250.	1.32783	297.	1.63238
63.	0.10167	110.	0.38847	157.	0.70788	204.	1.02438	251.	1.33436	298.	1.63881
64.	0.10663	111.	0.39518	158.	0.71467	205.	1.03104	252.	1.34089	299.	1.64524
65.	0.11166	112.	0.40190	159.	0.72147	206.	1.03770	253.	1.34742	300.	1.65167

Tabelle C.2:

Spezifischer el. Widerstand von Cu (nach Dugdale, B-Spline-interpoliert)											
T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ
9.	0.00022	57.	0.07804	105.	0.38146	153.	0.72105	201.	1.05520	249.	1.37846
10.	0.00018	58.	0.08272	106.	0.38857	154.	0.72800	202.	1.06179	250.	1.38523
11.	0.00015	59.	0.08749	107.	0.39568	155.	0.73494	203.	1.06837	251.	1.39200
12.	0.00013	60.	0.09236	108.	0.40277	156.	0.74188	204.	1.07495	252.	1.39876
13.	0.00013	61.	0.09733	109.	0.40986	157.	0.74881	205.	1.08153	253.	1.40552
14.	0.00015	62.	0.10240	110.	0.41694	158.	0.75573	206.	1.08811	254.	1.41227
15.	0.00018	63.	0.10758	111.	0.42400	159.	0.76265	207.	1.09470	255.	1.41901
16.	0.00022	64.	0.11287	112.	0.43105	160.	0.76957	208.	1.10130	256.	1.42575
17.	0.00030	65.	0.11826	113.	0.43808	161.	0.77649	209.	1.10791	257.	1.43248
18.	0.00040	66.	0.12377	114.	0.44511	162.	0.78342	210.	1.11454	258.	1.43921
19.	0.00053	67.	0.12939	115.	0.45214	163.	0.79035	211.	1.12118	259.	1.44593
20.	0.00070	68.	0.13513	116.	0.45917	164.	0.79728	212.	1.12783	260.	1.45265
21.	0.00091	69.	0.14096	117.	0.46621	165.	0.80423	213.	1.13450	261.	1.45936
22.	0.00117	70.	0.14689	118.	0.47326	166.	0.81118	214.	1.14117	262.	1.46607
23.	0.00148	71.	0.15291	119.	0.48032	167.	0.81814	215.	1.14786	263.	1.47277
24.	0.00184	72.	0.15900	120.	0.48740	168.	0.82512	216.	1.15456	264.	1.47948
25.	0.00226	73.	0.16515	121.	0.49449	169.	0.83211	217.	1.16127	265.	1.48617
26.	0.00274	74.	0.17136	122.	0.50159	170.	0.83912	218.	1.16799	266.	1.49287
27.	0.00330	75.	0.17762	123.	0.50870	171.	0.84615	219.	1.17472	267.	1.49956
28.	0.00394	76.	0.18393	124.	0.51582	172.	0.85319	220.	1.18145	268.	1.50625
29.	0.00467	77.	0.19029	125.	0.52294	173.	0.86026	221.	1.18820	269.	1.51293
30.	0.00549	78.	0.19669	126.	0.53007	174.	0.86736	222.	1.19495	270.	1.51961
31.	0.00641	79.	0.20313	127.	0.53720	175.	0.87447	223.	1.20171	271.	1.52629
32.	0.00743	80.	0.20962	128.	0.54433	176.	0.88162	224.	1.20848	272.	1.53297
33.	0.00857	81.	0.21614	129.	0.55147	177.	0.88879	225.	1.21525	273.	1.53965
34.	0.00983	82.	0.22271	130.	0.55860	178.	0.89598	226.	1.22203	274.	1.54632
35.	0.01120	83.	0.22931	131.	0.56574	179.	0.90318	227.	1.22882	275.	1.55299
36.	0.01270	84.	0.23594	132.	0.57287	180.	0.91038	228.	1.23561	276.	1.55966
37.	0.01434	85.	0.24261	133.	0.57999	181.	0.91759	229.	1.24240	277.	1.56633
38.	0.01611	86.	0.24931	134.	0.58712	182.	0.92479	230.	1.24920	278.	1.57300
39.	0.01801	87.	0.25604	135.	0.59423	183.	0.93197	231.	1.25600	279.	1.57967
40.	0.02006	88.	0.26280	136.	0.60135	184.	0.93914	232.	1.26281	280.	1.58633
41.	0.02224	89.	0.26958	137.	0.60845	185.	0.94628	233.	1.26961	281.	1.59300
42.	0.02456	90.	0.27640	138.	0.61555	186.	0.95339	234.	1.27642	282.	1.59967
43.	0.02703	91.	0.28325	139.	0.62264	187.	0.96046	235.	1.28323	283.	1.60633
44.	0.02964	92.	0.29012	140.	0.62973	188.	0.96748	236.	1.29005	284.	1.61300
45.	0.03240	93.	0.29702	141.	0.63681	189.	0.97446	237.	1.29686	285.	1.61967
46.	0.03531	94.	0.30394	142.	0.64388	190.	0.98138	238.	1.30367	286.	1.62634
47.	0.03838	95.	0.31089	143.	0.65094	191.	0.98826	239.	1.31048	287.	1.63300
48.	0.04163	96.	0.31787	144.	0.65800	192.	0.99509	240.	1.31729	288.	1.63967
49.	0.04505	97.	0.32486	145.	0.66504	193.	1.00188	241.	1.32410	289.	1.64634
50.	0.04864	98.	0.33188	146.	0.67208	194.	1.00864	242.	1.33091	290.	1.65302
51.	0.05241	99.	0.33892	147.	0.67910	195.	1.01537	243.	1.33771	291.	1.65969
52.	0.05634	100.	0.34598	148.	0.68612	196.	1.02206	244.	1.34451	292.	1.66637
53.	0.06042	101.	0.35306	149.	0.69313	197.	1.02873	245.	1.35131	293.	1.67304
54.	0.06464	102.	0.36015	150.	0.70013	198.	1.03537	246.	1.35811	294.	1.67972
55.	0.06899	103.	0.36725	151.	0.70711	199.	1.04200	247.	1.36490	295.	1.68641
56.	0.07346	104.	0.37435	152.	0.71409	200.	1.04861	248.	1.37168	296.	1.69309
57.	0.07804	105.	0.38146	153.	0.72105	201.	1.05520	249.	1.37846	297.	1.69978

Tabelle C.3:

Spezifischer el. Widerstand von Cu (nach Matula, B-Spline-interpoliert)											
T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ
21.	0.00100	67.	0.13425	113.	0.43551	159.	0.76035	205.	1.07824	251.	1.39175
22.	0.00127	68.	0.14014	114.	0.44250	160.	0.76737	206.	1.08508	252.	1.39850
23.	0.00160	69.	0.14606	115.	0.44950	161.	0.77438	207.	1.09193	253.	1.40524
24.	0.00201	70.	0.15200	116.	0.45652	162.	0.78139	208.	1.09877	254.	1.41198
25.	0.00249	71.	0.15795	117.	0.46354	163.	0.78839	209.	1.10562	255.	1.41871
26.	0.00306	72.	0.16392	118.	0.47058	164.	0.79539	210.	1.11246	256.	1.42545
27.	0.00372	73.	0.16991	119.	0.47762	165.	0.80238	211.	1.11930	257.	1.43218
28.	0.00447	74.	0.17593	120.	0.48467	166.	0.80937	212.	1.12614	258.	1.43890
29.	0.00532	75.	0.18198	121.	0.49173	167.	0.81635	213.	1.13298	259.	1.44563
30.	0.00628	76.	0.18807	122.	0.49879	168.	0.82332	214.	1.13982	260.	1.45236
31.	0.00734	77.	0.19422	123.	0.50585	169.	0.83029	215.	1.14666	261.	1.45909
32.	0.00851	78.	0.20041	124.	0.51293	170.	0.83726	216.	1.15350	262.	1.46581
33.	0.00979	79.	0.20667	125.	0.52000	171.	0.84422	217.	1.16034	263.	1.47254
34.	0.01119	80.	0.21300	126.	0.52708	172.	0.85117	218.	1.16717	264.	1.47927
35.	0.01270	81.	0.21940	127.	0.53416	173.	0.85812	219.	1.17401	265.	1.48600
36.	0.01433	82.	0.22587	128.	0.54124	174.	0.86506	220.	1.18084	266.	1.49274
37.	0.01607	83.	0.23239	129.	0.54832	175.	0.87200	221.	1.18768	267.	1.49947
38.	0.01791	84.	0.23897	130.	0.55540	176.	0.87893	222.	1.19451	268.	1.50621
39.	0.01986	85.	0.24559	131.	0.56249	177.	0.88585	223.	1.20134	269.	1.51296
40.	0.02190	86.	0.25224	132.	0.56958	178.	0.89277	224.	1.20817	270.	1.51971
41.	0.02404	87.	0.25891	133.	0.57666	179.	0.89969	225.	1.21500	271.	1.52646
42.	0.02628	88.	0.26560	134.	0.58375	180.	0.90659	226.	1.22183	272.	1.53322
43.	0.02864	89.	0.27230	135.	0.59084	181.	0.91350	227.	1.22866	273.	1.53998
44.	0.03115	90.	0.27900	136.	0.59792	182.	0.92040	228.	1.23548	274.	1.54676
45.	0.03380	91.	0.28569	137.	0.60501	183.	0.92729	229.	1.24231	275.	1.55353
46.	0.03662	92.	0.29237	138.	0.61210	184.	0.93418	230.	1.24913	276.	1.56032
47.	0.03962	93.	0.29905	139.	0.61918	185.	0.94107	231.	1.25595	277.	1.56710
48.	0.04281	94.	0.30573	140.	0.62627	186.	0.94795	232.	1.26277	278.	1.57390
49.	0.04620	95.	0.31242	141.	0.63335	187.	0.95482	233.	1.26959	279.	1.58069
50.	0.04980	96.	0.31911	142.	0.64043	188.	0.96170	234.	1.27641	280.	1.58749
51.	0.05362	97.	0.32581	143.	0.64751	189.	0.96857	235.	1.28322	281.	1.59430
52.	0.05764	98.	0.33252	144.	0.65459	190.	0.97544	236.	1.29003	282.	1.60110
53.	0.06184	99.	0.33925	145.	0.66167	191.	0.98230	237.	1.29684	283.	1.60791
54.	0.06620	100.	0.34600	146.	0.66874	192.	0.98917	238.	1.30364	284.	1.61472
55.	0.07070	101.	0.35277	147.	0.67581	193.	0.99603	239.	1.31044	285.	1.62153
56.	0.07532	102.	0.35956	148.	0.68288	194.	1.00288	240.	1.31724	286.	1.62834
57.	0.08007	103.	0.36638	149.	0.68994	195.	1.00974	241.	1.32403	287.	1.63515
58.	0.08495	104.	0.37321	150.	0.69700	196.	1.01660	242.	1.33082	288.	1.64196
59.	0.08996	105.	0.38007	151.	0.70406	197.	1.02345	243.	1.33761	289.	1.64878
60.	0.09510	106.	0.38694	152.	0.71111	198.	1.03030	244.	1.34439	290.	1.65558
61.	0.10038	107.	0.39383	153.	0.71816	199.	1.03715	245.	1.35117	291.	1.66239
62.	0.10579	108.	0.40074	154.	0.72520	200.	1.04400	246.	1.35795	292.	1.66920
63.	0.11130	109.	0.40766	155.	0.73224	201.	1.05085	247.	1.36472	293.	1.67600
64.	0.11692	110.	0.41460	156.	0.73927	202.	1.05770	248.	1.37148	294.	1.68280
65.	0.12263	111.	0.42156	157.	0.74630	203.	1.06455	249.	1.37824	295.	1.68959
66.	0.12841	112.	0.42852	158.	0.75333	204.	1.07139	250.	1.38500	296.	1.69639
67.	0.13425	113.	0.43551	159.	0.76035	205.	1.07824	251.	1.39175	297.	1.70317

Tabelle C.4:

Spezifischer el. Widerstand von Cu (Bloch, $T_{Debye} = 333K$, angepaßt an Dugdale)											
T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ
5.	0.775E-06	54.	0.06780	103.	0.37197	152.	0.72197	201.	1.06190	250.	1.39079
6.	0.193E-05	55.	0.07217	104.	0.37908	153.	0.72904	202.	1.06871	251.	1.39741
7.	0.417E-05	56.	0.07668	105.	0.38620	154.	0.73610	203.	1.07552	252.	1.40403
8.	0.813E-05	57.	0.08131	106.	0.39333	155.	0.74315	204.	1.08232	253.	1.41065
9.	0.146E-04	58.	0.08606	107.	0.40046	156.	0.75020	205.	1.08912	254.	1.41726
10.	0.248E-04	59.	0.09092	108.	0.40760	157.	0.75725	206.	1.09591	255.	1.42387
11.	0.400E-04	60.	0.09590	109.	0.41475	158.	0.76428	207.	1.10270	256.	1.43048
12.	0.617E-04	61.	0.10099	110.	0.42190	159.	0.77132	208.	1.10948	257.	1.43708
13.	0.921E-04	62.	0.10618	111.	0.42906	160.	0.77834	209.	1.11626	258.	1.44368
14.	0.133E-03	63.	0.11147	112.	0.43622	161.	0.78537	210.	1.12303	259.	1.45028
15.	0.188E-03	64.	0.11686	113.	0.44339	162.	0.79238	211.	1.12981	260.	1.45687
16.	0.260E-03	65.	0.12235	114.	0.45056	163.	0.79940	212.	1.13657	261.	1.46346
17.	0.352E-03	66.	0.12793	115.	0.45773	164.	0.80640	213.	1.14333	262.	1.47005
18.	0.469E-03	67.	0.13359	116.	0.46490	165.	0.81340	214.	1.15009	263.	1.47664
19.	0.614E-03	68.	0.13934	117.	0.47208	166.	0.82040	215.	1.15684	264.	1.48322
20.	0.793E-03	69.	0.14516	118.	0.47925	167.	0.82739	216.	1.16359	265.	1.48980
21.	0.101E-02	70.	0.15107	119.	0.48643	168.	0.83437	217.	1.17034	266.	1.49638
22.	0.128E-02	71.	0.15705	120.	0.49361	169.	0.84135	218.	1.17708	267.	1.50295
23.	0.159E-02	72.	0.16310	121.	0.50079	170.	0.84832	219.	1.18382	268.	1.50953
24.	0.196E-02	73.	0.16921	122.	0.50796	171.	0.85529	220.	1.19055	269.	1.51610
25.	0.240E-02	74.	0.17539	123.	0.51514	172.	0.86225	221.	1.19728	270.	1.52266
26.	0.291E-02	75.	0.18163	124.	0.52232	173.	0.86921	222.	1.20400	271.	1.52923
27.	0.350E-02	76.	0.18793	125.	0.52949	174.	0.87616	223.	1.21072	272.	1.53579
28.	0.418E-02	77.	0.19429	126.	0.53667	175.	0.88311	224.	1.21744	273.	1.54235
29.	0.495E-02	78.	0.20069	127.	0.54384	176.	0.89005	225.	1.22415	274.	1.54890
30.	0.582E-02	79.	0.20715	128.	0.55101	177.	0.89698	226.	1.23086	275.	1.55546
31.	0.680E-02	80.	0.21366	129.	0.55817	178.	0.90391	227.	1.23757	276.	1.56201
32.	0.790E-02	81.	0.22021	130.	0.56534	179.	0.91084	228.	1.24427	277.	1.56856
33.	0.911E-02	82.	0.22681	131.	0.57250	180.	0.91776	229.	1.25096	278.	1.57510
34.	0.105E-01	83.	0.23344	132.	0.57966	181.	0.92467	230.	1.25766	279.	1.58165
35.	0.119E-01	84.	0.24012	133.	0.58681	182.	0.93158	231.	1.26435	280.	1.58819
36.	0.135E-01	85.	0.24683	134.	0.59397	183.	0.93849	232.	1.27103	281.	1.59472
37.	0.153E-01	86.	0.25357	135.	0.60111	184.	0.94539	233.	1.27772	282.	1.60126
38.	0.172E-01	87.	0.26035	136.	0.60826	185.	0.95228	234.	1.28440	283.	1.60779
39.	0.192E-01	88.	0.26716	137.	0.61540	186.	0.95917	235.	1.29107	284.	1.61433
40.	0.214E-01	89.	0.27400	138.	0.62254	187.	0.96605	236.	1.29774	285.	1.62085
41.	0.237E-01	90.	0.28087	139.	0.62967	188.	0.97293	237.	1.30441	286.	1.62738
42.	0.262E-01	91.	0.28776	140.	0.63680	189.	0.97980	238.	1.31108	287.	1.63390
43.	0.289E-01	92.	0.29467	141.	0.64392	190.	0.98667	239.	1.31774	288.	1.64043
44.	0.317E-01	93.	0.30161	142.	0.65104	191.	0.99354	240.	1.32440	289.	1.64695
45.	0.346E-01	94.	0.30857	143.	0.65816	192.	1.00039	241.	1.33105	290.	1.65346
46.	0.377E-01	95.	0.31555	144.	0.66527	193.	1.00725	242.	1.33770	291.	1.65998
47.	0.410E-01	96.	0.32255	145.	0.67237	194.	1.01410	243.	1.34435	292.	1.66649
48.	0.444E-01	97.	0.32957	146.	0.67947	195.	1.02094	244.	1.35099	293.	1.67300
49.	0.479E-01	98.	0.33660	147.	0.68657	196.	1.02778	245.	1.35764	294.	1.67951
50.	0.516E-01	99.	0.34365	148.	0.69366	197.	1.03461	246.	1.36427	295.	1.68602
51.	0.555E-01	100.	0.35071	149.	0.70075	198.	1.04144	247.	1.37091	296.	1.69252
52.	0.594E-01	101.	0.35779	150.	0.70783	199.	1.04827	248.	1.37754	297.	1.69902
53.	0.635E-01	102.	0.36488	151.	0.71490	200.	1.05509	249.	1.38417	298.	1.70552
54.	0.678E-01	103.	0.37197	152.	0.72197	201.	1.06190	250.	1.39079	299.	1.71202

Tabelle C.5:

Ber. spezifischer el. Widerstand von Cu ohne zus. XC-Abschirmung											
T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ	T	ρ
18.	0.00007	65.	0.11297	112.	0.40984	159.	0.73726	206.	1.06136	253.	1.37878
19.	0.00011	66.	0.11819	113.	0.41673	160.	0.74422	207.	1.06818	254.	1.38547
20.	0.00018	67.	0.12350	114.	0.42363	161.	0.75118	208.	1.07500	255.	1.39216
21.	0.00027	68.	0.12887	115.	0.43054	162.	0.75814	209.	1.08182	256.	1.39884
22.	0.00040	69.	0.13433	116.	0.43745	163.	0.76509	210.	1.08863	257.	1.40552
23.	0.00057	70.	0.13985	117.	0.44437	164.	0.77204	211.	1.09544	258.	1.41220
24.	0.00080	71.	0.14545	118.	0.45130	165.	0.77899	212.	1.10224	259.	1.41887
25.	0.00108	72.	0.15111	119.	0.45824	166.	0.78594	213.	1.10905	260.	1.42554
26.	0.00143	73.	0.15684	120.	0.46518	167.	0.79288	214.	1.11585	261.	1.43221
27.	0.00187	74.	0.16262	121.	0.47213	168.	0.79982	215.	1.12265	262.	1.43888
28.	0.00239	75.	0.16847	122.	0.47908	169.	0.80676	216.	1.12944	263.	1.44555
29.	0.00300	76.	0.17437	123.	0.48603	170.	0.81369	217.	1.13623	264.	1.45221
30.	0.00372	77.	0.18033	124.	0.49300	171.	0.82063	218.	1.14302	265.	1.45887
31.	0.00455	78.	0.18634	125.	0.49996	172.	0.82756	219.	1.14980	266.	1.46553
32.	0.00550	79.	0.19240	126.	0.50693	173.	0.83448	220.	1.15658	267.	1.47218
33.	0.00658	80.	0.19850	127.	0.51390	174.	0.84141	221.	1.16336	268.	1.47884
34.	0.00778	81.	0.20466	128.	0.52087	175.	0.84833	222.	1.17014	269.	1.48549
35.	0.00912	82.	0.21085	129.	0.52785	176.	0.85525	223.	1.17691	270.	1.49213
36.	0.01060	83.	0.21709	130.	0.53482	177.	0.86216	224.	1.18368	271.	1.49878
37.	0.01221	84.	0.22337	131.	0.54180	178.	0.86908	225.	1.19045	272.	1.50542
38.	0.01398	85.	0.22968	132.	0.54879	179.	0.87598	226.	1.19721	273.	1.51207
39.	0.01589	86.	0.23604	133.	0.55577	180.	0.88289	227.	1.20398	274.	1.51871
40.	0.01794	87.	0.24243	134.	0.56275	181.	0.88979	228.	1.21073	275.	1.52534
41.	0.02015	88.	0.24885	135.	0.56974	182.	0.89669	229.	1.21749	276.	1.53198
42.	0.02250	89.	0.25530	136.	0.57672	183.	0.90359	230.	1.22424	277.	1.53861
43.	0.02500	90.	0.26178	137.	0.58371	184.	0.91049	231.	1.23099	278.	1.54524
44.	0.02764	91.	0.26830	138.	0.59070	185.	0.91738	232.	1.23774	279.	1.55187
45.	0.03044	92.	0.27484	139.	0.59769	186.	0.92426	233.	1.24448	280.	1.55849
46.	0.03337	93.	0.28141	140.	0.60467	187.	0.93115	234.	1.25122	281.	1.56512
47.	0.03645	94.	0.28800	141.	0.61166	188.	0.93803	235.	1.25796	282.	1.57174
48.	0.03967	95.	0.29462	142.	0.61865	189.	0.94491	236.	1.26470	283.	1.57836
49.	0.04303	96.	0.30126	143.	0.62564	190.	0.95179	237.	1.27143	284.	1.58498
50.	0.04652	97.	0.30792	144.	0.63262	191.	0.95866	238.	1.27816	285.	1.59159
51.	0.05014	98.	0.31460	145.	0.63961	192.	0.96553	239.	1.28489	286.	1.59821
52.	0.05389	99.	0.32130	146.	0.64659	193.	0.97239	240.	1.29161	287.	1.60482
53.	0.05777	100.	0.32802	147.	0.65358	194.	0.97925	241.	1.29833	288.	1.61143
54.	0.06178	101.	0.33476	148.	0.66056	195.	0.98611	242.	1.30505	289.	1.61803
55.	0.06590	102.	0.34152	149.	0.66754	196.	0.99297	243.	1.31177	290.	1.62464
56.	0.07014	103.	0.34829	150.	0.67452	197.	0.99982	244.	1.31848	291.	1.63124
57.	0.07449	104.	0.35508	151.	0.68150	198.	1.00667	245.	1.32519	292.	1.63784
58.	0.07895	105.	0.36188	152.	0.68847	199.	1.01352	246.	1.33190	293.	1.64444
59.	0.08352	106.	0.36870	153.	0.69545	200.	1.02036	247.	1.33861	294.	1.65104
60.	0.08819	107.	0.37552	154.	0.70242	201.	1.02721	248.	1.34531	295.	1.65763
61.	0.09296	108.	0.38236	155.	0.70939	202.	1.03404	249.	1.35201	296.	1.66422
62.	0.09783	109.	0.38922	156.	0.71636	203.	1.04088	250.	1.35871	297.	1.67081
63.	0.10279	110.	0.39608	157.	0.72333	204.	1.04771	251.	1.36540	298.	1.67740
64.	0.10784	111.	0.40295	158.	0.73030	205.	1.05454	252.	1.37209	299.	1.68399
65.	0.11297	112.	0.40984	159.	0.73726	206.	1.06136	253.	1.37878	300.	1.69058

Tabelle C.6:

Doppellogarithmische Ableitung des spezifischen el. Widerstandes von Cu bis 300K											
T	n	T	n	T	n	T	n	T	n	T	n
18.5	6.6209	64.5	2.9767	110.5	1.8927	156.5	1.5104	202.5	1.3312	248.5	1.2326
19.5	6.6066	65.5	2.9350	111.5	1.8803	157.5	1.5050	203.5	1.3284	249.5	1.2310
20.5	6.6388	66.5	2.8946	112.5	1.8680	158.5	1.4998	204.5	1.3257	250.5	1.2294
21.5	6.6622	67.5	2.8555	113.5	1.8561	159.5	1.4946	205.5	1.3230	251.5	1.2278
22.5	6.6566	68.5	2.8175	114.5	1.8444	160.5	1.4895	206.5	1.3203	252.5	1.2262
23.5	6.6177	69.5	2.7808	115.5	1.8329	161.5	1.4845	207.5	1.3177	253.5	1.2247
24.5	6.5490	70.5	2.7452	116.5	1.8217	162.5	1.4796	208.5	1.3151	254.5	1.2231
25.5	6.4562	71.5	2.7106	117.5	1.8107	163.5	1.4747	209.5	1.3125	255.5	1.2216
26.5	6.3455	72.5	2.6771	118.5	1.7999	164.5	1.4699	210.5	1.3100	256.5	1.2201
27.5	6.2223	73.5	2.6446	119.5	1.7894	165.5	1.4652	211.5	1.3075	257.5	1.2186
28.5	6.0911	74.5	2.6130	120.5	1.7790	166.5	1.4606	212.5	1.3050	258.5	1.2171
29.5	5.9555	75.5	2.5824	121.5	1.7689	167.5	1.4560	213.5	1.3025	259.5	1.2157
30.5	5.8182	76.5	2.5526	122.5	1.7589	168.5	1.4515	214.5	1.3001	260.5	1.2142
31.5	5.6812	77.5	2.5237	123.5	1.7492	169.5	1.4471	215.5	1.2977	261.5	1.2128
32.5	5.5457	78.5	2.4956	124.5	1.7396	170.5	1.4427	216.5	1.2954	262.5	1.2114
33.5	5.4130	79.5	2.4683	125.5	1.7303	171.5	1.4384	217.5	1.2930	263.5	1.2100
34.5	5.2835	80.5	2.4417	126.5	1.7211	172.5	1.4342	218.5	1.2907	264.5	1.2086
35.5	5.1578	81.5	2.4158	127.5	1.7121	173.5	1.4300	219.5	1.2885	265.5	1.2072
36.5	5.0362	82.5	2.3907	128.5	1.7032	174.5	1.4259	220.5	1.2862	266.5	1.2058
37.5	4.9187	83.5	2.3662	129.5	1.6945	175.5	1.4218	221.5	1.2840	267.5	1.2045
38.5	4.8054	84.5	2.3424	130.5	1.6860	176.5	1.4178	222.5	1.2818	268.5	1.2031
39.5	4.6963	85.5	2.3192	131.5	1.6776	177.5	1.4139	223.5	1.2796	269.5	1.2018
40.5	4.5913	86.5	2.2967	132.5	1.6694	178.5	1.4100	224.5	1.2775	270.5	1.2005
41.5	4.4904	87.5	2.2747	133.5	1.6614	179.5	1.4062	225.5	1.2754	271.5	1.1992
42.5	4.3933	88.5	2.2532	134.5	1.6535	180.5	1.4024	226.5	1.2733	272.5	1.1979
43.5	4.3000	89.5	2.2323	135.5	1.6457	181.5	1.3987	227.5	1.2712	273.5	1.1967
44.5	4.2104	90.5	2.2120	136.5	1.6381	182.5	1.3950	228.5	1.2691	274.5	1.1954
45.5	4.1242	91.5	2.1921	137.5	1.6306	183.5	1.3914	229.5	1.2671	275.5	1.1941
46.5	4.0414	92.5	2.1728	138.5	1.6232	184.5	1.3878	230.5	1.2651	276.5	1.1929
47.5	3.9617	93.5	2.1539	139.5	1.6160	185.5	1.3843	231.5	1.2631	277.5	1.1917
48.5	3.8851	94.5	2.1355	140.5	1.6089	186.5	1.3808	232.5	1.2612	278.5	1.1905
49.5	3.8114	95.5	2.1175	141.5	1.6019	187.5	1.3774	233.5	1.2592	279.5	1.1893
50.5	3.7404	96.5	2.1000	142.5	1.5951	188.5	1.3740	234.5	1.2573	280.5	1.1881
51.5	3.6722	97.5	2.0828	143.5	1.5883	189.5	1.3707	235.5	1.2554	281.5	1.1869
52.5	3.6064	98.5	2.0661	144.5	1.5817	190.5	1.3674	236.5	1.2536	282.5	1.1857
53.5	3.5430	99.5	2.0498	145.5	1.5752	191.5	1.3642	237.5	1.2517	283.5	1.1846
54.5	3.4820	100.5	2.0338	146.5	1.5688	192.5	1.3610	238.5	1.2499	284.5	1.1834
55.5	3.4231	101.5	2.0182	147.5	1.5625	193.5	1.3578	239.5	1.2481	285.5	1.1823
56.5	3.3663	102.5	2.0030	148.5	1.5563	194.5	1.3547	240.5	1.2463	286.5	1.1812
57.5	3.3115	103.5	1.9881	149.5	1.5503	195.5	1.3516	241.5	1.2445	287.5	1.1801
58.5	3.2586	104.5	1.9736	150.5	1.5443	196.5	1.3486	242.5	1.2428	288.5	1.1790
59.5	3.2075	105.5	1.9593	151.5	1.5384	197.5	1.3456	243.5	1.2410	289.5	1.1779
60.5	3.1582	106.5	1.9454	152.5	1.5326	198.5	1.3426	244.5	1.2393	290.5	1.1768
61.5	3.1105	107.5	1.9318	153.5	1.5269	199.5	1.3397	245.5	1.2376	291.5	1.1757
62.5	3.0644	108.5	1.9185	154.5	1.5213	200.5	1.3368	246.5	1.2359	292.5	1.1746
63.5	3.0199	109.5	1.9055	155.5	1.5158	201.5	1.3340	247.5	1.2343	293.5	1.1736
64.5	2.9767	110.5	1.8927	156.5	1.5104	202.5	1.3312	248.5	1.2326	294.5	1.1725

Tabelle C.7:

Doppeltl. Ableitung des spez. el. Widerstandes von Cu (Dugdale, B-Spline-interpoliert)											
T	n	T	n	T	n	T	n	T	n	T	n
14.5	2.7102	61.5	3.1241	108.5	1.8931	155.5	1.4604	202.5	1.2511	249.5	1.2230
15.5	3.8434	62.5	3.0824	109.5	1.8745	156.5	1.4548	203.5	1.2490	250.5	1.2208
16.5	4.6433	63.5	3.0451	110.5	1.8556	157.5	1.4497	204.5	1.2476	251.5	1.2186
17.5	5.1125	64.5	3.0117	111.5	1.8374	158.5	1.4451	205.5	1.2468	252.5	1.2164
18.5	5.3361	65.5	2.9816	112.5	1.8210	159.5	1.4409	206.5	1.2467	253.5	1.2143
19.5	5.4045	66.5	2.9545	113.5	1.8064	160.5	1.4371	207.5	1.2472	254.5	1.2123
20.5	5.3840	67.5	2.9270	114.5	1.7935	161.5	1.4338	208.5	1.2483	255.5	1.2103
21.5	5.3163	68.5	2.8967	115.5	1.7822	162.5	1.4309	209.5	1.2494	256.5	1.2084
22.5	5.2259	69.5	2.8639	116.5	1.7725	163.5	1.4284	210.5	1.2504	257.5	1.2065
23.5	5.1285	70.5	2.8288	117.5	1.7642	164.5	1.4263	211.5	1.2513	258.5	1.2046
24.5	5.0461	71.5	2.7920	118.5	1.7563	165.5	1.4246	212.5	1.2521	259.5	1.2029
25.5	4.9799	72.5	2.7534	119.5	1.7483	166.5	1.4233	213.5	1.2528	260.5	1.2011
26.5	4.9225	73.5	2.7135	120.5	1.7402	167.5	1.4224	214.5	1.2535	261.5	1.1994
27.5	4.8700	74.5	2.6735	121.5	1.7321	168.5	1.4218	215.5	1.2540	262.5	1.1978
28.5	4.8204	75.5	2.6353	122.5	1.7239	169.5	1.4217	216.5	1.2545	263.5	1.1962
29.5	4.7724	76.5	2.5988	123.5	1.7156	170.5	1.4218	217.5	1.2548	264.5	1.1947
30.5	4.7258	77.5	2.5639	124.5	1.7073	171.5	1.4224	218.5	1.2551	265.5	1.1932
31.5	4.6790	78.5	2.5304	125.5	1.6989	172.5	1.4233	219.5	1.2553	266.5	1.1917
32.5	4.6283	79.5	2.4984	126.5	1.6905	173.5	1.4245	220.5	1.2554	267.5	1.1903
33.5	4.5750	80.5	2.4675	127.5	1.6819	174.5	1.4261	221.5	1.2554	268.5	1.1890
34.5	4.5211	81.5	2.4378	128.5	1.6734	175.5	1.4280	222.5	1.2553	269.5	1.1877
35.5	4.4678	82.5	2.4091	129.5	1.6647	176.5	1.4295	223.5	1.2551	270.5	1.1864
36.5	4.4157	83.5	2.3814	130.5	1.6560	177.5	1.4298	224.5	1.2549	271.5	1.1852
37.5	4.3624	84.5	2.3546	131.5	1.6472	178.5	1.4288	225.5	1.2545	272.5	1.1841
38.5	4.3047	85.5	2.3288	132.5	1.6384	179.5	1.4266	226.5	1.2541	273.5	1.1829
39.5	4.2446	86.5	2.3039	133.5	1.6295	180.5	1.4231	227.5	1.2536	274.5	1.1819
40.5	4.1840	87.5	2.2801	134.5	1.6207	181.5	1.4185	228.5	1.2530	275.5	1.1808
41.5	4.1240	88.5	2.2572	135.5	1.6120	182.5	1.4126	229.5	1.2524	276.5	1.1799
42.5	4.0653	89.5	2.2352	136.5	1.6035	183.5	1.4056	230.5	1.2516	277.5	1.1789
43.5	4.0092	90.5	2.2140	137.5	1.5951	184.5	1.3975	231.5	1.2508	278.5	1.1780
44.5	3.9602	91.5	2.1935	138.5	1.5867	185.5	1.3882	232.5	1.2499	279.5	1.1772
45.5	3.9188	92.5	2.1738	139.5	1.5785	186.5	1.3778	233.5	1.2489	280.5	1.1763
46.5	3.8837	93.5	2.1547	140.5	1.5704	187.5	1.3662	234.5	1.2479	281.5	1.1756
47.5	3.8536	94.5	2.1363	141.5	1.5624	188.5	1.3538	235.5	1.2467	282.5	1.1748
48.5	3.8278	95.5	2.1184	142.5	1.5545	189.5	1.3416	236.5	1.2455	283.5	1.1742
49.5	3.8028	96.5	2.1011	143.5	1.5467	190.5	1.3302	237.5	1.2442	284.5	1.1735
50.5	3.7680	97.5	2.0843	144.5	1.5390	191.5	1.3196	238.5	1.2429	285.5	1.1729
51.5	3.7230	98.5	2.0679	145.5	1.5313	192.5	1.3098	239.5	1.2414	286.5	1.1723
52.5	3.6703	99.5	2.0515	146.5	1.5238	193.5	1.3007	240.5	1.2399	287.5	1.1718
53.5	3.6119	100.5	2.0348	147.5	1.5163	194.5	1.2923	241.5	1.2383	288.5	1.1713
54.5	3.5493	101.5	2.0178	148.5	1.5089	195.5	1.2847	242.5	1.2367	289.5	1.1709
55.5	3.4837	102.5	2.0007	149.5	1.5015	196.5	1.2778	243.5	1.2349	290.5	1.1705
56.5	3.4161	103.5	1.9833	150.5	1.4942	197.5	1.2716	244.5	1.2331	291.5	1.1701
57.5	3.3472	104.5	1.9657	151.5	1.4870	198.5	1.2662	245.5	1.2312	292.5	1.1698
58.5	3.2815	105.5	1.9479	152.5	1.4798	199.5	1.2614	246.5	1.2293	293.5	1.1695
59.5	3.2229	106.5	1.9298	153.5	1.4729	200.5	1.2573	247.5	1.2273	294.5	1.1693
60.5	3.1707	107.5	1.9116	154.5	1.4664	201.5	1.2539	248.5	1.2252	295.5	1.1691
61.5	3.1241	108.5	1.8931	155.5	1.4604	202.5	1.2511	249.5	1.2230	296.5	1.1689

Tabelle C.8:

Doppeltl. Ableitung des spez. el. Widerstandes von Cu (Matula, B-Spline-interpoliert)											
T	n	T	n	T	n	T	n	T	n	T	n
20.5	4.6980	66.5	2.9576	112.5	1.8180	158.5	1.4705	204.5	1.3026	250.5	1.2180
21.5	5.0463	67.5	2.8970	113.5	1.8081	159.5	1.4652	205.5	1.3006	251.5	1.2161
22.5	5.2271	68.5	2.8349	114.5	1.7983	160.5	1.4599	206.5	1.2985	252.5	1.2144
23.5	5.2964	69.5	2.7715	115.5	1.7887	161.5	1.4548	207.5	1.2965	253.5	1.2127
24.5	5.2961	70.5	2.7085	116.5	1.7791	162.5	1.4497	208.5	1.2946	254.5	1.2111
25.5	5.2515	71.5	2.6516	117.5	1.7696	163.5	1.4447	209.5	1.2926	255.5	1.2096
26.5	5.1722	72.5	2.6017	118.5	1.7602	164.5	1.4398	210.5	1.2907	256.5	1.2083
27.5	5.0745	73.5	2.5579	119.5	1.7509	165.5	1.4349	211.5	1.2887	257.5	1.2070
28.5	4.9702	74.5	2.5198	120.5	1.7417	166.5	1.4301	212.5	1.2868	258.5	1.2058
29.5	4.8659	75.5	2.4867	121.5	1.7325	167.5	1.4253	213.5	1.2850	259.5	1.2048
30.5	4.7636	76.5	2.4584	122.5	1.7234	168.5	1.4206	214.5	1.2831	260.5	1.2038
31.5	4.6604	77.5	2.4343	123.5	1.7143	169.5	1.4160	215.5	1.2813	261.5	1.2029
32.5	4.5587	78.5	2.4141	124.5	1.7053	170.5	1.4114	216.5	1.2794	262.5	1.2022
33.5	4.4609	79.5	2.3976	125.5	1.6964	171.5	1.4069	217.5	1.2776	263.5	1.2015
34.5	4.3682	80.5	2.3834	126.5	1.6877	172.5	1.4024	218.5	1.2759	264.5	1.2009
35.5	4.2780	81.5	2.3678	127.5	1.6791	173.5	1.3980	219.5	1.2741	265.5	1.2004
36.5	4.1804	82.5	2.3499	128.5	1.6706	174.5	1.3936	220.5	1.2724	266.5	1.2000
37.5	4.0773	83.5	2.3300	129.5	1.6624	175.5	1.3893	221.5	1.2706	267.5	1.1997
38.5	3.9722	84.5	2.3081	130.5	1.6543	176.5	1.3850	222.5	1.2689	268.5	1.1995
39.5	3.8675	85.5	2.2845	131.5	1.6463	177.5	1.3809	223.5	1.2672	269.5	1.1994
40.5	3.7705	86.5	2.2592	132.5	1.6385	178.5	1.3769	224.5	1.2655	270.5	1.1994
41.5	3.7023	87.5	2.2324	133.5	1.6308	179.5	1.3730	225.5	1.2639	271.5	1.1995
42.5	3.6615	88.5	2.2042	134.5	1.6232	180.5	1.3692	226.5	1.2622	272.5	1.1997
43.5	3.6419	89.5	2.1746	135.5	1.6157	181.5	1.3655	227.5	1.2605	273.5	1.1999
44.5	3.6387	90.5	2.1443	136.5	1.6084	182.5	1.3618	228.5	1.2588	274.5	1.2001
45.5	3.6471	91.5	2.1159	137.5	1.6012	183.5	1.3583	229.5	1.2571	275.5	1.2002
46.5	3.6607	92.5	2.0897	138.5	1.5941	184.5	1.3549	230.5	1.2553	276.5	1.2002
47.5	3.6771	93.5	2.0656	139.5	1.5871	185.5	1.3515	231.5	1.2536	277.5	1.2002
48.5	3.6955	94.5	2.0436	140.5	1.5802	186.5	1.3483	232.5	1.2518	278.5	1.2000
49.5	3.7150	95.5	2.0235	141.5	1.5734	187.5	1.3451	233.5	1.2501	279.5	1.1998
50.5	3.7301	96.5	2.0052	142.5	1.5667	188.5	1.3420	234.5	1.2483	280.5	1.1995
51.5	3.7227	97.5	1.9886	143.5	1.5600	189.5	1.3390	235.5	1.2465	281.5	1.1991
52.5	3.6930	98.5	1.9735	144.5	1.5535	190.5	1.3361	236.5	1.2447	282.5	1.1987
53.5	3.6459	99.5	1.9600	145.5	1.5470	191.5	1.3332	237.5	1.2429	283.5	1.1981
54.5	3.5851	100.5	1.9478	146.5	1.5407	192.5	1.3305	238.5	1.2410	284.5	1.1975
55.5	3.5167	101.5	1.9359	147.5	1.5344	193.5	1.3278	239.5	1.2392	285.5	1.1968
56.5	3.4539	102.5	1.9243	148.5	1.5281	194.5	1.3252	240.5	1.2373	286.5	1.1960
57.5	3.3989	103.5	1.9129	149.5	1.5220	195.5	1.3226	241.5	1.2355	287.5	1.1951
58.5	3.3505	104.5	1.9017	150.5	1.5159	196.5	1.3202	242.5	1.2336	288.5	1.1942
59.5	3.3080	105.5	1.8907	151.5	1.5099	197.5	1.3178	243.5	1.2317	289.5	1.1932
60.5	3.2688	106.5	1.8799	152.5	1.5040	198.5	1.3155	244.5	1.2298	290.5	1.1920
61.5	3.2259	107.5	1.8692	153.5	1.4982	199.5	1.3132	245.5	1.2278	291.5	1.1909
62.5	3.1785	108.5	1.8587	154.5	1.4925	200.5	1.3111	246.5	1.2259	292.5	1.1896
63.5	3.1274	109.5	1.8483	155.5	1.4868	201.5	1.3089	247.5	1.2239	293.5	1.1883
64.5	3.0731	110.5	1.8381	156.5	1.4813	202.5	1.3068	248.5	1.2220	294.5	1.1869
65.5	3.0164	111.5	1.8279	157.5	1.4758	203.5	1.3047	249.5	1.2200	295.5	1.1854
66.5	2.9576	112.5	1.8180	158.5	1.4705	204.5	1.3026	250.5	1.2180	296.5	1.1838

Tabelle C.9:

Doppeltl. Ableitung des spez. el. Widerstandes von Cu (Bloch)											
T	n	T	n	T	n	T	n	T	n	T	n
5.5	5.0000	54.5	3.4101	103.5	1.9592	152.5	1.4851	201.5	1.2882	250.5	1.1898
6.5	5.0000	55.5	3.3602	104.5	1.9439	153.5	1.4793	202.5	1.2855	251.5	1.1884
7.5	5.0000	56.5	3.3114	105.5	1.9289	154.5	1.4736	203.5	1.2829	252.5	1.1869
8.5	5.0000	57.5	3.2637	106.5	1.9143	155.5	1.4681	204.5	1.2802	253.5	1.1855
9.5	5.0000	58.5	3.2170	107.5	1.9000	156.5	1.4626	205.5	1.2776	254.5	1.1841
10.5	5.0000	59.5	3.1714	108.5	1.8860	157.5	1.4572	206.5	1.2751	255.5	1.1827
11.5	5.0000	60.5	3.1268	109.5	1.8723	158.5	1.4519	207.5	1.2726	256.5	1.1813
12.5	5.0000	61.5	3.0833	110.5	1.8589	159.5	1.4467	208.5	1.2701	257.5	1.1800
13.5	5.0000	62.5	3.0408	111.5	1.8458	160.5	1.4416	209.5	1.2676	258.5	1.1786
14.5	4.9999	63.5	2.9993	112.5	1.8330	161.5	1.4365	210.5	1.2652	259.5	1.1773
15.5	4.9996	64.5	2.9588	113.5	1.8204	162.5	1.4316	211.5	1.2628	260.5	1.1760
16.5	4.9990	65.5	2.9193	114.5	1.8082	163.5	1.4267	212.5	1.2605	261.5	1.1747
17.5	4.9979	66.5	2.8808	115.5	1.7961	164.5	1.4219	213.5	1.2581	262.5	1.1734
18.5	4.9958	67.5	2.8432	116.5	1.7844	165.5	1.4172	214.5	1.2558	263.5	1.1721
19.5	4.9923	68.5	2.8065	117.5	1.7728	166.5	1.4125	215.5	1.2536	264.5	1.1709
20.5	4.9869	69.5	2.7708	118.5	1.7616	167.5	1.4080	216.5	1.2513	265.5	1.1696
21.5	4.9790	70.5	2.7359	119.5	1.7505	168.5	1.4035	217.5	1.2491	266.5	1.1684
22.5	4.9682	71.5	2.7019	120.5	1.7397	169.5	1.3991	218.5	1.2470	267.5	1.1672
23.5	4.9540	72.5	2.6687	121.5	1.7291	170.5	1.3947	219.5	1.2448	268.5	1.1660
24.5	4.9361	73.5	2.6364	122.5	1.7187	171.5	1.3904	220.5	1.2427	269.5	1.1648
25.5	4.9141	74.5	2.6048	123.5	1.7085	172.5	1.3862	221.5	1.2406	270.5	1.1636
26.5	4.8880	75.5	2.5741	124.5	1.6985	173.5	1.3821	222.5	1.2385	271.5	1.1624
27.5	4.8577	76.5	2.5441	125.5	1.6888	174.5	1.3780	223.5	1.2365	272.5	1.1613
28.5	4.8234	77.5	2.5148	126.5	1.6792	175.5	1.3740	224.5	1.2345	273.5	1.1601
29.5	4.7852	78.5	2.4863	127.5	1.6698	176.5	1.3700	225.5	1.2325	274.5	1.1590
30.5	4.7435	79.5	2.4585	128.5	1.6606	177.5	1.3661	226.5	1.2305	275.5	1.1579
31.5	4.6983	80.5	2.4314	129.5	1.6516	178.5	1.3623	227.5	1.2286	276.5	1.1567
32.5	4.6503	81.5	2.4049	130.5	1.6428	179.5	1.3585	228.5	1.2266	277.5	1.1557
33.5	4.5996	82.5	2.3791	131.5	1.6341	180.5	1.3548	229.5	1.2248	278.5	1.1546
34.5	4.5466	83.5	2.3539	132.5	1.6256	181.5	1.3511	230.5	1.2229	279.5	1.1535
35.5	4.4918	84.5	2.3293	133.5	1.6172	182.5	1.3475	231.5	1.2210	280.5	1.1524
36.5	4.4353	85.5	2.3054	134.5	1.6090	183.5	1.3440	232.5	1.2192	281.5	1.1514
37.5	4.3777	86.5	2.2820	135.5	1.6010	184.5	1.3405	233.5	1.2174	282.5	1.1503
38.5	4.3191	87.5	2.2592	136.5	1.5931	185.5	1.3370	234.5	1.2156	283.5	1.1493
39.5	4.2599	88.5	2.2369	137.5	1.5854	186.5	1.3336	235.5	1.2139	284.5	1.1483
40.5	4.2003	89.5	2.2151	138.5	1.5778	187.5	1.3303	236.5	1.2121	285.5	1.1473
41.5	4.1404	90.5	2.1939	139.5	1.5704	188.5	1.3270	237.5	1.2104	286.5	1.1463
42.5	4.0806	91.5	2.1732	140.5	1.5631	189.5	1.3238	238.5	1.2087	287.5	1.1453
43.5	4.0210	92.5	2.1530	141.5	1.5559	190.5	1.3206	239.5	1.2070	288.5	1.1443
44.5	3.9618	93.5	2.1332	142.5	1.5489	191.5	1.3174	240.5	1.2054	289.5	1.1433
45.5	3.9030	94.5	2.1139	143.5	1.5420	192.5	1.3143	241.5	1.2037	290.5	1.1424
46.5	3.8448	95.5	2.0951	144.5	1.5352	193.5	1.3112	242.5	1.2021	291.5	1.1414
47.5	3.7874	96.5	2.0767	145.5	1.5285	194.5	1.3082	243.5	1.2005	292.5	1.1405
48.5	3.7307	97.5	2.0587	146.5	1.5220	195.5	1.3052	244.5	1.1989	293.5	1.1395
49.5	3.6749	98.5	2.0412	147.5	1.5156	196.5	1.3023	245.5	1.1974	294.5	1.1386
50.5	3.6199	99.5	2.0240	148.5	1.5093	197.5	1.2994	246.5	1.1958	295.5	1.1377
51.5	3.5660	100.5	2.0073	149.5	1.5031	198.5	1.2965	247.5	1.1943	296.5	1.1368
52.5	3.5130	101.5	1.9909	150.5	1.4970	199.5	1.2937	248.5	1.1928	297.5	1.1359
53.5	3.4610	102.5	1.9749	151.5	1.4910	200.5	1.2909	249.5	1.1913	298.5	1.1350
54.5	3.4101	103.5	1.9592	152.5	1.4851	201.5	1.2882	250.5	1.1898	299.5	1.1341

Tabelle C.10:

Doppeltl. Ableitung des spez. el. Widerstandes von Cu ohne zus. XC-Abschirmung											
T	n	T	n	T	n	T	n	T	n	T	n
18.5	9.6122	64.5	3.0017	110.5	1.9010	156.5	1.5148	202.5	1.3340	248.5	1.2346
19.5	9.1040	65.5	2.9590	111.5	1.8884	157.5	1.5094	203.5	1.3312	249.5	1.2329
20.5	8.6990	66.5	2.9178	112.5	1.8761	158.5	1.5041	204.5	1.3284	250.5	1.2313
21.5	8.3521	67.5	2.8779	113.5	1.8640	159.5	1.4989	205.5	1.3257	251.5	1.2297
22.5	8.0404	68.5	2.8392	114.5	1.8522	160.5	1.4937	206.5	1.3230	252.5	1.2281
23.5	7.7524	69.5	2.8018	115.5	1.8406	161.5	1.4887	207.5	1.3203	253.5	1.2266
24.5	7.4827	70.5	2.7655	116.5	1.8292	162.5	1.4837	208.5	1.3177	254.5	1.2250
25.5	7.2284	71.5	2.7303	117.5	1.8181	163.5	1.4788	209.5	1.3151	255.5	1.2235
26.5	6.9881	72.5	2.6962	118.5	1.8072	164.5	1.4740	210.5	1.3126	256.5	1.2219
27.5	6.7608	73.5	2.6632	119.5	1.7966	165.5	1.4692	211.5	1.3100	257.5	1.2204
28.5	6.5457	74.5	2.6311	120.5	1.7861	166.5	1.4645	212.5	1.3075	258.5	1.2189
29.5	6.3421	75.5	2.5999	121.5	1.7759	167.5	1.4599	213.5	1.3051	259.5	1.2175
30.5	6.1494	76.5	2.5696	122.5	1.7658	168.5	1.4554	214.5	1.3026	260.5	1.2160
31.5	5.9668	77.5	2.5403	123.5	1.7560	169.5	1.4509	215.5	1.3002	261.5	1.2146
32.5	5.7940	78.5	2.5117	124.5	1.7463	170.5	1.4465	216.5	1.2978	262.5	1.2131
33.5	5.6301	79.5	2.4840	125.5	1.7368	171.5	1.4422	217.5	1.2955	263.5	1.2117
34.5	5.4747	80.5	2.4570	126.5	1.7276	172.5	1.4379	218.5	1.2932	264.5	1.2103
35.5	5.3272	81.5	2.4308	127.5	1.7184	173.5	1.4337	219.5	1.2909	265.5	1.2089
36.5	5.1870	82.5	2.4053	128.5	1.7095	174.5	1.4295	220.5	1.2886	266.5	1.2075
37.5	5.0539	83.5	2.3805	129.5	1.7007	175.5	1.4254	221.5	1.2864	267.5	1.2062
38.5	4.9272	84.5	2.3563	130.5	1.6921	176.5	1.4214	222.5	1.2842	268.5	1.2048
39.5	4.8065	85.5	2.3328	131.5	1.6837	177.5	1.4174	223.5	1.2820	269.5	1.2035
40.5	4.6916	86.5	2.3099	132.5	1.6754	178.5	1.4135	224.5	1.2798	270.5	1.2022
41.5	4.5820	87.5	2.2876	133.5	1.6673	179.5	1.4096	225.5	1.2777	271.5	1.2009
42.5	4.4774	88.5	2.2659	134.5	1.6593	180.5	1.4058	226.5	1.2755	272.5	1.1996
43.5	4.3775	89.5	2.2447	135.5	1.6514	181.5	1.4021	227.5	1.2735	273.5	1.1983
44.5	4.2820	90.5	2.2241	136.5	1.6437	182.5	1.3984	228.5	1.2714	274.5	1.1970
45.5	4.1906	91.5	2.2040	137.5	1.6362	183.5	1.3947	229.5	1.2693	275.5	1.1958
46.5	4.1032	92.5	2.1844	138.5	1.6287	184.5	1.3911	230.5	1.2673	276.5	1.1945
47.5	4.0194	93.5	2.1653	139.5	1.6214	185.5	1.3876	231.5	1.2653	277.5	1.1933
48.5	3.9391	94.5	2.1466	140.5	1.6143	186.5	1.3841	232.5	1.2634	278.5	1.1921
49.5	3.8621	95.5	2.1284	141.5	1.6072	187.5	1.3806	233.5	1.2614	279.5	1.1908
50.5	3.7882	96.5	2.1107	142.5	1.6003	188.5	1.3772	234.5	1.2595	280.5	1.1896
51.5	3.7172	97.5	2.0933	143.5	1.5935	189.5	1.3738	235.5	1.2576	281.5	1.1885
52.5	3.6490	98.5	2.0764	144.5	1.5868	190.5	1.3705	236.5	1.2557	282.5	1.1873
53.5	3.5834	99.5	2.0599	145.5	1.5802	191.5	1.3672	237.5	1.2538	283.5	1.1861
54.5	3.5203	100.5	2.0437	146.5	1.5738	192.5	1.3640	238.5	1.2520	284.5	1.1850
55.5	3.4596	101.5	2.0280	147.5	1.5674	193.5	1.3608	239.5	1.2501	285.5	1.1838
56.5	3.4011	102.5	2.0126	148.5	1.5612	194.5	1.3577	240.5	1.2483	286.5	1.1827
57.5	3.3447	103.5	1.9975	149.5	1.5550	195.5	1.3546	241.5	1.2466	287.5	1.1816
58.5	3.2903	104.5	1.9828	150.5	1.5490	196.5	1.3515	242.5	1.2448	288.5	1.1804
59.5	3.2379	105.5	1.9684	151.5	1.5431	197.5	1.3485	243.5	1.2430	289.5	1.1793
60.5	3.1873	106.5	1.9543	152.5	1.5372	198.5	1.3455	244.5	1.2413	290.5	1.1782
61.5	3.1385	107.5	1.9406	153.5	1.5315	199.5	1.3426	245.5	1.2396	291.5	1.1772
62.5	3.0913	108.5	1.9271	154.5	1.5258	200.5	1.3397	246.5	1.2379	292.5	1.1761
63.5	3.0457	109.5	1.9139	155.5	1.5203	201.5	1.3368	247.5	1.2362	293.5	1.1750
64.5	3.0017	110.5	1.9010	156.5	1.5148	202.5	1.3340	248.5	1.2346	294.5	1.1740

Anhang D

Phononen-Paar-Numerierung

In diesem Anhang ist die Phononen-Paar-Numerierung für die verwendeten Phononen festgelegt. Die gesamte Menge der verwendeten Phononen wird durch Hinzufügen von $-\vec{q}$ -Vektoren zu den \vec{q} -Vektoren aus der Tabelle *D.1* angegeben. Alle \vec{q} -Vektoren in der Tabelle *D.1* sind in Einheiten von $\frac{2\pi}{a}$, mit als a die Gitterkonstante.

Tabelle D.1:

Phononen-Paar-Numerierung							
Nr.	\vec{q}			Nr.	\vec{q}		
1	0.0000	0.0000	0.0000	43	0.5000	0.0000	0.5000
2	0.2500	0.0000	0.0000	44	-0.5000	0.5000	0.0000
3	0.0000	0.0000	0.2500	45	0.0000	0.5000	0.5000
4	0.0000	0.2500	0.0000	46	-0.5000	0.0000	0.5000
5	0.2500	0.2500	0.0000	47	0.0000	-0.5000	0.5000
6	0.2500	0.0000	0.2500	48	0.5000	0.5000	0.2500
7	-0.2500	0.2500	0.0000	49	0.5000	0.2500	0.5000
8	0.0000	0.2500	0.2500	50	0.2500	0.5000	0.5000
9	-0.2500	0.0000	0.2500	51	-0.5000	0.5000	0.2500
10	0.0000	-0.2500	0.2500	52	-0.5000	-0.5000	0.2500
11	0.2500	0.2500	0.2500	53	0.5000	-0.5000	0.2500
12	-0.2500	0.2500	0.2500	54	-0.2500	0.5000	0.5000
13	-0.2500	-0.2500	0.2500	55	-0.5000	-0.2500	0.5000
14	0.2500	-0.2500	0.2500	56	0.2500	-0.5000	0.5000
15	0.5000	0.0000	0.0000	57	-0.5000	0.2500	0.5000
16	0.0000	0.0000	0.5000	58	-0.2500	-0.5000	0.5000
17	0.0000	0.5000	0.0000	59	0.5000	-0.2500	0.5000
18	0.5000	0.2500	0.0000	60	0.7500	0.0000	0.0000
19	0.2500	0.5000	0.0000	61	0.0000	0.0000	0.7500
20	0.2500	0.0000	0.5000	62	0.0000	0.7500	0.0000
21	0.0000	0.5000	0.2500	63	0.7500	0.2500	0.0000
22	-0.2500	0.5000	0.0000	64	0.2500	0.7500	0.0000
23	-0.5000	0.2500	0.0000	65	0.2500	0.0000	0.7500
24	0.0000	0.2500	0.5000	66	0.0000	0.7500	0.2500
25	-0.2500	0.0000	0.5000	67	-0.2500	0.7500	0.0000
26	0.0000	-0.2500	0.5000	68	-0.7500	0.2500	0.0000
27	-0.5000	0.0000	0.2500	69	0.0000	0.2500	0.7500
28	0.0000	-0.5000	0.2500	70	-0.2500	0.0000	0.7500
29	0.5000	0.0000	0.2500	71	0.0000	-0.2500	0.7500
30	0.5000	0.2500	0.2500	72	-0.7500	0.0000	0.2500
31	0.2500	0.2500	0.5000	73	0.0000	-0.7500	0.2500
32	0.2500	0.5000	0.2500	74	0.7500	0.0000	0.2500
33	-0.2500	0.5000	0.2500	75	0.7500	0.2500	0.2500
34	-0.5000	-0.2500	0.2500	76	0.2500	0.2500	0.7500
35	0.2500	-0.5000	0.2500	77	0.2500	0.7500	0.2500
36	-0.2500	0.2500	0.5000	78	-0.2500	0.7500	0.2500
37	-0.2500	-0.2500	0.5000	79	-0.7500	-0.2500	0.2500
38	0.2500	-0.2500	0.5000	80	0.2500	-0.7500	0.2500
39	-0.5000	0.2500	0.2500	81	-0.2500	0.2500	0.7500
40	-0.2500	-0.5000	0.2500	82	-0.2500	-0.2500	0.7500
41	0.5000	-0.2500	0.2500	83	0.2500	-0.2500	0.7500
42	0.5000	0.5000	0.0000	84	-0.7500	0.2500	0.2500

Phononen-Paar-Numerierung							
Nr.	\vec{q}			Nr.	\vec{q}		
85	-0.2500	-0.7500	0.2500	129	0.0000	1.0000	0.0000
86	0.7500	-0.2500	0.2500	130	1.0000	0.2500	0.0000
87	0.5000	0.5000	0.5000	131	0.2500	1.0000	0.0000
88	-0.5000	0.5000	0.5000	132	0.2500	0.0000	1.0000
89	-0.5000	-0.5000	0.5000	133	0.0000	1.0000	0.2500
90	0.5000	-0.5000	0.5000	134	-0.2500	1.0000	0.0000
91	0.7500	0.5000	0.0000	135	-1.0000	0.2500	0.0000
92	0.5000	0.7500	0.0000	136	0.0000	0.2500	1.0000
93	0.5000	0.0000	0.7500	137	-0.2500	0.0000	1.0000
94	0.0000	0.7500	0.5000	138	0.0000	-0.2500	1.0000
95	-0.5000	0.7500	0.0000	139	-1.0000	0.0000	0.2500
96	-0.7500	0.5000	0.0000	140	0.0000	-1.0000	0.2500
97	0.0000	0.5000	0.7500	141	1.0000	0.0000	0.2500
98	-0.5000	0.0000	0.7500	142	0.7500	0.7500	0.0000
99	0.0000	-0.5000	0.7500	143	0.7500	0.0000	0.7500
100	-0.7500	0.0000	0.5000	144	-0.7500	0.7500	0.0000
101	0.0000	-0.7500	0.5000	145	0.0000	0.7500	0.7500
102	0.7500	0.0000	0.5000	146	-0.7500	0.0000	0.7500
103	0.7500	0.5000	0.2500	147	0.0000	-0.7500	0.7500
104	0.5000	0.7500	0.2500	148	1.0000	0.2500	0.2500
105	0.5000	0.2500	0.7500	149	0.2500	0.2500	1.0000
106	0.2500	0.5000	0.7500	150	0.2500	1.0000	0.2500
107	0.2500	0.7500	0.5000	151	-0.2500	1.0000	0.2500
108	0.7500	0.2500	0.5000	152	-1.0000	-0.2500	0.2500
109	-0.5000	0.7500	0.2500	153	0.2500	-1.0000	0.2500
110	-0.7500	-0.5000	0.2500	154	-0.2500	0.2500	1.0000
111	0.5000	-0.7500	0.2500	155	-0.2500	-0.2500	1.0000
112	-0.7500	0.5000	0.2500	156	0.2500	-0.2500	1.0000
113	-0.5000	-0.7500	0.2500	157	-1.0000	0.2500	0.2500
114	0.7500	-0.5000	0.2500	158	-0.2500	-1.0000	0.2500
115	-0.2500	0.5000	0.7500	159	1.0000	-0.2500	0.2500
116	-0.5000	-0.2500	0.7500	160	1.0000	0.5000	0.0000
117	0.2500	-0.5000	0.7500	161	0.5000	1.0000	0.0000
118	-0.5000	0.2500	0.7500	162	0.5000	0.0000	1.0000
119	-0.2500	-0.5000	0.7500	163	0.0000	1.0000	0.5000
120	0.5000	-0.2500	0.7500	164	-0.5000	1.0000	0.0000
121	-0.7500	0.2500	0.5000	165	-1.0000	0.5000	0.0000
122	-0.2500	-0.7500	0.5000	166	0.0000	0.5000	1.0000
123	0.7500	-0.2500	0.5000	167	-0.5000	0.0000	1.0000
124	-0.2500	0.7500	0.5000	168	0.0000	-0.5000	1.0000
125	-0.7500	-0.2500	0.5000	169	-1.0000	0.0000	0.5000
126	0.2500	-0.7500	0.5000	170	0.0000	-1.0000	0.5000
127	1.0000	0.0000	0.0000	171	1.0000	0.0000	0.5000
128	0.0000	0.0000	1.0000				

Literaturverzeichnis

- [1] A.A.ABRIKOSOV, Grundlagen der Theorie der Metalle, Nauka 1987 (in russischer Sprache)
- [2] A.A.ABRIKOSOV, L.P.GORKOV, I.E. DZJALOSCHINSKIJ, Methoden der Quantenfeldtheorie in der statistischen Physik, Nauka 1962 (in russischer Sprache)
- [3] N.W. ASHCROFT, N.D. MERMIN, Solid State Physics, Holt, Rinehart and Winston 1976
- [4] P.B. ALLEN, Phys. Rev. B15, 3725 (1978)
- [5] P.B. ALLEN, T.P. BEAULAC, F.S. KHAN, A. PELTIER, F.J. PINSKI, S. SWINHARD, Phys. Rev. B34, 4331 (1986)
- [6] J. APPEL, Z. Naturf. 12a, 410 (1957)
- [7] M. BAILYN, H. BROOKS, Bull. Am. Phys. Soc. 1, 300 (1956)
- [8] M. BAILYN, Transport in Metals: Effects of the Nonequilibrium Phonons, Phys. Rev., 112, 1587-1598 (1958)
- [9] M. BAILYN, Transport in Metals. II.: Effects of the Phonon Spectrum and Umklapp Processes at High and Low Temperatures, Phys. Rev., 120, 381-404 (1960)
- [10] M. BAILYN, Phil. Mag., 5, 1059 (1960)
- [11] M. BAILYN, Exchange and Correlation Effects in Electron-Phonon Scattering in Normal Metals, Phys. Rev., 117,974-(1960)
- [12] J. BARDEEN, Conductivity of Monovalent Metals, Phys. Rev., 52, 688-697 (1937)
- [13] H. BATEMANN, A. ERDELYI, Higher Trancendental Functions, Vol. 1, Mc Graw-Hill, 1953

- [14] H. BATEMANN, A. ERDELYI, Higher Trancendental Functions, Vol. 2, Mc Graw-Hill, 1953
- [15] H. BATEMANN, A. ERDELYI, Higher Trancendental Functions, Vol. 3, Mc Graw-Hill, 1953
- [16] T.P. BEAULAC, P.B. ALLEN, F.J. PINSKI, Phys. Rev. B26, 1549-1558 (1982)
- [17] F. BLOCH, Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern, Zeitschrift für Physik 52, 555-600, 1929
- [18] F. BLOCH, Zum elektrischen Widerstandsgesetz bei tiefen Temperaturen, Zeitschrift für Physik 59, 208-214, 1929
- [19] E. BORCHI, S. DE GENNARO, P.L. TASETTI, Low Temperature Electrical Resistivity of Noble Metals, Phys. Rev. B12, 5478-5487 (1975)
- [20] H. BROSS, Phys. Kondens. Mater. 3, 119 (1964).
- [21] H. BROSS, Die elektrische und Wärmeleitfähigkeit von Metallen und Isolatoren
- [22] H. BROSS, Theoretische Festkörperphysik I, Vorlesung an der LMU
- [23] H. BROSS, Private Kommunikation, Darstellung von Austausch-Korrelations-Funktionalen in MAPW
- [24] H. BROSS, Private Kommunikation, Allgemeines Transportproblem in Metallen
- [25] H. BROSS, Private Kommunikation, Lösungsmethoden der linearisierten Boltzmann-Gleichung mittels Variationsrechnung
- [26] H. BROSS, Private Kommunikation, Gitterdynamik in Kupfer
- [27] H. BROSS, Die elektrische Leitfähigkeit von Kupfer unter besonderer Berücksichtigung der Anisotropie des Gitterschwingungsspektrums, Doktorarbeit an der Technischen Hochschule Stuttgart (1958)
- [28] H. BROSS, Private Kommunikation, MAPW-Verfahren
- [29] H. BROSS, Die elektrische Leitfähigkeit von Kupfer unter besonderer Berücksichtigung der Anisotropie des Gitterschwingungsspektrums, Zeitschrift für Naturforschung 14a, 560-580 (1959)
- [30] H. BROSS, Zur Theorie der elektrischen Leitungerscheinungen in Halbleitern und Metallen, Festkörperprobleme, V. Vieweg und Sohn (1966)

- [31] H. BROSS, Zur Theorie des elektrischen Widerstandes reiner Metalle bei tiefen Temperaturen, Zeitschrift für Physik 193, 185-201 (1966)
- [32] H. BROSS, G. BOHN, H. STÖHR, Zur Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstandes der Alkalimetalle bei tiefen Temperaturen, Zeitschrift für Physik 194, 101, 124 (1966)
- [33] CHEMISCHE ENZYKLOPÄDIE IN FÜNF BÄNDEN, BRE (1988-1998) (in russischer Sprache)
- [34] CLARKE, Phil. Mag. 13, 115-127 (1965)
- [35] R.M. DREIZLER, E.K.U. GROSS, Density Functional Theory, An Approach to the Quantum Many-Body Problem, Springer (1990)
- [36] D. DORN, Z. Naturf. 12a, 739 (1957)
- [37] J.S. DUGDALE, The Electrical Properties of Metals and Alloys, Edward Arnold (Publishers) Limited (1977)
- [38] L.E. ELSGOLTZ, Variationsrechnung, Staatsverlag für die technische und theoretische Literatur (1952) (in russischer Sprache)
- [39] D. ENSKOG, Inaugural Dissertation Uppsala (1917)
- [40] G.M. FEHRENBACH, Weiterentwicklung und Anwendung des SAPW-Vefahrens, Verwendung einer lokalisierten Basis von Splinefunktionen, selbst-konsistente Berechnung eines allgemeinen Einteilchenpotentials, Berechnung der mikroskopischen DEF im langwelligen Grenzfall, Doktorarbeit (1992)
- [41] G.M. FEHRENBACH, Weiterentwicklung und Anwendung des SAPW-Vefahrens, Verwendung einer lokalisierten Basis von Splinefunktionen, selbst-konsistente Berechnung eines allgemeinen Einteilchenpotentials, Berechnung der mikroskopischen DEF im langwelligen Grenzfall, Interner Bericht (1992)
- [42] G.C. FLETCHER, The Electron Band Theory of Solids, North-Holland Publishing Company Amsterdam-London (1971)
- [43] J.J. GNIEWEK, A.F. CLARK, Appl. Phys. 36, 3358-3359 (1965)
- [44] E. GRUENEISEN, Ann. der Physik 16, 350 (1933)
- [45] I.S. GRADSTEIN, I.M. RYSIK, Tabellen der Integrale, Summen, Reihen und Produkte, Nauka 1971 (in russischer Sprache)
- [46] L. GUREVICH, J. Phys. (USSR) 9, 477 (1945)
- [47] L. GUREVICH, J. Phys. (USSR) 10, 67 (1946)

- [48] U. GUTDEUTSCH, Die Elektron–Phonon Wechselwirkung in Aluminium, Diplomarbeit an der LMU (1993)
- [49] I.I. HANNA, E.H. SONDHEIMER, Proc. Roy. Soc., A239, 391 (1956)
- [50] J. JÄCKLE, Einführung in die Transporttheorie, Vieweg (1978)
- [51] W. JONES, N. MARCH, Theoretical Solid State Physics, Vol. 1,2, Wiley-Interscience (1973)
- [52] F.S. KHAN, P.B. ALLEN, W.H. BUTLER, F.J. PINSKI, Phys. Rev. B26, 1538-1548 (1982)
- [53] M. KHOSHENEVISAN, W.P. PRATT, P.A. SCHROEDER, S. STEENWYK, Low-Temperature Resistivity and Thermoelectric Ratio of Cooper and Gold, Phys. Rev. B19, 3873-3878 (1979)
- [54] C. KITTEL, C.Y. FONG, Quantentheorie der Festkörper, 3. Auflage, R. Oldenbourg Verlag (1989)
- [55] C. KITTEL, Festkörperphysik, R. Oldenbourg Verlag (1974)
- [56] M. KOHLER, Z. Physik 124, 712 (1948)
- [57] H. KOPKA, Latex, Band 1, Addison-Wesley (1995)
- [58] G. KORN, T. KORN, Mathematical Handbook, Mc Graw-Hill (1968)
- [59] R. KUBO, A General Expression of Conductivity Tensor, CJP, V34 (1956)
- [60] L.D. LANDAU, E.M. LIFSCHITZ, Theoretische Physik, Band 3, Quantenmechanik, Akademie-Verlag, Berlin (1991)
- [61] L.D. LANDAU, E.M. LIFSCHITZ, Theoretische Physik, Band 5, Statistische Physik I, Akademie-Verlag, Berlin (1975)
- [62] L.D. LANDAU, E.M. LIFSCHITZ, Theoretische Physik, Band 9, Statistische Physik II, Akademie-Verlag, Berlin (1980)
- [63] L.D. LANDAU, E.M. LIFSCHITZ, Theoretische Physik, Band 10, Physikalische Kinetik, Akademie-Verlag, Berlin (1983)
- [64] LANDOLT–BÖRNSTEIN, Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Band 13, Metalle: Phononenzustände, Elektronenzustände und Fermi–Flächen, Springer Verlag (1981)
- [65] LANDOLT–BÖRNSTEIN, Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Band 15, Metalle: Elektronische Transportphänomene, Springer Verlag (1982)

- [66] M. LOIDL, Private Kommunikation, Herstellung der hochreinen Metalle und Messung sehr kleiner Widerstände
- [67] MATHEMATISCHE ENZYKLOPÄDIE in fünf Bänden, BRE (1977-1995) (in russischer Sprache)
- [68] MATHEMATISCHES ENZYKLOPÄDISCHES WÖRTERBUCH in einem Band, SE (1988) (in russischer Sprache)
- [69] O. MADELUNG, Festkörpertheorie, Band I, Springer (1972)
- [70] O. MADELUNG, Festkörpertheorie, Band II, Springer (1972)
- [71] O. MADELUNG, Festkörpertheorie, Band III, Springer (1973)
- [72] N.H. MARCH, M. PARINELLO, Collective Effects in Solids and Liquids, Adam Hilger Ltd. (1982)
- [73] R.A. MATULA, Electrical Resistivity of Copper, Gold, Palladium and Silver, J. Phys. Chem. Ref. Data, 8, 1147-1302 (1979)
- [74] J. MEHRA, H. REHENBERG, The Historical Development of the Quantum Theory, Vol. 6, Springer (2000)
- [75] A. MORIARTY, Phys. Rev. B1, 1363 (1970)
- [76] MATHEMATISCHE PHYSIK, Enzyklopädie in einem Band, BRE (1998) (in russischer Sprache)
- [77] L. NORDHEIM, Ann. Phys. (Lpz.), 9, 607 (1931)
- [78] F. OLIVER, Introduction to Asymptotics and Special Functions, Academic Press (1974)
- [79] R. PEIERLS, Annalen der Physik 4, 121 (1930)
- [80] R. PEIERLS, Zur Frage des elektrischen Widerstandsgesetzes für tiefe Temperaturen, Annalen der Physik 12, 155–168 (1932)
- [81] H. PFENNIG, Der Einfluß der Umklapp-Prozesse auf den elektrischen Widerstand der Metalle bei tiefen Temperaturen, Zeitschrift für Physik 155,332-349(1959)
- [82] PHYSIKALISCHE ENZYKLOPÄDIE in fünf Bänden, BRE (1988-1998) (in russischer Sprache)
- [83] PHYSIKALISCHES ENZYKLOPÄDISCHES WÖRTERBUCH in einem Band, SE (1983) (in russischer Sprache)

- [84] J. PINSKI, Phys. Rev. B21, 4380 (1980)
- [85] C. POWEL, G. CLARK, F. FICKETT, Phys. Kond. Mat. 9, 104-12 (1969)
- [86] E.R. RUMBO, Transport Properties of Very Pure Copper and Silver below 8.5 K, J. Phys. F: Metal Phys., Vol.6, No.1, 85-98 (1976)
- [87] S. SOHOZKIJ, Definierte Integrale angewandt bei der Reihenentwicklung, St. Petersburg (1873) (in russischer Sprache)
- [88] M. TSUJI, J. Phys. Soc. Jap. 14, 618 (1959)
- [89] V. VLADIMIROV, Gleichungen der Mathematischen Physik, Nauka, 4. Auflage (1981) (in russischer Sprache)
- [90] S.H. VOSKO, L. WILK, M. NUSAIR, CJP58, 1200 (1980)
- [91] A.H. WILSON, The Theory of Metals, Second Edition, Cambridge University Press (1954)
- [92] J.M. ZIMAN, The Electrical and Thermal Conductivities of Monovalent Metals, Proc. Roy. Soc., London, A226, 436-454 (1954)
- [93] J.M. ZIMAN, Canad. J. Phys. 34, 1256 (1956)
- [94] J.M. ZIMAN, Phil. Mag. 39, 371 (1959)
- [95] J.M. ZIMAN, Electrons and Phonons, At the Clarendon Press (1960)
- [96] J.M. ZIMAN, Principles of the Theory of Solids, Cambridge (1964)
- [97] J.M. ZIMAN, Elements of Advanced Quantum Theory, Cambridge (1969)
- [98] D.N. ZUBAREV, Nonequilibrium Statistical Thermodynamics, Consultants Bureau, New York (1974)

Danksagung

Ich bedanke mich herzlich bei Herrn Prof. Dr. Bross für das Thema der Arbeit, für die vielseitigen Diskussionen bezüglich verschiedener Aspekte der modernen Festkörpertheorie, numerischer Mathematik und Informatik.

Bedanken möchte ich mich auch für die Zurverfügungstellung der für meine Arbeit wesentlichen Hilfsprogramme.

Herrn Prof. Dr. von Delft danke ich für die Übernahme der Zweitkorrektur meiner Arbeit.

Mein Dank gilt weiter Herrn Dr. habil. Fehrenbach, der mir das Programmpaket zur Berechnung der Gaunt-Koeffizienten zur Verfügung gestellt hat.

Ich bedanke mich bei Herrn Prof. Dr. Engel für die zur Verfügungstellung des Programmpaket zur Berechnung der Dichte-Funktionale und für die Gespräche über die Berechnungsmethoden von diesen.

Ich bedanke mich bei Herrn Prof. Dr. Rechenberg für die historischen Hinweise über Felix Bloch.

Herzlichen Dank schulde ich auch Herrn Dr. Bader für seine Hilfsbereitschaft in Computer-Fragen und seine mutmachenden Worte.

Ich bedanke mich beim Leibniz-Rechenzentrum für die Möglichkeit, auf dem Hochleistungs-Linux-Cluster zu rechnen und für die Aufnahme in die Arbeitsgruppe. Mein Dank gilt den Mitarbeitern Herrn Dipl. Inf. Baur, Herrn Dr. Huber, Herrn Dipl. Math. Raab, Herrn Dipl. Phys. Schubring und Herrn Wimmer.

Schließlich danke ich meiner Familie, meiner Freundin und meinen Freunden.

LEBENS LAUF

Alexander Dunaevskiy

ANSCHRIFT: Theresienstraße 91, in 80333 München

GEBURTSDATUM: 27. August 1972 in Moskau

STAATSANGEHÖRIGKEIT: deutsch (seit Februar 2002)

SCHULBILDUNG:

1979 – 1986 Schule Nr. 763 in Moskau
1986 – 1989 Schule Nr. 47 für Physik
und Mathematik in Moskau

UNIVERSITÄTSBILDUNG:

1989 – 1991 Physikstudium an der Lomonosov–Universität
zu Moskau
08.1991 – 09.1992 Studium der Deutschen Sprache in Pulheim und
Ludwigshafen
10.1992 – 11.1996 Physikstudium an der Ruprecht–Karls–Universität
zu Heidelberg
1994 – 1995 Übungsgruppen in Theoretischer Mechanik
06.1995 – 06.1996 Diplomarbeit bei Herrn Prof. Dr. Wegner,
Thema: „Untersuchung der flußinvarianten Größen
für das n–Orbital–Modell “
08.11.1996 Physikdiplom
01.05.1997 Dissertation bei Herrn Prof. Dr. Bross an der
Ludwig–Maximilians–Universität zu München
05.1997 – 07.2001 Übungsgruppen der Mechanik und Quantenmechanik
sowie Physikpraktika für Mediziner
01.09.2001 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Leibniz–Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

München, den 1. Oktober 2002