

Technische Universität Wien

D I P L O M A R B E I T

Berechnung elektronischer Transportkoeffizienten mittels
des Variationsverfahrens für die linearisierte Boltzmann-
gleichung - Rechenprogramme mit Anwendung auf inter-
metallische Seltene Erd Verbindungen

ausgeführt am Institut für
Theoretische Physik
der Technischen Universität Wien

von

Oliver Eibl

Gustav Tschermak-Gasse 2, 1180 - Wien

Wien, im Februar 1984

Beurteilt
von

174.335 II Dpe



Kurzfassung

Ausgehend von der linearisierten Boltzmann-Gleichung werden mittels des Variationsverfahrens die Transportkoeffizienten elektrischer Widerstand, Wärmewiderstand und Seebeckkoeffizient berechnet. Dabei werden für die Leitungselektronen Wechselwirkungen mit Gitterleerstellen und Fremdatomen (Potential-Streuung), mit magnetischen Ionen (Magnetische-Streuung) und mit Phononen (Phononen-Streuung) berücksichtigt.

Mittels der Modell-Hamiltonoperatoren, die zur Beschreibung der Wechselwirkungen der Leitungselektronen verwendet werden, um die in der linearisierten Boltzmann-Gleichung vorkommenden Übergangswahrscheinlichkeiten quantenmechanisch zu berechnen, sowie mittels der Funktionen, die durch die elektronischen Eigenschaften des Festkörpers bestimmt sind, sind die Transportkoeffizienten zu bestimmen. Durch die Einführung von Spektralfunktionen ist man in der Lage, das Gesamtproblem, nämlich die Berechnung der Transportkoeffizienten mit Hilfe der Modell-Hamiltonoperatoren, zu verallgemeinern und in zwei Teilprobleme zu separieren.

Um diese Aufgaben durchführen zu können, werden Rechenprogramme erstellt, die einerseits für die Potential-, die Magnetische- und die Phononen-Streuung die Spektralfunktionen berechnen, und andererseits aus den Spektralfunktionen die Transportkoeffizienten bestimmen.

Es werden Gleichungen für die Transportkoeffizienten in niedrigster Ordnung des Variationsverfahrens angegeben. Außerdem werden Rechnungen für die intermetallische Seltene-Erd-Verbindung GdAl_2 im Temperaturbereich 0 - 300 K durchgeführt. Dabei werden die Beiträge der einzelnen Streumechanismen zu den Transportkoeffizienten berechnet, und die Konvergenz der Werte der Transportkoeffizienten - erhalten in den einzelnen Unterräumen im Rahmen des Variationsverfahrens - untersucht.

Bei der Überlagerung der Streumechanismen findet man für den elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand gute Übereinstimmung mit der Matthiessen-Regel für den gesamten Temperaturbereich - hingegen für den Seebeckkoeffizienten Abweichungen von der Kohler und der Nordheim-Gorter-Regel bei tiefen Temperaturen. Aus den Ergebnissen der Rechnung ist deutlich die Abhängigkeit

des elektrischen Widerstandes und des Wärmewiderstandes vom Streumechanismus und des Seebeckkoeffizienten von den elektronischen Eigenschaften des Festkörpers festzustellen.

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	1
2. Die Transportkoeffizienten	7
3. Die Berechnung der Transportkoeffizienten	15
3.1 Die von der Bandstruktur abhängigen Größen $\tilde{Z}_\mu$ und $\hat{Z}_\mu$	15
3.2 Das Matrixelement des Stoßoperators	17
3.3 Rechenablauf und Programmaufbau zur Berechnung der Transportkoeffizienten	23
4. Die Modellspektralfunktionen	39
4.1 Die Berechnung der Modellspektralfunktionen aus den Modell-Hamiltonoperatoren	39
4.2 Die Modellspektralfunktionen als Ausgangspunkt zur Berechnung der Transportkoeffizienten	66
5. Die Transportkoeffizienten in niedrigster Ordnung	79
5.1 Die Transportkoeffizienten für die Potential-Streuung	81
5.2 Die Transportkoeffizienten für die Magnetische-Streuung	81
5.3 Die Transportkoeffizienten für die Phononen-Streuung	85
6. Durchführung der Rechnung und Ergebnisse für GdAl_2	87
6.1 Durchführung der Rechnung	87
6.2 Ergebnisse der Transportkoeffizienten für die intermetallische Verbindung GdAl_2	90

7.	Zusammenfassung der Ergebnisse für GdAl_2	116
7.1	Das Konvergenzverhalten im Rahmen des Variationsverfahrens	116
7.2	Die Leitungsbandaufspaltung	119
7.3	Das Wiedemann-Franz Gesetz	120
7.4	Das Erfüllen der Matthiessen, der Kohler und der Nordheim-Gorter Regel	122
7.5	Schlußbetrachtungen	124

	<u>Literaturverzeichnis</u>	126
--	-----------------------------	-----

Anhang

A.1	Mathematischer Anhang	128
A.1.1	Integrale und Reihen	128
A.1.2	Die Funktionen $J_n(x)$	129
A.2	Rechenprogramme	140
A.2.1	Programme zur Berechnung der Transportkoeffizienten	140
A.2.2	Programme zur Berechnung der Spektralfunktionen	229
A.3	Tabellen der Ergebnisse für GdAl_2	247
A.4	Dokumentation eines Programmlaufes	256

1. Einleitung

Ausgangspunkt dieser Arbeit bei der Berechnung der Transportkoeffizienten ist die lineare Ankopplung der Flüsse (Teilchenstromdichte, Energiestromdichte) an die äußeren Kräfte (Gradienten des elektrostatischen Potentials und der Temperatur). Die Kopplungskonstanten sind hierbei die Onsager Tensoren /4/. Man erhält ein Gleichungssystem, das die Flüsse und äußeren Kräfte sowie die hier zu behandelnden Transportkoeffizienten, nämlich elektrischen Widerstand, Seebeckkoeffizienten und Wärmeleitfähigkeit (als drei voneinander unabhängige Größen), enthält.

$$\begin{aligned}\vec{E}' &= \underline{\rho} \vec{j} + \underline{S} \vec{\nabla} T \\ \vec{q} &= \underline{\pi} \vec{j} - \underline{\kappa} \vec{\nabla} T\end{aligned}\quad (1.1)$$

$\vec{E}' = -\text{grad}(e\varphi - \mu) \frac{1}{e}$ [φ ...elektrostat. Potential, μ ...chem. Potential]

$\vec{\nabla} T$...Temperaturgradient

$\vec{j}$... elektrische Stromdichte

$\vec{q}$... Wärmestromdichte

ρ ...elektrischer Widerstand

S ...Seebeckkoeffizient

π ...Peltierkoeffizient

κ ...Wärmeleitfähigkeit

Zwischen dem Peltierkoeffizienten und dem Seebeckkoeffizienten besteht die Onsager Beziehung /4/ :

$$\pi_{ij} = S_{ji} \cdot T$$

Die Gleichungen (1.1) legen eindeutige Meßvorschriften fest, um die darin vorkommenden Transportkoeffizienten experimentell zu ermitteln.

Um nun den elektronischen Anteil der Transportkoeffizienten zu berechnen, führt man eine Verteilungsfunktion für die Elektronen ein, womit man die Koeffizienten als Funktionale eben- dieser Funktion erhält. Für den Fall des thermodynamischen Gleichgewichts geht die Verteilungsfunktion in die Fermi-

funktion über /4,6/. Zur Berechnung zieht man die Boltzmann-Gleichung heran, die eine Integro-Differentialgleichung für die Verteilungsfunktion darstellt.

Wegen der Schwierigkeiten die Boltzmann-Gleichung exakt zu lösen ist man gezwungen, gewisse Näherungsannahmen zu treffen. Man betrachtet die äußeren Felder sowie die Auslenkung der Verteilungsfunktion aus dem thermodynamischen Gleichgewicht (ATG) als Störungen und schreibt die Boltzmann-Gleichung in den verschiedenen Ordnungen der Störungen an. Für die erste Ordnung erhält man die linearisierte Boltzmann-Gleichung - eine Integralgleichung für die ATG-Funktion.

Die Transportkoeffizienten hängen damit als Funktionale nicht mehr von der gesamten Verteilungsfunktion ab, sondern nur noch von der Funktion, die die Auslenkung aus dem thermodynamischen Gleichgewicht angibt /6/.

Im weiteren führt man ein geeignetes Funktionensystem ein /4,6,10/ und entwickelt formal die ATG-Funktion nach den Basisfunktionen des Systems. Man nutzt die Semidefinitheit des Stoßoperators in der Boltzmann-Gleichung aus /4,6/ sowie die Gestalt der Gleichungen für die Transportkoeffizienten und erhält dadurch Maximalbedingungen für die elektrische Leitfähigkeit und die Wärmeleitfähigkeit sowie Gleichungen für alle Transportkoeffizienten, die vom gewählten Funktionensystem abhängen. In der Literatur ist dieses Verfahren als Variationsverfahren der Transporttheorie bekannt /4,6/.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Transportphänomene bei intermetallischen Seltenen Erd Verbindungen behandelt. Diese

Verbindungen sind geeignet an ihnen den Einfluß von Streuprozessen der Leitungselektronen an magnetischen Verunreinigungen (magnetische Seltene Erd Ionen) auf die Transportkoeffizienten zu studieren. Die Seltenen Erden (Lanthaniden) füllen mit steigender Elementzahl im Periodensystem die 4f-Schale an. Dabei liegen die 4f-Elektronen stärker lokalisiert um den Rumpf als die Elektronen der abgeschlossenen 5s, 5p und 6s Schale /7/. Es ergeben sich durch die Elektronen der nicht abgeschlossenen 4f-Schale lokalisierte magnetische Momente für die Seltenen Erden. Im Festkörper wechselwirken diese Momente indirekt miteinander - hervorgerufen durch eine Wechselwirkung der magnetischen Momente der Leitungselektronen mit denen der Seltenen Erd Ionen /5/. Dabei ist die Leitungselektronen - Seltenen Erd Ion Wechselwirkung (sf-Wechselwirkung) wesentlich stärker (= 1000 K bei $GdAl_2$) als die der Seltenen Erd Ionen (ff-Wechselwirkung) untereinander (= 100 K bei $GdAl_2$) /8/. Die Wechselwirkung der Leitungselektronen mit den Seltenen Erd Ionen gibt einen spezifischen Beitrag zu den Transportkoeffizienten. Ersetzt man die magnetischen Seltenen Erd Ionen durch unmagnetische (bei gleicher Struktur), so läßt sich der magnetische Anteil der Streuprozesse an den Transportkoeffizienten experimentell bestimmen /12/.

Neben diesem für intermetallische magnetische Seltenen Erd Verbindungen charakteristischen Streuprozess (Magnetische-Streuung) treten u.a. noch die Streuungen der Leitungselektronen an kollektiven Gitterschwingungen (Phononen-Streuung) sowie an Fremdatomen und Leerstellen (Potential-Streuung) hinzu / 8/.

Um nun Transportkoeffizienten tatsächlich berechnen zu können, werden für die verschiedenen Wechselwirkungen der Leitungselektronen im Festkörper Modell-Hamiltonoperatoren verwendet /8/. Im weiteren soll ausgehend von diesen Operatoren die Berechnung der Transportkoeffizienten durchgeführt werden. Durch die Einführung von Spektralfunktionen /10/ läßt sich der Weg von den Modell-Hamiltonoperatoren zu den Transportkoeffizienten entscheidend verallgemeinern.

Aufgabe ist es nun Rechenprogramme zu erstellen, die einerseits mit den Spektralfunktionen als Eingabe die Transportkoeffizienten, und andererseits ausgehend von den Modell-Hamiltonoperatoren die Spektralfunktionen für jede gewünschte Temperatur berechnen. Hier wird die Aufteilung des Gesamtproblems, nämlich die Berechnung der Transportkoeffizienten aus den Modell-Hamiltonoperatoren, auf zwei zusammenhängende Aufgaben, nämlich die Berechnung der Transportkoeffizienten aus den Spektralfunktionen und die Berechnung der Spektralfunktionen mit Hilfe der Modell-Hamiltonoperatoren, deutlich. Die dazu notwendigen Rechnungen wurden von mir am Rechenzentrum der TU - Wien, Gusshaus-Straße 27-29, 1040 Wien, auf der CDC Anlage Ceyber 720 in der Programmiersprache Fortran 77 (Compiler FTN5) durchgeführt.

Bei den Ergebnissen der Rechnungen für $GdAl_2$, die im Kapitel 6 zusammengestellt sind und in den Kapiteln 6 und 7 diskutiert werden, ist der Temperaturverlauf der Transportkoeffizienten beim Vorhandensein einzelner Streumechanismen (wie Potential-Streuung, Magnetische-Streuung und Phononen-Streuung) von großem Interesse. Dabei ist die Trennung der Streumechanis-

men rechnerisch - im Gegensatz zum Experiment - einfach durchzuführen. Man erhält so die für einen Streumechanismus charakteristische Struktur des Temperaturverlaufes der Transportkoeffizienten.

Weiters ist das Verhalten der Werte der Transportkoeffizienten beim Übergang zu immer höherdimensionalen Basissystemen im Rahmen des Variationsverfahrens interessant. Man bekommt Aufschluß über die Güte der niedrigdimensionalen Approximationen in Abhängigkeit von der Temperatur und der Art des Streumechanismus und erwartet ein Konvergieren der elektrischen Leitfähigkeit und der Wärmeleitfähigkeit von kleineren Werten zu den Werten, die man erhielte, könnte man die ATG-Funktion exakt (als Lösung der linearisierten Boltzmann-Gleichung).

Bei der Überlagerung von Streumechanismen sind drei Regeln bekannt [5], die für den elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand ein additives Verhalten (Matthiessen Regel) und für den Seebeckkoeffizienten eine gewichtete Addition der einzelnen Beiträge (Kohler Regel, Nordheim-Gorter Regel) festsetzen. Die Übereinstimmung der berechneten Transportkoeffizienten mit den Regeln soll in Kapitel 6 dargestellt und in Kapitel 7 diskutiert werden.

In Kapitel 2 werden die Definitionen der Transportkoeffizienten sowie ihre formalen Ergebnisse in Gleichungsform angegeben.

Kapitel 3 befaßt sich mit der Berechnung der Transportkoeffizienten und erläutert im Abschnitt 3.3 den Aufbau und Ablauf der dazu notwendigen Rechenprogramme.

Die Modellspektralfunktionen werden in Kapitel 4 behandelt.

Ausgehend von den Modell-Hamiltonoperatoren werden die Gleichungen für die Spektralfunktionen angegeben und ihre Erzeugung im Rahmen der Rechnung wird erläutert.

Im weiteren befaßt sich Kapitel 5 mit der Berechnung der Transportkoeffizienten, wie man sie in niedrigster Ordnung im Rahmen des Variationsverfahrens erhält.

Kapitel 6 gibt einen Überblick über die Durchführung der Rechnung für Transportkoeffizienten an einer Rechenanlage und enthält eine Zusammenstellung der Ergebnisse, die für die intermetallische Verbindung GdAl_2 erhalten wurden.

2. Die Transportkoeffizienten

Äußere Kräfte sind stets dafür verantwortlich, daß im Festkörper physikalische Größen von einem Ort zum anderen transportiert werden. Um nun einen Zusammenhang zwischen äußeren Kräften und Flüssen zu erhalten, hat man immer die Eigenschaften des zu betrachtenden physikalischen Systems im Auge zu behalten. Für sehr viele findet man ein lineares Ankoppeln der Flüsse, wie z.B. Ladungsströme oder Energieströme, an die äußeren Felder z.B. Elektrisches Feld oder Feld des Temperaturgradienten /4/. Dies kommt durch die Gleichungen (2.1) zum Ausdruck. Sie enthalten als Kopplungskonstanten zwischen den Feldern und Flüssen die Onsager Tensoren (Tensoren 2 Stufe) σ , L , M und N , die nicht von den äußeren Feldern abhängen. Die Gleichungen (2.1) (für den Fall $\vec{B} = \vec{0}$)

$$\begin{aligned}\vec{j} &= \underline{\underline{\sigma}} \vec{E}' + \underline{\underline{L}} \vec{\nabla} T \\ \vec{q} &= \underline{\underline{M}} \vec{E}' + \underline{\underline{N}} \vec{\nabla} T\end{aligned}\tag{2.1}$$

geben wieder, daß die linksstehenden Ströme als Summe von Produkten eines Tensors (Transportkoeffizient) mit einem Vektor (äußere Kraft) geschrieben werden können. Dabei besteht zwischen den Tensoren der Gleichungen (2.1) und (1.1) der Zusammenhang:

$$\begin{aligned}\rho &= \underline{\underline{\sigma}}^{-1} && \text{spezifischer elektrischer Widerstand} \\ S &= -\underline{\underline{\sigma}}^{-1} \underline{\underline{L}} && \text{Seebeckkoeffizient} \\ \Pi &= \underline{\underline{M}} \underline{\underline{\sigma}}^{-1} && \text{Peltierkoeffizient} \\ \kappa &= \underline{\underline{M}} \underline{\underline{\sigma}}^{-1} \underline{\underline{L}} - \underline{\underline{N}} && \text{Wärmeleitfähigkeit}\end{aligned}\tag{2.2}$$

Um nun zur Berechnung der Transportkoeffizienten der Gleichungen (1.1) zu gelangen, führt man eine Verteilungsfunktion für die Elektronen ein, mit der Eigenschaft, daß

$$\frac{1}{(2\pi)^3} f_{\gamma}(\vec{r}, t) \Delta^3 r \Delta^3 k \quad (2.3)$$

gleich der Anzahl der Teilchen im Raumelement $\Delta^3 r$ um $\vec{r}$ sowie $\Delta^3 k$ um $\vec{k}$ mit den Zuständen $\gamma = (n, \vec{k}, \sigma)$ zum Zeitpunkt t ist.

Durch das Anlegen äußerer Felder befindet sich das System nicht mehr im thermodynamischen Gleichgewicht - dies äußert sich in einer von der Fermiverteilung verschiedenen Verteilung der Elektronen. Die totale Änderung der Teilchenzahl im Raumelement $\Delta^3 r \Delta^3 k$ um $(\vec{r}, \vec{k})$ mit den Zuständen γ im Zeitintervall Δt erhalten wir, indem wir eine Stoßbilanz der Teilchen für ebendieses Zeitintervall aufstellen. Quantenmechanisch lassen sich Übergangswahrscheinlichkeiten für die Stoßprozesse angeben. Für die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit von einem Systemzustand $|\gamma\rangle$ in einen $|\gamma'\rangle$ erhält man unter Beachtung von Fermis Goldener Regel /1/

$$W_{\gamma \rightarrow \gamma'} = 2\pi/\hbar \delta(E_{\gamma'} - E_{\gamma}) |\langle \gamma' | H_{\text{We}} | \gamma \rangle|^2 \quad (2.4)$$

Dabei ist H_{We} der Hamiltonoperator, der die Wechselwirkung, die zum Übergang geführt hat, beschreibt. $|\gamma\rangle$ sind die zu H gehörenden Eigenzustände des Gesamtsystems.

Betrachtet man nun speziell Leitungselektronen im Festkörper mit den Zuständen $|\gamma\rangle = |n, \vec{k}, \sigma\rangle$ so gilt für $|\gamma\rangle = |\gamma\rangle |M\rangle$, wobei der Zustand $|M\rangle$ physikalische Systeme beschreibt, mit denen die Leitungselektronen im Festkörper wechselwirken.

Um nun die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit vom Zustand $|\gamma\rangle$ in einen Zustand $|\gamma'\rangle$ zu erhalten, gewichtet man

$W_{r \rightarrow r'}$ in der Form

$$W_{r \rightarrow r'} = \sum_{|m\rangle} \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \sum_{|m'\rangle} W_{r \rightarrow r'} \quad (2.5).$$

Nun ist man in der Lage tatsächlich eine Bilanzgleichung aufzustellen, indem man fordert, daß die Änderung der Zahl der Teilchen in $\Delta^3 r \Delta^3 k$ um $(\vec{r}, \vec{k})$ im Zeitintervall Δt bedingt durch die Stöße gleich der Zahl während Δt nach $\Delta^3 r \Delta^3 k$ um $(\vec{r}, \vec{k})$ gelangten - minus der Zahl während Δt aus $\Delta^3 r \Delta^3 k$ um $(\vec{r}, \vec{k})$ gestreuten Teilchen zum Zeitpunkt t mit den Zuständen $\gamma = (\vec{k}, \sigma)$ gegeben ist. Es gilt also für die Zahl der nach $\Delta^3 r \Delta^3 k$ um $(\vec{r}, \vec{k})$ gestreuten Teilchen zum Zeitpunkt t , mit den Zuständen $\gamma = (\vec{k}, \sigma)$ für das Zeitintervall Δt

$$\begin{aligned} \Delta N = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{\partial f_r(\vec{r}, t)}{\partial t} \right)_c \Delta^3 r \Delta^3 k \Delta t = \sum_{r'} W_{r'r} \Delta t \frac{1}{(2\pi)^3} f_{r'}(\vec{r}, t) \Delta^3 k' \Delta^3 r \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} [1 - f_r(\vec{r}, t)] \Delta^3 k \Delta^3 r - \\ - \sum_{r'} W_{rr'} \Delta t \frac{1}{(2\pi)^3} f_r(\vec{r}, t) \Delta^3 k \Delta^3 r \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} [1 - f_{r'}(\vec{r}, t)] \Delta^3 k' \Delta^3 r \end{aligned} \quad (2.6),$$

und daraus folgt die Größe $\left(\frac{\partial f_r(\vec{r}, t)}{\partial t} \right)_c$, die wir als Stoßterm der Boltzmann-Gleichung bezeichnen als

$$\left(\frac{\partial f_r(\vec{r}, t)}{\partial t} \right)_c = \frac{1}{(2\pi)^3} \Delta^3 r \sum_{r'} \Delta^3 k' \{ W_{r'r} f_{r'}(\vec{r}, t) [1 - f_r(\vec{r}, t)] - W_{rr'} f_r(\vec{r}, t) [1 - f_{r'}(\vec{r}, t)] \} \quad (2.7).$$

Mit Hilfe der Definition

$$P_{r'r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \Delta^3 r W_{r'r} \quad (2.8)$$

läßt sich der Stoßterm als

$$\left(\frac{\partial f_r(\vec{r}, t)}{\partial t} \right)_c = \sum_{r'} \Delta^3 k' \{ P_{r'r} f_{r'}(\vec{r}, t) [1 - f_r(\vec{r}, t)] - P_{rr'} f_r(\vec{r}, t) [1 - f_{r'}(\vec{r}, t)] \} \quad (2.9)$$

schreiben.

Die totale Änderung der Teilchenzahl im Raumelement $\Delta^3 r \Delta^3 k$ um $(\vec{r}, \vec{k})$ im Zeitintervall Δt zum Zeitpunkt t ist durch

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{df_r(\vec{r}, t)}{dt} \Delta^3 r \Delta^3 k \Delta t \quad \text{gegeben.}$$

Durch Gleichsetzen der totalen Änderung mit jener Änderung der Teilchenzahl, die durch die Stöße verursacht wird, gelangt man zur Boltzmanngleichung

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \Delta^3 r \Delta^3 k \Delta t \frac{d f_T(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{1}{(2\pi)^3} \Delta^3 r \Delta^3 k \Delta t \left(\frac{\partial f_T(\vec{r}, t)}{\partial t} \right)_c \quad (2.10).$$

Wegen der in der Boltzmanngleichung auftretenden Verteilungsfunktion und der im Stoßterm (rechte Seite von (2.10)) vorkommenden quantenmechanisch berechneten Übergangswahrscheinlichkeiten, bezeichnet man diese Vorgangsweise als semi-klassisch /9/. Für die linke Seite von (2.10), den Strömungsterm, erhält man unter der Annahme, daß die $\vec{k}$ -Vektoren dicht im k -Raum liegen:

$$\frac{d f_T(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{\partial f_T(\vec{r}, t)}{\partial t} + \dot{\vec{k}} \cdot \vec{\nabla}_k f_T(\vec{r}, t) + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_r f_T(\vec{r}, t) \quad (2.11)$$

Mit den Gleichungen (Halbklassischen Bewegungsgleichungen)

$$\dot{\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \vec{F} = -\frac{ie}{\hbar} [\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v}(\vec{r}) \times \vec{B}] \quad , \quad \dot{\vec{r}} = \vec{v}(\vec{r}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k E_T \quad (2.12)$$

läßt sich die Boltzmanngleichung als

$$\frac{\partial f_T(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{v}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}_r f_T(\vec{r}, t) - \frac{ie}{\hbar} [\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v}(\vec{r}) \times \vec{B}] \cdot \vec{\nabla}_k f_T(\vec{r}, t) = \sum_{T'} \Delta^3 k' \{ P_{T'T} f_{T'}(\vec{r}, t) [1 - f_T(\vec{r}, t)] - P_{TT'} f_T(\vec{r}, t) [1 - f_{T'}(\vec{r}, t)] \} \quad (2.13)$$

schreiben. Man führt nun für die Verteilungsfunktion eine Entwicklung durch

$$f_T(\vec{r}) = f^0(E_T, \vec{r}) + f^1_T(\vec{r}) \quad (2.14),$$

wobei für $f^0(E_T, \vec{r}) = (\exp((E_T - \mu)/k_B T) + 1)^{-1}$ (2.15) gilt.

Dabei wurde angenommen, daß $f_T(\vec{r})$ nicht explizit zeitabhängig ist.

Schreibt man weiters für $f^1_T(\vec{r})$:

$$f^1_T(\vec{r}) = - \frac{\partial f^0(E_T, \vec{r})}{\partial E} \phi_T(\vec{r}) = - \frac{\partial f^0(E_T, \vec{r})}{\partial E} [1 - f^0(E_T, \vec{r})] \phi_T(\vec{r}) \quad (2.16)$$

mit $\beta = 1 / k_B T$ (2.17),

so führt dies mit Hilfe der Boltzmanngleichung (2.13) zu einer Bestimmungsgleichung für die Funktion $\phi_f(\vec{r})$. Diese Gleichung ist jedoch noch immer zu schwierig, um exakt gelöst zu werden. Aus diesem Grund macht man eine weitere Annahme, die in vielen Anwendungen realistisch ist. Man betrachtet die äußeren Felder als kleine Störung und erwartet daher für die Verteilungsfunktion nur eine schwache Auslenkung aus dem thermodynamischen Gleichgewicht. Für die Rechnung bedeutet das, daß die äußeren Felder sowie die Funktion $f_f^1(\vec{r})$ als Störungen (erster Ordnung) angesehen werden und man die Boltzmanngleichung in den Näherungen der verschiedenen Ordnungen anschreibt. Als Ergebnis nullter Ordnung erhält man

$$P_{fT} \{^0(\epsilon_f, \vec{r}) [1 - f^0(\epsilon_f, \vec{r})]\} = P_{Tf} \{^0(\epsilon_f, \vec{r}) [1 - f^0(\epsilon_f, \vec{r})]\} \quad (2.18).$$

Als nächstes betrachtet man auch noch Glieder der ersten Ordnung und erhält so die linearisierte Boltzmanngleichung als Bestimmungsgleichung für die Funktion $\phi_f(\vec{r})$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_f^1(\vec{r})}{\partial t} \right)_c &= \int \sum_{\vec{r}'} \Delta^3 k' \{ P_{Tf} \{^0(\epsilon_f, \vec{r}) [1 - f^0(\epsilon_f, \vec{r})]\} [\phi_f(\vec{r}) - \phi_f(\vec{r}')] \} = \\ &= -e \frac{\partial f^0(\epsilon_f, \vec{r})}{\partial \epsilon} (\vec{v}(f) \cdot \vec{E}) - \frac{\partial f^0(\epsilon_f, \vec{r})}{\partial \epsilon} \frac{\epsilon_f - \mu}{T} (\vec{v}(f) \cdot \vec{\nabla} T) \end{aligned} \quad (2.19)$$

Gleichung (2.19) legt die Definition eines Stoßoperators

$$C \phi_f = \int \sum_{\vec{r}'} \Delta^3 k' P_{Tf} \{^0(\epsilon_f) [1 - f^0(\epsilon_f)] [\phi_f - \phi_f'] \} \quad (2.20) \text{ nahe.}$$

Damit läßt sich die linearisierte Boltzmanngleichung (ohne Magnetfeld: $\vec{B} = \vec{0}$) als

$$C | \phi \rangle = | Z \rangle \quad (2.21)$$

schreiben, wobei für $|Z\rangle$

$$|Z\rangle = -e \left| \frac{\partial f^0(\epsilon_f)}{\partial \epsilon} (\vec{v}(f) \cdot \vec{E}) \right\rangle - \left| \frac{\partial f^0(\epsilon_f)}{\partial \epsilon} \frac{\epsilon_f - \mu}{T} (\vec{v}(f) \cdot \vec{\nabla} T) \right\rangle \quad (2.22)$$

zu setzen ist. Weil der Stoßoperator C ein linearer Operator ist (2.20), läßt sich (2.21) als zwei voneinander unabhängige Gleichungen

$$C|\tilde{\phi}\rangle = |\tilde{Z}\rangle \quad \text{und} \quad C|\hat{\phi}\rangle = |\hat{Z}\rangle \quad (2.23)$$

schreiben, mit

$$|\tilde{Z}\rangle = -e \left| \frac{\partial f^0}{\partial \mathbf{E}} (\mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{E}}) \right\rangle \quad \text{und} \quad |\hat{Z}\rangle = - \left| \frac{\partial f^0}{\partial \mathbf{E}} \frac{\mathbf{E}_T \cdot \mathbf{v}}{T} (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{T}}) \right\rangle \quad (2.24)$$

$$\text{und} \quad |\phi\rangle = |\tilde{\phi}\rangle + |\hat{\phi}\rangle \quad (2.25).$$

Mit der Einführung eines inneren Produktes im k -Raum

$$\langle g | f \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}} \Delta^3 k \, g(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \quad (2.26)$$

folgt für das Matrixelement des Stoßoperators

$$\langle \psi | C | \psi \rangle \leq 0 \quad (2.27) \quad \text{und}$$

$$\langle \psi | C | \phi \rangle = \langle \phi | C | \psi \rangle \quad (2.28) \quad \text{für beliebige } \psi \text{ und } \phi.$$

Schreibt man für den zunächst noch unbekannten Teil der Verteilungsfunktion

$$|\tilde{\phi}\rangle = C^{-1} \left| -e \frac{\partial f^0}{\partial \mathbf{E}} v_j |\tilde{E}| \right\rangle \quad (2.29) \quad \text{und} \quad |\hat{\phi}\rangle = C^{-1} \left| - \frac{\partial f^0}{\partial \mathbf{E}} \frac{\mathbf{E}_T \cdot \mathbf{v}}{T} v_j |\hat{E}| \right\rangle \quad (2.30),$$

so erhält man als Gleichungen für die Transportkoeffizienten (2.1):

$$\sigma_{ij} = - \frac{e^2}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}} \Delta^3 k \frac{\partial f^0(E_k)}{\partial \mathbf{E}} v_i(\mathbf{r}) C^{-1} \left[v_j(\mathbf{r}) \frac{\partial f^0(E_k)}{\partial \mathbf{E}} \right]$$

$$\text{oder} \quad \sigma = - \frac{1}{|\tilde{E}|^2} \langle \tilde{Z} | C^{-1} | \tilde{Z} \rangle = - \frac{1}{|\tilde{E}|^2} \langle \tilde{\phi} | C | \tilde{\phi} \rangle \quad (2.31)$$

$$L_{ij} = - \frac{1}{T} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}} \Delta^3 k \frac{\partial f^0(E_k)}{\partial \mathbf{E}} v_i(\mathbf{r}) C^{-1} \left[v_j(\mathbf{r}) (E_T \cdot \mu) \frac{\partial f^0(E_k)}{\partial \mathbf{E}} \right]$$

$$\text{oder} \quad L = - \frac{1}{|\hat{E}| |\hat{\eta}|} \langle \hat{Z} | C^{-1} | \hat{Z} \rangle \quad (2.32)$$

$$M_{ij} = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}} \Delta^3 k \frac{\partial f^0(E_k)}{\partial \mathbf{E}} v_i(\mathbf{r}) C^{-1} \left[v_j(\mathbf{r}) \frac{\partial f^0(E_k)}{\partial \mathbf{E}} (E_T \cdot \mu) \right]$$

$$\text{oder} \quad M = \frac{1}{|\hat{E}| |\hat{\eta}|} \langle \hat{Z} | C^{-1} | \hat{Z} \rangle \quad (2.33)$$

$$N_{ij} = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}} \Delta^3 k \frac{\partial f^0(E_k)}{\partial \mathbf{E}} (E_T \cdot \mu) v_i(\mathbf{r}) C^{-1} \left[v_j(\mathbf{r}) (E_T \cdot \mu) \frac{\partial f^0(E_k)}{\partial \mathbf{E}} \right]$$

$$\text{oder} \quad N = \frac{1}{|\hat{\eta}|^2} \langle \hat{Z} | C^{-1} | \hat{Z} \rangle = \frac{1}{|\hat{\eta}|^2} \langle \hat{\phi} | C | \hat{\phi} \rangle \quad (2.34).$$

Man nutzt nun die Eigenschaften des Stoßoperators aus (2.27) und (2.28) und gelangt so zu der Maximalbedingung für die elektrische Leitfähigkeit und Minimalbedingung für den Ten-

sor N

$$\sigma_{ii}[\tilde{\psi}] \leq \sigma_{ii}[\hat{\psi}] \quad (2.35)$$

$$N_{ii}[\tilde{\psi}] \geq N_{ii}[\hat{\psi}] \quad (2.36),$$

bei Verwendung der Funktionen $\tilde{\psi}, \hat{\psi}$ als exakte Lösungen der linearisierten Boltzmann-Gleichung (2.23) und $\tilde{\psi}, \hat{\psi}$ beliebige Funktionen darstellen. Die Gleichungen (2.35) und (2.36) stellen den Ausgangspunkt zur Berechnung der ATG-Funktion im Rahmen des Variationsverfahrens dar /6/. σ_{ii} und N_{ii} stellen Funktionale abhängig von den Funktionen $\tilde{\psi}$ und $\hat{\psi}$ dar. Ihre Werte werden stets kleiner oder gleich bzw. größer oder gleich sein als die, die man erhielte, könnte man die Lösung der linearisierten Boltzmann-Gleichung exakt. Für die Größen L_{ii} und M_{ii} existieren keine Extremalbedingungen und damit keine oberen und unteren Schranken im Sinne von (2.35), (2.36). Ihre Werte werden erhalten, indem man die Funktionen $\tilde{\psi}, \hat{\psi}$ aus den Gleichungen (2.35), (2.36) für ihre Berechnung verwendet.

Für die tatsächliche Berechnung führt man eine Basis von Versuchsfunktionen $\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ ein. Man entwickelt nun formal die $\tilde{\psi}, \hat{\psi}$ nach diesem Basissystem in der Form

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_i \tilde{\alpha}_i |\psi_i\rangle \quad (2.37)$$

$$|\hat{\psi}\rangle = \sum_i \hat{\alpha}_i |\psi_i\rangle \quad (2.38)$$

Die Funktionen ψ_i sind hier zunächst noch beliebig. Für σ aus (2.31) erhält man damit

$$\sigma = -\frac{1}{E} \langle \tilde{\psi} | c | \hat{\psi} \rangle = -\frac{1}{E} \sum_{i,j} \tilde{\alpha}_i [c]_{ij} \hat{\alpha}_j \quad (2.39)$$

mit $\tilde{\alpha}_i = \langle \tilde{\psi} | \psi_i \rangle$ (2.40) und $c_{ij} = \langle \psi_i | c | \psi_j \rangle$ (2.41)
 $[c]_{ij}$... inverse Matrix des Stoßoperators.

Entsprechend ergibt sich für den Tensor N aus (2.34)

$$N = \frac{1}{|\tilde{\psi}|^2} \langle \hat{\psi} | c | \hat{\psi} \rangle \leq \frac{1}{|\tilde{\psi}|^2} \sum_{i,j} \hat{\alpha}_i [c]_{ij} \hat{\alpha}_j \quad (2.42)$$

mit $\hat{\alpha}_i = \langle \hat{\psi} | \psi_i \rangle$ (2.43).

Für die Entwicklungskoeffizienten $\tilde{\alpha}_n$, $\hat{\alpha}_n$ gilt:

$$\tilde{\alpha}_n = \sum_{a=1}^{\infty} [c']_{na} \tilde{Z}_a \quad (2.44) \quad \text{und} \quad \hat{\alpha}_n = \sum_{a=1}^{\infty} [c']_{na} \hat{Z}_a. \quad (2.45)$$

Verwendet man die Gleichungen (2.37), (2.38) sowie (2.44) und (2.45) so erhält man für L und M aus (2.32) und (2.33) :

$$L = \frac{1}{|\tilde{\mathbf{z}}|^2 |\hat{\mathbf{z}}|^2} \sum_{a,a'} \tilde{Z}_a [c']_{aa'} \hat{Z}_{a'} \quad (2.46)$$

$$M = \frac{1}{|\tilde{\mathbf{z}}|^2 |\hat{\mathbf{z}}|^2} \sum_{a,a'} \hat{Z}_a [c']_{aa'} \tilde{Z}_{a'} \quad (2.47).$$

In den folgenden Gleichungen sind die Ergebnisse aus dem Variationsverfahren für die elektrische Leitfähigkeit, den Seebeckkoeffizienten und die Wärmeleitfähigkeit angegeben.

$$\sigma = - \frac{1}{|\tilde{\mathbf{z}}|^2} \sum_{a,a'} \tilde{Z}_a [c']_{aa'} \tilde{Z}_{a'} \quad (2.48)$$

$$S = - \frac{E}{|\hat{\mathbf{z}}|^2} \frac{\sum_{a,a'} \tilde{Z}_a [c']_{aa'} \hat{Z}_{a'}}{\sum_{a,a'} \tilde{Z}_a [c']_{aa'} \tilde{Z}_{a'}} \quad (2.49)$$

$$\kappa = \frac{T}{|\hat{\mathbf{z}}|^2} \frac{(\sum_{a,a'} \tilde{Z}_a [c']_{aa'} \tilde{Z}_{a'}) (\sum_{a,a'} \tilde{Z}_a [c']_{aa'} \hat{Z}_{a'})}{\sum_{a,a'} \tilde{Z}_a [c']_{aa'} \tilde{Z}_{a'}} - \frac{T}{|\hat{\mathbf{z}}|^2} \sum_{a,a'} \hat{Z}_a [c']_{aa'} \hat{Z}_{a'} \quad (2.50)$$

3. Die Berechnung der Transportkoeffizienten

Die Gleichungen des letzten Abschnittes (2.48-50) machen deutlich, daß zur Berechnung der in ihnen enthaltenen Transportkoeffizienten die Größen $\tilde{Z}_\alpha$, $\hat{Z}_\alpha$ sowie das Matrixelement des Stoßoperators $C_{\alpha\alpha'}$ auszuwerten sind. Um dies zu tun, muß man ein geeignetes Basissystem einführen, in dem man die Funktionen $\tilde{\psi}$ und $\hat{\psi}$, die als unbekannte Funktionen in der linearisierten Boltzmann-Gleichung der Form (2.23) enthalten sind, entwickelt. Dabei ist es wichtig, daß eine möglichst rasche Konvergenz der Transportkoeffizienten zu den Werten, die man erhielte, wenn man die linearisierte Boltzmann-Gleichung exakt lösen könnte, erreicht wird.

Wir wählen hier für die Funktionen $\psi_k(\gamma)/10/$

$$\psi_k(\gamma) = v_i(\gamma) \cdot (\delta(E_\gamma - \mu))^\alpha \quad (3.1)$$

Dabei berücksichtigt $v_i(\gamma)$ den winkelabhängigen Anteil von $\psi_k(\gamma)$, hingegen der Faktor $(\delta(E_\gamma - \mu))^\alpha$ die Abhängigkeit $\psi_k(\gamma)$ vom Betrag von $\vec{k}$. Mit Hilfe von (3.1) wird nun die Auswertung der $\tilde{Z}_\alpha$, $\hat{Z}_\alpha$ sowie der Matrix des Stoßoperators $C_{\alpha\alpha'}$, deren Inverse in den Gleichungen (2.48-50) auftritt, möglich und soll im weiteren erläutert werden.

3.1 Die von der Bandstruktur abhängigen Größen $\tilde{Z}_\alpha$ und $\hat{Z}_\alpha$

Auszuwerten sind die Größen

$$\tilde{Z}_\alpha = \langle \tilde{Z} | \psi_\alpha \rangle \quad (3.1.1) \quad \text{sowie} \quad \hat{Z}_\alpha = \langle \hat{Z} | \psi_\alpha \rangle \quad (3.1.2),$$

wobei

$$|\tilde{Z}\rangle = -e |\vec{E}| |v_i \frac{\partial f^0}{\partial \vec{k}}\rangle \quad (3.1.3)$$

$$\langle \hat{Z} \rangle = - \frac{i\hbar T}{T} \langle v_i \frac{\partial}{\partial E} \cdot E \rangle \quad (3.1.4)$$

$$\Psi_n = v_i(\gamma) (BE)^n \quad (3.1.5)$$

mit $E = E_T - \mu$, $v_i = \vec{v} \cdot \vec{E}/|\vec{E}|$ (3.1.6) gilt.

Damit erhält man für (3.1.1)

$$\tilde{Z}_n = - \frac{e|\vec{E}|}{(2\pi)^3} \sum_{\gamma} \int d^3k (AE)^n v_i(\gamma) \frac{\partial}{\partial E} \Psi_n = - \frac{e|\vec{E}|}{\Delta^3 r} \sum_{\gamma} (AE)^n v_i(\gamma) \frac{\partial}{\partial E} \Psi_n \quad (3.1.7)$$

Führt man nun die dimensionslose Größe $\bar{v}(E)$ sowie $\tilde{Z}_n$ ein, so ergibt

$$\tilde{Z}_n = e|\vec{E}| \frac{n}{m} \cdot \tilde{Z}_n \quad (3.1.8)$$

und
$$\tilde{Z}_n = - \int_{-\infty}^{\infty} dE (AE)^n \frac{\partial}{\partial E} \bar{v}(E) \quad (3.1.9)$$

mit der Definition $\bar{v}(E) = \frac{m}{3n\Delta^3 r} \sum_{\gamma} v^2(\gamma) \delta(E-E_T+\mu)$ (3.1.10).

Dabei wurde für die räumliche Verteilung von v^2

$$3 \frac{1}{\Delta^3 r} \sum_{\gamma} v^2(\gamma) \delta(E-E_T+\mu) = \frac{1}{\Delta^3 r} \sum_{\gamma} v^2(\gamma) \delta(E-E_T+\mu) \quad (3.1.11) \text{ angenommen.}$$

Für die Größe $\hat{Z}_n$ aus (3.1.2) läßt sich nun

$$\hat{Z}_n = \frac{1}{\Delta} \frac{i\hbar T}{T} \frac{n}{m} \cdot \hat{Z}_n \quad (3.1.12)$$

mit
$$\hat{Z}_n = - \int_{-\infty}^{\infty} dE (AE)^{n-1} \frac{\partial}{\partial E} \bar{v}(E) \quad (3.1.13) \text{ schreiben.}$$

Man sieht sofort, daß zwischen $\tilde{Z}_n$ und $\hat{Z}_n$

$$\hat{Z}_n = \tilde{Z}_{n-1} \quad (3.1.14) \text{ gilt.}$$

Damit kann man sich auf die Auswertung von $\tilde{Z}_n$ beschränken.

Die in (3.1.10) definierte Funktion $\bar{v}(E)$ variiert auf einer Energieskala der Einheit E_T (≈ 10000 K) und die ebenfalls im Integral (3.1.9) vorkommende Funktion $\frac{\partial}{\partial E}$ auf der Skala 100 K und wird außerhalb des Intervalles $(-T/2+\mu, \mu+T/2)$ sehr klein. Es ist daher angebracht $\bar{v}(E)$ für genügend kleine Temperaturen um das chem. Potential μ zu entwickeln und nach dem zweiten Glied abubrechen. So erhält man

$$\tilde{Z}_n = - \left[\bar{v}(0) \int dE \frac{\partial}{\partial E} (AE)^n + \frac{1}{\Delta} \bar{v}'(0) \int dE \frac{\partial}{\partial E} (AE)^{n-1} \right] \quad (3.1.15)$$

Die in (3.1.15) auftretenden Integrale, die wir durch I_n kennzeichnen, sind im Anhang (A.1.1) angegeben.

Tabelle (3.1.1) enthält die Größen $\tilde{J}_\alpha$ bis zu $\alpha = 7$

$$\begin{array}{ll} \tilde{J}_0 = \bar{v}(0) & \tilde{J}_4 = \bar{v}(0) I_4 \\ \tilde{J}_1 = \bar{v}'(0) \frac{1}{\lambda} I_2 & \tilde{J}_5 = \bar{v}'(0) \frac{1}{\lambda} I_5 \\ \tilde{J}_2 = \bar{v}(0) I_2 & \tilde{J}_6 = \bar{v}(0) I_6 \\ \tilde{J}_3 = \bar{v}'(0) \frac{1}{\lambda} I_4 & \tilde{J}_7 = \bar{v}'(0) \frac{1}{\lambda} I_7 \end{array}$$

Tabelle 3.1.1

Die Größen $\tilde{J}_\alpha$ definiert in (3.1.9)

3.2 Das Matricelement des Stoßoperators $C_{\alpha\alpha'}$

3.2.1 Analytische Auswertung von $C_{\alpha\alpha'}$

Wegen der Definition des Stoßoperators (2.20) läßt sich für das Matricelement des Stoßoperators $C_{\alpha\alpha'}$

$$C_{\alpha\alpha'} = \langle \psi_\alpha | C | \psi_{\alpha'} \rangle = \frac{\lambda}{(2\pi)^3} \sum_{\sigma\sigma'} \iint d^3k d^3k' f^*(E_T) [1 - f^*(E_T)] P_{T T'} [\psi_\alpha(\gamma) \psi_{\alpha'}(\gamma') - \psi_{\alpha'}(\gamma) \psi_\alpha(\gamma')] \quad (3.2.1.1)$$

schreiben., wobei für

$$P_{T T'} = \frac{2\pi}{k} \sum_H \frac{e^{-\delta E_H}}{2} \sum_{H'} \frac{\Delta^2}{(2\pi)^3} |\langle T H | H_{int} | T' H' \rangle|^2 \delta(E_T + E_H - E_{T'} - E_{H'}) \quad (3.2.1.2)$$

gilt, und die $\psi_\alpha(\gamma)$ aus Gleichung (3.1) bekannt sind.

Wegen der Symmetriebeziehung

$$f^*(E_T) [1 - f^*(E_T)] P_{T T'} = f^*(E_{T'}) [1 - f^*(E_{T'})] P_{T' T} \quad (3.2.1.3)$$

erhält man für $C_{\alpha\alpha'}$ aus (3.2.1.1)

$$C_{\alpha\alpha'} = \frac{\lambda}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \iint d^3k d^3k' f^*(E_T) [1 - f^*(E_T)] P_{T T'} [\psi_\alpha(\gamma) - \psi_{\alpha'}(\gamma)] [\psi_{\alpha'}(\gamma') - \psi_\alpha(\gamma')] \quad (3.2.1.4)$$

Verwendet man nun Gleichung (3.1) so gelangt man zu

$$C_{dd'} = - \frac{\hbar}{(2\pi)^3} \sum_{\sigma \sigma'} \iint d^3k d^3k' \{^{\sigma}(\mathbf{E}_T) [1 - \{^{\sigma}(\mathbf{E}_T)] P_{TT'} \sum_{s, s'=1} [v_i(\gamma) - s v_i(\gamma')] [v_i(\gamma) - s' v_i(\gamma')] \cdot \\ \cdot [(\lambda(\mathbf{E}_T, \mu))^s + s (\lambda(\mathbf{E}_T, \mu))]^s [(\lambda(\mathbf{E}_T, \mu))^{s'} + s' (\lambda(\mathbf{E}_T, \mu))]^{s'}] \quad (3.2.1.5).$$

Man definiert nun die Funktion $P_{YY'}(\Omega)$ durch

$$P_{YY'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{HH'} g_H \frac{\Delta^2 r}{(2\pi)^3} |\langle TH | H_{WW} | T'H' \rangle|^2 \delta(E - E' + E_H - E_{H'}) = \\ = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\Omega \frac{\omega}{1 - e^{-\omega}} P_{TT'}(\Omega) \delta(E - E' - \Omega) \quad (\omega = \beta \Omega) \quad (3.2.1.6),$$

beziehungsweise

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1 - e^{-\omega}}{\omega} \sum_{HH'} g_H \frac{\Delta^2 r}{(2\pi)^3} |\langle TH | H_{WW} | T'H' \rangle|^2 \delta(\Omega + E_H - E_{H'}) \quad (3.2.1.7).$$

Hier bedeutet $\Delta^2 r$ das Volumenelement, auf das die Zustände $|Y\rangle$ normiert sind. $|M\rangle$ sind die Systemzustände, g_H die thermodynamischen Gewichte für die Zustände $|M\rangle$. Somit läßt sich $C_{dd'}$ aus Gleichung (3.2.1.5) als

$$C_{dd'} = - \frac{\hbar}{2(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{\hbar} \sum_{s, s'=1} \iint dE dE' d\Omega \{^{\sigma}(E) [1 - \{^{\sigma}(E')] [(\lambda E)^s + s (\lambda E')]^s [(\lambda E')^{s'} + s' (\lambda E')]^{s'}] \cdot \\ \cdot \frac{\omega}{1 - e^{-\omega}} \delta(E - E' - \Omega) \sum_{\sigma \sigma'} \iint d^3k d^3k' P_{TT'}(\Omega) [v_i(\gamma) - s v_i(\gamma')] [v_i(\gamma) - s' v_i(\gamma')] \delta(E - E_T + \mu) \cdot \\ \cdot \delta(E' - E_T + \mu) \quad (3.2.1.10)$$

schreiben.

Die bisherige Vorgangsweise hat es mit sich gebracht, daß der Integrand unter den Integralen E, E' und Ω in Gleichung (3.2.1.10) faktorisiert in einen ersten Teil, der nur wohlbekannte, materialunabhängige Funktionen enthält, sowie in einen zweiten, der die von der Bandstruktur abhängigen Größen $v_i(\gamma)$, E_T und $P_{YY'}(\Omega)$, die Funktion also, die von den physikalischen Eigenschaften der Streuprozesse der Leitungselektronen abhängt, enthält. Diese Aufspaltung in zwei Faktoren ermöglicht eine wesentlich allgemeinere Vorgangsweise bei der Berechnung vom Matricelement $C_{dd'}$.

Auf die Symmetrie von $P_{\gamma\gamma'}(\Omega)$ in der Form

$$P_{\gamma\gamma'}(-\Omega) = P_{\gamma\gamma'}(\Omega) \quad (3.2.1.11)$$

sei wegen der späteren Verwendung noch hingewiesen.

Entsprechend der obigen Überlegungen liegt es nahe die Spektralfunktionen /10/ $G_{SS'}(E, E', \Omega)$

$$\begin{aligned} G_{SS'}(E, E', \Omega) &= \frac{m}{\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} \iint d^3k d^3k' P_{\gamma\gamma'}(\Omega) [v_i(\gamma) - s v_i(\gamma')] [v_i(\gamma') - s' v_i(\gamma')] = \\ &= \delta(E - E_{\gamma} + \mu) \delta(E' - E_{\gamma'} + \mu) \end{aligned} \quad (3.2.1.12)$$

einzuführen. Ausschließlich sie enthalten die Eigenschaften des gerade betrachteten Festkörpers, die in das Matrixelement $C_{ss'}$ eingehen. So ergibt sich beispielsweise für die Potential-Streuung (= Streuung an Fremdatomen und Leerstellen) die Spektralfunktion

$$\begin{aligned} G_{SS'}(E, E', \Omega) &= k_B \alpha_v \frac{\bar{v}(E) N(E') + ss' \bar{v}(E') N(E)}{\bar{v}(0) \cdot N(0)} \delta(\Omega) \\ N(E) &= \frac{1}{\Delta E} \sum_{\gamma} \delta(E - E_{\gamma} + \mu) \end{aligned} \quad (3.2.1.13)$$

(siehe dazu auch Kapitel 4.1.1), und für die Phononen-Streuung die Spektralfunktion $G_{--}(E, E', \Omega)$ als

$$G_{--}(E, E', \Omega) = \frac{1}{\Delta} \alpha \left\{ \left[\kappa \frac{4\Omega}{\Omega_0^2} - \kappa^2 \frac{4\Omega^3}{\Omega_0^4} \right] \theta(\Omega_0 - \Omega) + [1 - 2\kappa + \kappa^2] \delta(\Omega - \Omega_0) \right\} \quad (3.2.1.14)$$

(siehe dazu auch Kapitel 4.1.3).

Man findet rasch, daß

$$G_{SS'}(E', E, -\Omega) = ss' G_{SS'}(E, E', \Omega) \quad (3.2.1.15)$$

$$G_{+-}(E, E', \Omega) = G_{-+}(E, E', \Omega) \quad (3.2.1.16)$$

gilt. Aus der Gleichung (3.2.1.15) folgen die Symmetriebeziehungen

$$G_{SS'}(0, 0, -\Omega) = ss' G_{SS'}(0, 0, \Omega) \quad (3.2.1.17)$$

$$\text{und} \quad \left. \frac{\partial G_{SS'}}{\partial E_1} (E_1, E_2, -\Omega) \right|_{E_1=E_2=0} = ss' \left. \frac{\partial G_{SS'}}{\partial E_2} (E_1, E_2, \Omega) \right|_{E_1=E_2=0} \quad (3.2.1.18).$$

Gleichung (3.2.1.10) läßt sich also als

$$C_{ss'} = - \frac{n}{\lambda m \hbar^4 (2\pi)^2} \left\{ \frac{\lambda^2}{2} \sum_{ss',s''} \iiint dE dE' d\Omega f(E) [1-f(E')] [(\lambda E)^s + s (\lambda E')^s] \cdot \right. \\ \left. \cdot [(\lambda E)^{s'} + s' (\lambda E')^{s'}] \frac{\omega}{1-e^{-\omega}} G_{ss'}(E, E', \Omega) \delta(E-E'-\Omega) \right\}$$

(3.2.1.19)

schreiben und wegen (3.2.1.15) gilt

$$C_{ss'} = - \frac{n}{\lambda m \hbar^4 (2\pi)^2} \left\{ \lambda^2 \sum_{ss',s''} \iiint_0^\infty dE dE' d\Omega f(E) [1-f(E')] [(\lambda E)^s + s (\lambda E')^s] \cdot \right. \\ \left. \cdot [(\lambda E)^{s'} + s' (\lambda E')^{s'}] \frac{\omega}{1-e^{-\omega}} G_{ss'}(E, E', \Omega) \delta(E-E'-\Omega) \right\} \quad (3.2.1.20)$$

- d.h., wir benötigen die Funktionen $G_{ss'}(E, E', \Omega)$ nur in einem Halbraum.

Wie in /10/ bemerkt ist, sind die Funktionen $G_{ss'}(E, E', \Omega)$ im allgemeinen nur schwach von den Variablen E, E' abhängig verglichen mit den sonstigen Faktoren des Integranden, die auf der Energieskala 100 K variieren und sehr schnell sehr klein werden.

Daher werden wir die Funktionen $G_{ss'}$ um $E, E' = 0$ entwickeln, und für nicht zu hohe Temperaturen nach dem zweiten Term der Entwicklung abbrechen. Damit erhält man für das Matrixelement $C_{ss'}$ unter Beachtung von

$$f(x) = 1/(e^x + 1) \quad (3.2.1.21)$$

und (3.2.1.18)

$$C_{ss'} = - \frac{n}{\lambda m \hbar^4 (2\pi)^2} \sum_{ss',s''} \left\{ \iiint_{-\infty}^0 dE dE' d\omega f(E) [1-f(E')] [E^s + s E'^s] [E'^{s'} + s' E''^{s'}] \cdot \right. \\ \cdot \frac{\omega}{1-e^{-\omega}} G_{ss'}^0(\Omega) \delta(E-E'-\omega) + \frac{1}{\lambda} \iiint_{-\infty}^0 dE dE' d\omega f(E) [1-f(E')] [E^s + s E'^s] [E'^{s'} + s' E''^{s'}] \cdot \\ \left. \cdot \frac{\omega}{1-e^{-\omega}} G_{ss'}^1(\Omega) \cdot E \delta(E-E'-\omega) \right\} \quad (3.2.1.22).$$

Wir definieren die Funktionen $G_{ss'}^0(\Omega)$ und $G_{ss'}^1(\Omega)$ als

$$G_{ss'}^0(\Omega) = G_{ss'}(0, 0, \Omega) \quad (3.2.1.23)$$

$$G_{ss'}^1(\Omega) = \left. \frac{\partial G_{ss'}}{\partial E_1} (E_1, E_2, \Omega) \right|_{E_1=E_2=0} \quad (3.2.1.24).$$

Die Hinzunahme der Ableitungen von $G_{ss'}$ ist dabei von großer Bedeutung. Ohne sie kann kein vernünftiger Wert für den Seebeckkoeffizienten erhalten werden, wie später noch zu sehen sein wird.

Für die weitere Auswertung betrachten wir zunächst den Beitrag von G_{SS}^0 zum Matrixelement $C_{\alpha\alpha'}$

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} dE dE' d\omega f(E) [1-f(E')] [E^{\alpha} s E'^{\alpha'}] [E^{\alpha'} + s' E'^{\alpha'}] \frac{\omega}{1-e^{-\omega}} G_{SS'}^0(\Omega) \delta(E-E'-\omega) \quad (3.2.1.25)$$

Nach mühevoller aber elementarer Rechnung erhält man für (3.2.1.25)

$$(-1)^{\alpha+\alpha'} s s' \sum_{\ell=0}^{\lfloor \frac{\alpha+\alpha'+1}{2} \rfloor} s' K_{2\ell}^{\alpha\alpha'} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} G_{SS'}^0(\Omega) \omega^{\alpha+\alpha'-2\ell} \quad (3.2.1.26)$$

mit dem Symbol $[x] = n \dots$ größte ganze Zahl $\leq x$, und mit den Koeffizienten

$$s s' K_{2\ell}^{\alpha\alpha'} = \sum_{i=0}^{\alpha+\alpha'-2\ell} \left(\sum_{k=\max(0, i-\alpha')}^{\min(\alpha, i)} s C_k^{\alpha} s' C_{i-k}^{\alpha'} \right) \frac{(\alpha+\alpha'-i)!}{(\alpha+\alpha'+1-i-2\ell)!} 2 \eta(2\ell) \quad \ell \gg 1 \quad (3.2.1.27)$$

sowie

$$s s' K_0^{\alpha\alpha'} = \sum_{i=0}^{\alpha+\alpha'} \left(\sum_{k=\max(0, i-\alpha')}^{\min(\alpha, i)} s C_k^{\alpha} s' C_{i-k}^{\alpha'} \right) \frac{1}{\alpha+\alpha'+1-i} \quad \ell=0 \quad (3.2.1.28)$$

Die Größen $s C_k^{\alpha}$ sind dabei als

$$s C_k^{\alpha} = (-1)^k s \cdot \frac{\alpha!}{k! (\alpha-k)!} \quad 1 \leq k \leq \alpha \quad (3.2.1.29)$$

$$\text{und } s C_0^{\alpha} = s + 1 \quad \text{für } k=0 \quad (3.2.1.30)$$

$$\text{sonst } s C_k^{\alpha} = 0 \quad (3.2.1.31) \quad \text{eingeführt. Hierbei}$$

ist $\eta(1)$ die in Anhang (A.1.1) angegebene Eta-Funktion.

In ähnlicher Weise erhält man den Beitrag von $G_{SS'}^1$ zum Matrixelement $C_{\alpha\alpha'}$ als

$$\frac{1}{\hbar} \iiint_{-\infty}^{\infty} dE dE' d\omega f(E) [1-f(E')] [E^{\alpha} s E'^{\alpha'}] [E^{\alpha'} + s' E'^{\alpha'}] \frac{\omega}{1-e^{-\omega}} G_{SS'}^1(\Omega) \cdot E \delta(E-E'-\omega) \quad (3.2.1.32)$$

in der Form

$$\frac{1}{\hbar} \sum_{\ell=0}^{\lfloor \frac{\alpha+\alpha'+1}{2} \rfloor} s' K_{2\ell}^{\alpha\alpha'} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} G_{SS'}^1(\Omega) \omega^{\alpha+\alpha'+1-2\ell} \quad (3.2.1.33)$$

mit den Koeffizienten

$$s_{12}^{s' a'} K_{2\ell}^{a'} = \sum_{i=0}^{a+a'-1-2\ell} \left(\sum_{k=\max(0, i-a')}^{\min(i, a)} s_k^{s'} c_{i-k}^{a'} \right) \frac{(\alpha + \alpha' + 1 - i)!}{(\alpha + \alpha' + 2 - i - 2\ell)!} 2\eta(2\ell) \quad \ell \geq 1 \quad (3.2.1.34)$$

$$s_{12}^{s' a'} K_0^{a'} = \sum_{i=0}^{a+a'} \left(\sum_{k=\max(0, i-a')}^{\min(i, a)} s_k^{s'} c_{i-k}^{a'} \right) \frac{1}{a + a' + 2 - i} \quad \ell = 0 \quad (3.2.1.35)$$

Zur Berechnung der Gleichungen (3.2.1.26) und (3.2.1.33) wurde die in Anhang (A.1.6) angegebene Gleichung verwendet.

Zusammenfassend läßt sich also für das Matrixelement $C_{aa'}$ des Stoßoperators schreiben :

$$C_{aa'} = - \frac{n}{\Delta m \hbar 4(2\pi)^2} \sum_{s, s'} \{ (-1)^{a+a'} s \cdot s' \sum_{\ell=0}^{\lfloor \frac{a+a'}{2} \rfloor} s_{12}^{s' a'} K_{2\ell}^{a'} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)(1 - e^{-\beta\hbar\omega})} G_{ss'}^0(\Omega) \omega^{a+a'-2\ell} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\ell=0}^{\lfloor \frac{a+a'+1}{2} \rfloor} s_{12}^{s' a'} K_{2\ell}^{a'} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)(1 - e^{-\beta\hbar\omega})} G_{ss'}^1(\Omega) \omega^{a+a'+1-2\ell} \} \quad (3.2.1.36)$$

3.2.2 Die Spektralfunktionen $G_{ss'}^0$ und $G_{ss'}^1$

Um das Matrixelement $C_{aa'}$ auszuwerten, muß man die im Integranden von Gleichung (3.2.1.36) stehenden Funktionen $G_{ss'}^0(\Omega)$ und $G_{ss'}^1(\Omega)$ kennen. Die Gestalt der Spektralfunktionen $G_{ss'}$ für die Potential- und die Phononen-Streuung (3.2.1.13), (3.2.1.14) legen nahe $G_{ss'}^0(\Omega)$ und $G_{ss'}^1(\Omega)$ als Polynome und Summen von Deltafunktionen für die nachfolgende Rechnung anzugeben. Dies bedeutet also

$$G_{ss'}^0(\Omega) = \theta(\bar{\omega} - \omega) \sum_{m=0}^{j_{ss'}} s_{12}^{s' a'} a_m^m \omega^m + \sum_{\ell=1}^{k_{ss'}} b_\ell^s \delta(\omega - \omega_\ell^{s'}) \quad (3.2.2.1)$$

$$\text{und } G_{ss'}^1(\Omega) = \theta(\bar{\omega} - |\omega|) \sum_{m=0}^{\bar{j}_{ss'}} s_{12}^{s' a'} \bar{a}_m^m \omega^m + \sum_{\ell=1}^{\bar{k}_{ss'}} \bar{b}_\ell^s \delta(\omega - \bar{\omega}_\ell^{s'}) \quad (3.2.2.2)$$

Man überzeugt sich leicht, daß die Koeffizienten s_a^s , s_b^s dimensionslose Größen, die Koeffizienten $s_a^s \bar{a}$, $s_b^s \bar{b}$ Größen der Dimension $[1/K]$ darstellen.

Für das Matrixelement $C_{ss'}$ erhält man mit Hilfe von (3.2.2.1) und (3.2.2.2)

$$\begin{aligned}
 C_{ss'} = & -\frac{n}{\lambda m k_4 (2\pi)^2} \sum_{ss'+1} \left[(-1)^{ss'} s s' \left\{ \sum_{i=-2[\frac{ss'}{2}]}^{j_{ss'}} \left(\sum_{\ell=\max(0, \langle -\frac{i}{2} \rangle)}^{\min([\frac{ss'}{2}], [\frac{1}{2}(j_{ss'}-i)])} s' K_{\ell\ell}^{ss'} a_{i+2\ell}^{ss'} \right) \int_0^{\bar{\omega}} d\omega \frac{\omega^{ss'+2+i}}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} + \right. \right. \\
 & + \sum_{\ell=0}^{[\frac{ss'}{2}]} s' K_{\ell\ell}^{ss'} \sum_{i=1}^{ss'} s' b_{ij_{ss'}}^{ss'} \frac{\omega_i}{(e^{\omega_i}-1)(1-e^{-\omega_i})} \left. \right\} + \\
 & + \frac{1}{\lambda} \sum_{i=-2[\frac{ss'+1}{2}]}^{j_{ss'+1}} \left(\sum_{\ell=\max(0, \langle -\frac{i}{2} \rangle)}^{\min([\frac{ss'+1}{2}], [\frac{1}{2}(j_{ss'+1}-i)])} s' K_{\ell\ell}^{ss'+1} a_{i+2\ell}^{ss'+1} (1+(-1)^{ss'+1+i}) \int_0^{\bar{\omega}} d\omega \frac{\omega^{ss'+3+i}}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} + \right. \\
 & + \left. \frac{1}{\lambda} \sum_{\ell=0}^{[\frac{ss'+1}{2}]} s' K_{\ell\ell}^{ss'+1} \sum_{i=1}^{ss'+1} s' b_{ij_{ss'+1}}^{ss'+1} \frac{\omega_i}{(e^{\omega_i}-1)(1-e^{-\omega_i})} \right] \quad (3.2.2.3) .
 \end{aligned}$$

Die Symbole $[x]$, $\langle x \rangle$ bedeuten dabei:

$$[x] = n \dots \text{größte ganze Zahl} \leq x$$

$$\langle x \rangle = m \dots \text{kleinste ganze Zahl} \geq x$$

Gleichung (3.2.2.3) stellt nun eine unmittelbar auswertbare Form für $C_{ss'}$ dar. Neben den durch die Spektralfunktionen zu ermittelnden Koeffizienten $s'a$, $s'b$, $s'\bar{a}$ und $s'\bar{b}$ sowie der Integrationsgrenze $\bar{\omega}$, stehen in (3.2.2.3) Integrale $J_n(x)$

$$J_n(x) = \int_0^x \frac{\omega^n}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} d\omega \quad (3.2.2.4),$$

die im Anhang (A.1.1), (A.1.2) behandelt sind.

3.3 Rechenablauf und Programmaufbau zur Berechnung der Transportkoeffizienten

Um den Temperaturverlauf der Transportkoeffizienten rechnerisch zu erfassen, werden Rechenprogramme erstellt, deren Aufbau und Funktion im folgenden erläutert werden soll.

Die Gleichungen (2.48)-(2.50) sowie die Definition

$$\begin{aligned}
 C_{ss'} = & \sum_{ss'+1} \left\{ \iiint_{-\infty}^{\infty} dE dE' d\omega f(E) [1-f(E')] [E'+sE'] [E'+s'E'] \frac{\omega}{1-e^{-\omega}} G_{ss'}^1(\omega) \delta(E-E'-\omega) + \right. \\
 & + \left. \frac{1}{\lambda} \iiint_{-\infty}^{\infty} dE dE' d\omega f(E) [1-f(E')] [E'+sE'] [E'+s'E'] \frac{\omega}{1-e^{-\omega}} G_{ss'}^1(\omega) E \delta(E-E'-\omega) \right\} \quad (3.3.1)
 \end{aligned}$$

ergeben für die Transportkoeffizienten ρ , S , und κ

$$\rho = \frac{m}{n} \frac{k_0}{e^2 \hbar 4 (\pi)^2} T \frac{1}{\sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \tilde{g}_{\alpha'}} \quad (3.3.2)$$

$$S = - \frac{k_0}{e} \frac{\sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \hat{g}_{\alpha'}}{\sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \tilde{g}_{\alpha'}} \quad (3.3.3)$$

$$\kappa = \frac{n}{m} k_0 \hbar 4 (\pi)^2 \left\{ \sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \hat{g}_{\alpha'} - \frac{(\sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \tilde{g}_{\alpha'})^2}{\sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \tilde{g}_{\alpha'}} \right\} \quad (3.3.4).$$

Dabei wurde die Symmetrie von $\mathcal{C}_{\alpha\alpha'}$ bei der Vertauschung der Indizes α und α' ausgenutzt. Wie aus (3.3.2)-(3.3.4) ersichtlich ist, ist es notwendig für jede beliebige Temperatur die Größen $\tilde{g}_\alpha$, $\hat{g}_\alpha$ und $\mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1}$ (über die Matrix des Stoßoperators) berechnen zu können.

3.3.1 Die Größen $\tilde{g}_\alpha$ und $\hat{g}_\alpha$

Wie aus Gleichung (3.1.14) hervorgeht, sind die Größen $\tilde{g}_\alpha$ und $\hat{g}_\alpha$ miteinander in der Form

$$\hat{g}_\alpha = \tilde{g}_{\alpha+1} \quad (3.3.1.1) \text{ verknüpft. Für die } \tilde{g}_\alpha \text{ gel-}$$

ten die Relationen, wie sie in Tabelle 3.1.1 angegeben sind. Dabei stellen die $\bar{v}(0)$ und $\bar{v}'(0)$ strukturabhängige und temperatur abhängige Größen dar, die in der Eingabe zur Verfügung gestellt werden müssen. Die Integrale I_n sind als programminterne Daten bereitzustellen.

3.3.2 Das Matricelement des Stoßoperators

Wir gehen zunächst von der Gleichung (3.3.1) aus, wobei wir für die im Integranden vorkommenden Spektralfunktionen G_{SS}^0 , und G_{SS}^1 annehmen, daß diese in Form einer Tabelle und Summen von Deltafunktionen für jede gewünschte Temperatur angegeben werden können. Dies legen die Spektralfunktionen für die Potential- und die Phononen-Steuerung (3.2.1.13), (3.2.1.14) nahe. Wir haben die G_{SS}^0 und G_{SS}^1 als

$$G(\Omega) = \begin{array}{|c|} \hline \Omega | G(\Omega) \\ \hline \vdots \\ \hline \end{array} + \sum_j b_j \delta(\Omega - \Omega_j) \quad (3.3.2.1)$$

vorliegen. In diesem Zusammenhang sei auf Kapitel 4 verwiesen, in dem die Berechnung der Spektralfunktionen für die Potential-, die Magnetische- und die Phononen-Streuung detailliert angegeben ist.

Ausgehend von den Spektralfunktionen in der Form (3.3.2.1) stellen wir uns nun die Aufgabe, das Matricelement $\mathcal{C}_{ss'}$ für beliebige, sinnvoll gewählte Temperaturen berechnen zu können. Dazu betrachten wir $\mathcal{C}_{ss'}$, das Matricelement des Stoßoperators,

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{ss'} = & \sum_{\substack{n, n' \\ n, n' \neq 1}} \left\{ (-1)^{n+n'} \sum_{l=0}^{\left[\frac{n+n'}{2}\right]} s_l^i K_{2l}^{n, n'} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\frac{\omega}{T}} - 1)(1 - e^{-\omega})} G_{ss'}^0(\Omega) \omega^{n+n'-2l} \right. \\ & \left. + \frac{1}{\beta} \sum_{l=0}^{\left[\frac{n+n'+1}{2}\right]} s_l^i K_{2l}^{n, n'} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\frac{\omega}{T}} - 1)(1 - e^{-\omega})} G_{ss'}^1(\Omega) \omega^{n+n'+1-2l} \right\} \end{aligned} \quad (3.3.2.2).$$

Bei der numerischen Auswertung der Integrale (3.3.2.2) wollen wir mit äquidistantem Stützstellenabstand integrieren. Da für kleinere Temperaturen der dimensionslose Stützstellenabstand $\Delta\omega = \Delta\Omega/T$ immer größer wird, werden wir G_{SS}^0 und G_{SS}^1 in der Gestalt

$$G_{ss'}^0(\Omega) = \theta(\bar{\omega}-\omega) \sum_{m=0}^{j_{ss'}} ss' a_m \omega^m + \sum_{l=1}^{u_{ss'}} b_l \delta(\omega - \frac{ss'}{\omega_l}) + \sum_{l=n_{ss'}+1}^{k_{ss'}} \bar{b}_l \delta(\omega - \frac{ss'}{\bar{\omega}_l}) \quad (3.3.2.3)$$

$$\text{mit } ss' b_l = \int_{(\frac{ss'}{\omega_{l-1}} + \frac{ss'}{\omega_l})/2}^{(\frac{ss'}{\omega_l} + \frac{ss'}{\omega_{l+1}})/2} d\omega G_{ss'}^0(\Omega) \quad \text{für } 1 \leq n_{ss'}$$

$$G_{ss'}^1(\Omega) = \theta(\bar{\omega}-\omega) \sum_{m=0}^{j_{ss'}} ss' \bar{a}_m \omega^m + \sum_{l=1}^{\bar{n}_{ss'}} \bar{b}_l \delta(\omega - \frac{ss'}{\bar{\omega}_l}) + \sum_{l=\bar{n}_{ss'}+1}^{\bar{k}_{ss'}} \bar{b}_l \delta(\omega - \frac{ss'}{\bar{\omega}_l}) \quad (3.3.2.4)$$

$$\text{mit } ss' \bar{b}_l = \int_{(\frac{ss'}{\bar{\omega}_{l-1}} + \frac{ss'}{\bar{\omega}_l})/2}^{(\frac{ss'}{\bar{\omega}_l} + \frac{ss'}{\bar{\omega}_{l+1}})/2} d\omega G_{ss'}^1(\Omega) \quad \text{für } 1 \leq \bar{n}_{ss'}$$

fordern, um bei tiefen Temperaturen für kleine ω ($\ll \bar{\omega}$) analytisch integrieren zu können. Die erste Summe über Delta-funktionen in Gleichung (3.3.2.3) und (3.3.2.4) stammt dabei von der numerischen Integration von $G_{ss'}^0$, bzw. $G_{ss'}^1$, her, die zweite Summe von der Eingabe (3.3.2.1).

Wir benutzen Gleichung (3.2.2.3):

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{ss'} = & \sum_{ss'=1} \left\{ (-1)^{ss'} \left\{ \sum_{i=2}^{j_{ss'}} \left(\sum_{l=\max(0, (-\frac{i}{2}))}^{\min([\frac{ss'+i}{2}], [\frac{1}{2}(j_{ss'}-i)])} ss' K_{se}^{ss'} \bar{a}_{i+2l} \right) \int_0^{\bar{\omega}} d\omega \frac{\omega^{ss'+i+2+2l}}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} \right. \right. \\ & + \sum_{l=0}^{[\frac{ss'+i}{2}]} ss' K_{se}^{ss'} \sum_{i=1}^{k_{ss'}} \frac{ss' \omega_i^{ss'+i+2-2l}}{(e^{\omega_i}-1)(1-e^{-\omega_i})} \left. \right\} + \\ & + \frac{1}{\delta} \sum_{i=2}^{\bar{j}_{ss'}} \left(\sum_{l=\max(0, (-\frac{i}{2}))}^{\min([\frac{ss'+i+1}{2}], [\frac{1}{2}(\bar{j}_{ss'}-i)])} ss' K_{se}^{ss'} \bar{a}_{i+2l} (1+(-1)^{ss'+i+2l}) \right) \int_0^{\bar{\omega}} d\omega \frac{\omega^{ss'+i+3+2l}}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} \\ & + \frac{1}{\delta} \sum_{l=0}^{[\frac{ss'+i+1}{2}]} ss' K_{se}^{ss'} \sum_{i=1}^{\bar{k}_{ss'}} \frac{ss' \bar{\omega}_i^{ss'+i+3-2l}}{(e^{\bar{\omega}_i}-1)(1-e^{-\bar{\omega}_i})} \left. \right\} \end{aligned} \quad (3.3.2.5)$$

Damit muß man, um das Matrixelement zu berechnen, zunächst aus der Tabelle von (3.3.2.1) die Koeffizienten $ss' a$, $ss' \bar{a}$ sowie die noch zum Teil unbekannten Größen $ss' b$, $ss' \bar{b}$, $ss' \omega$ und $ss' \bar{\omega}$, die aus der numerischen Integration von $G_{ss'}^0$ und $G_{ss'}^1$ zu bestimmen sind, berechnen. Die obere Integrationsgrenze $\bar{\omega}$ gibt dabei das Ende der Polynomentwicklung für $G_{ss'}^0$ und $G_{ss'}^1$ an.

Im nächsten Schritt kann man dann $\mathcal{C}_{ss'}$ mit Hilfe von (3.3.2.5) auswerten.

3.3.3 Die Berechnung der Transportkoeffizienten mit Hilfe der Programmpakete AS und TC

3.3.3.1 Das Programmpaket AS

Das Programmpaket AS dient dazu, die in Gleichung (3.3.2.5) stehenden Koeffizienten *a , ${}^*\bar{a}$, *b , ${}^*\bar{b}$, ${}^*\omega$ und ${}^*\bar{\omega}$ aus den Spektralfunktionen G_{SS}° und $G_{SS}^{\prime}$ zur Verfügung gestellt in der Form

$$G(\Omega) = \begin{array}{|c|c|} \hline \Omega & G(\Omega) \\ \hline \end{array} + \sum_j b_j \delta(\Omega - \Omega_j) \quad (3.3.3.1.1),$$

zu berechnen. Es werden die *a , ${}^*\bar{a}$ als Koeffizienten des bestpassendsten Polynoms zur Tabelle aus (3.3.3.1.1) bestimmt. Im Programmpaket AS besteht die Möglichkeit, die Koeffizienten *a , ${}^*\bar{a}$ indirekt durch die Anpassung an das bestpassendste Legendre oder Tschebyscheff Polynom - oder aber direkt durch Anpassen an das bestpassendste Polynom, also Summen von Potenzen Ω^n , zu erhalten.

Da im allgemeinen aber eine Entwicklung in Polynome nur in einem Teil des Intervalles, in dem die $G_{SS}^{\prime}(\Omega)$ definiert und $\neq 0$ sind, erfolgen kann, berechnet man die Integrale für das komplementäre Teilintervall aus (3.3.2.2) numerisch, und im Fall vom Programmpaket AS mit Hilfe der Trapezformel. So erhält man mit der Tabelle aus (3.3.3.1.1) die Größen *b , ${}^*\bar{b}$, ${}^*\omega$ und ${}^*\bar{\omega}$, die nicht schon aus der Eingabe (3.3.3.1.1) vorgelegen haben.

Zur Illustration, wie eine Eingabe für das Programmpaket AS auszu sehen hat, um sinnvollverarbeitet zu werden, sind in Tabelle

(3.3.3.1.1) die Daten der Spektralfunktionen ($1=G_{--}^{\circ}, \dots, 6=G_{++}^{\circ}$) bei der angegebenen Temperatur angeben. Jede Spektralfunktion setzt sich dabei, wie in (3.3.3.1.1) gefordert, als Tabelle und Summen von Deltafunktionen zusammen.

Um den Ablauf und die Funktion der einzelnen Unterprogramme des Programmpaketes AS darzulegen, ist in Abbildung 3.3.3.1.1 ein Flußdiagramm dargestellt, das den logischen Ablauf erklären soll. In Abbildung 3.3.3.1.2 sind die Unterprogramme und ihre Funktion im Programmpaket AS angegeben.

Somit erhält man als Ergebnis des Programmpaketes AS die Spektralfunktionen $G_{SS'}^{\circ}$ und $G_{SS'}^{\circ}$ in der Form

$$G_{SS'}^{\circ}(\Omega) = \theta(\bar{\omega} - \omega) \sum_{m=0}^{j_{SS'}} s_{ss'}^m a_m \omega^m + \sum_{\ell=1}^{K_{SS'}} s_{ss'}^{\ell} b_{\ell} \delta(\omega - \omega_{\ell}^{\ell}) \quad (3.3.3.1.2)$$

$$G_{SS'}^{\circ}(\Omega) = \theta(\bar{\omega} - |\omega|) \sum_{m=0}^{j_{SS'}} s_{ss'}^m \bar{a}_m \omega^m + \sum_{\ell=1}^{K_{SS'}} s_{ss'}^{\ell} \bar{b}_{\ell} \delta(\omega - \omega_{\ell}^{\ell}) \quad (3.3.3.1.3)$$

Zur genaueren Beschreibung von AS befinden sich die Flußdiagramme und Programmlisten aller Unterprogramme im Anhang (A.2.1.2).

A S - I N P U T

TEMP= .20CE+02

1-TE SPEKTRALFUNKTION - TABELLE X1 Y1 , X2 Y2 . . .

0.	0.	,	.312500E+02	.271666E+02
.625000E+02	.517500E+02	,	.937500E+02	.711563E+02
.125000E+03	.828000E+02	,	.156250E+03	.840937E+02
.187500E+03	.724500E+02	,	.218750E+03	.452813E+02
.250000E+03	0.	,	-1	-1

DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...

0.	0.	,	.998043E+02	0.
.250000E+03	0.	,		

2-TE SPEKTRALFUNKTION - TABELLE X1 Y1 , X2 Y2 . . .

0.	0.	,	.312500E+02	0.
.625000E+02	0.	,	.937500E+02	0.
.125000E+03	0.	,	.156250E+03	0.
.187500E+03	0.	,	.218750E+03	0.
.250000E+03	0.	,	-1	-1

DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...

0.	0.	,	.998043E+02	0.
----	----	---	-------------	----

3-TE SPEKTRALFUNKTION - TABELLE X1 Y1 , X2 Y2 . . .

0.	0.	,	.312500E+02	.431250E+00
.625000E+02	.345000E+01	,	.937500E+02	.116438E+02
.125000E+03	.276000E+02	,	.156250E+03	.539063E+02
.187500E+03	.931500E+02	,	.218750E+03	.147919E+03
.250000E+03	.220800E+03	,	-1	-1

DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...

0.	0.	,	.998043E+02	0.
.250000E+03	0.	,		

4-TE SPEKTRALFUNKTION - TABELLE X1 Y1 , X2 Y2 . . .

-.250000E+03	0.	,	-.218750E+03	0.
-.187500E+03	0.	,	-.156250E+03	0.
-.125000E+03	0.	,	-.937500E+02	0.
-.625000E+02	0.	,	-.312500E+02	0.
0.	0.	,	.312500E+02	0.
.625000E+02	0.	,	.937500E+02	0.
.125000E+03	0.	,	.156250E+03	0.
.187500E+03	0.	,	.218750E+03	0.
.250000E+03	0.	,	-1	-1

DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...

0.	0.	,	.998043E+02	0.
-.998043E+02	0.	,		

5-TE SPEKTRALFUNKTION - TABELLE X1 Y1 , X2 Y2 . . .

-.250000E+03	.474805E-03	,	-.218750E+03	.415454E-03
-.187500E+03	.356104E-03	,	-.156250E+03	.296753E-03
-.125000E+03	.237403E-03	,	-.937500E+02	.178052E-03
-.625000E+02	.118701E-03	,	-.312500E+02	.593506E-04
0.	0.	,	.312500E+02	.593506E-04
.625000E+02	.118701E-03	,	.937500E+02	.178052E-03
.125000E+03	.237403E-03	,	.156250E+03	.296753E-03
.187500E+03	.356104E-03	,	.218750E+03	.415454E-03
.250000E+03	.474805E-03	,	-1	-1
DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...				

0. 0. , .998043E+02 0.

-.998043E+02 0. , .250000E+03 0.
 -.250000E+03 0. ,

6-TE SPEKTRALFUNKTION - TABELLE X1 Y1 , X2 Y2 . . .

-.250000E+03	0.	,	-.218750E+03	0.
-.187500E+03	0.	,	-.156250E+03	0.
-.125000E+03	0.	,	-.937500E+02	0.
-.625000E+02	0.	,	-.312500E+02	0.
0.	0.	,	.312500E+02	0.
.625000E+02	0.	,	.937500E+02	0.
.125000E+03	0.	,	.156250E+03	0.
.187500E+03	0.	,	.218750E+03	0.
.250000E+03	0.	,	-1	-1
DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...				

0. 0. , .998043E+02 0.
 -.998043E+02 0. , .250000E+03 .118701E+00
 -.250000E+03 .118701E+00 ,

Tabelle 3.3.3.1.1: Die Spektralfunktionen ($1=G^0_{--}, \dots, 6=G^1_{--}$) der Phononen-Streuung als Input für das Programmpaket AS bei $T = 20 \text{ K}$

Input: 6 Spektralfunktionen in der Form

$$G(\Omega) = \frac{a}{b} \left[\frac{c}{d} \right] + \sum_j b_j \delta(\Omega - \Omega_j)$$

Temperatur, Ende der Polynomentwicklung, gewünschter Grad der Polynome, Stützstellenabstand für die numerische Integration der Spektralfunktionen, oberes Definitionsintervallende für die Spektralfunktionen

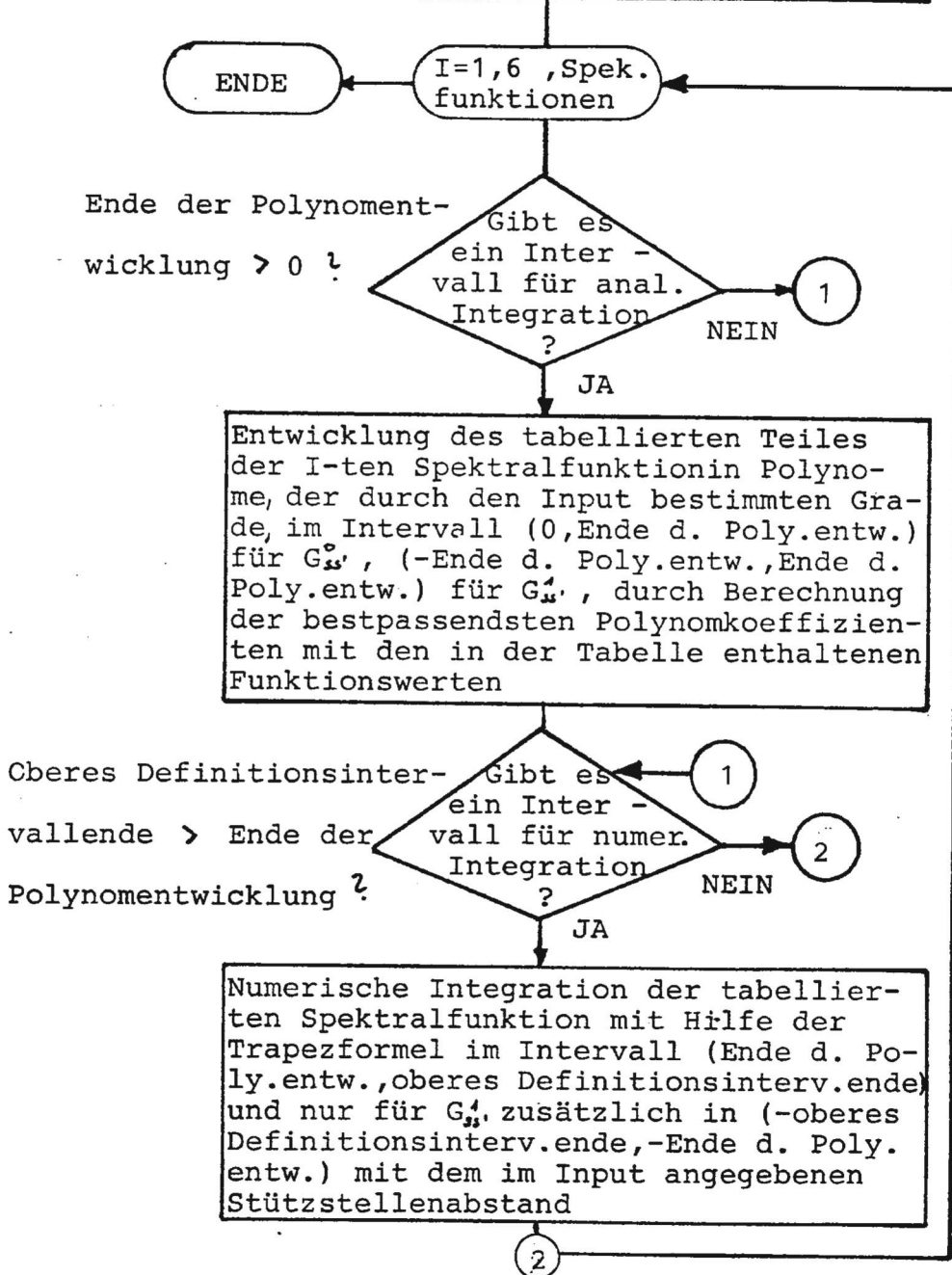
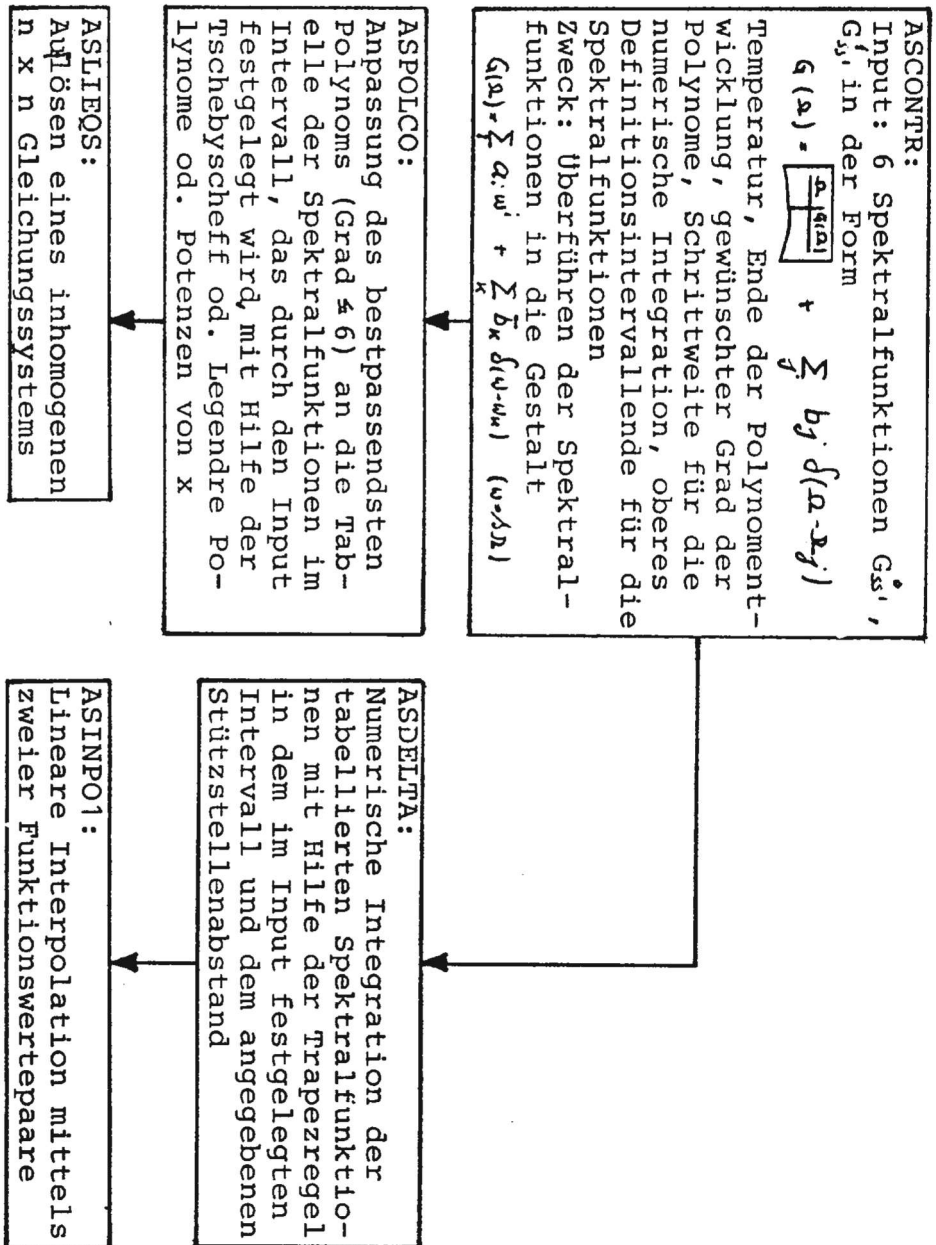
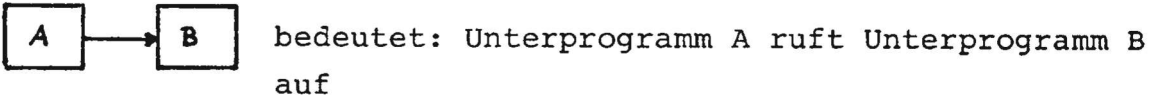


Abbildung 3.3.3.1.1: Flußdiagramm für das Programmpaket AS

Abbildung 3.3.3.1.2 : Struktur, Aufbau und Funktion der Unterprogramme des Programmpaketes AS.



3.3.3.2 Das Programmpaket TC

Nachdem man aus der Eingabe der Form (3.3.3.1.1) die Spektralfunktionen in die Form (3.3.3.1.2), (3.3.3.1.3) übergeführt hat, ist man in der Lage, mit Hilfe des Programmpakets TC die Transportkoeffizienten elektrischen Widerstand, Seebeckkoeffizienten und die Wärmeleitfähigkeit zu berechnen (Die Größen $\bar{v}(0)$, $\bar{v}'(0)$ müssen dabei ebenfalls verfügbar sein).

In Tabelle 3.3.3.2.1 ist für die bereits im letzten Kapitel behandelten Spektralfunktionen der Phononen-Streuung dargelegt, wie die Spektralfunktionen vorhanden sein müssen, um vom Programmpaket TC verarbeitet werden zu können. Man beachte dabei für jede Spektralfunktion ($1=G_{-}^0, \dots, 6=G_{++}^1$) die Aufteilung der Eingabe in Polynomkoeffizienten (erster Summand in (3.3.3.1.2) und (3.3.3.1.3)) und Deltafunktionen (zweiter Summand in (3.3.3.1.2) und (3.3.3.1.3)).

Wir wenden uns noch einmal der Berechnung des Matrixelementes $\mathcal{C}_{\alpha\alpha'}$ des Stoßoperators zu. Die in (3.3.2.5) auftretenden Koeffizienten ${}^{\prime\prime}K_{\alpha\alpha'}$, ${}^{\prime\prime}K_{\alpha\alpha'}$ sind temperaturunabhängig und werden daher für jeden Rechenlauf am Anfang (und nur einmal) bestimmt. Demgegenüber hängen die Größen ${}^{\prime\prime}a$, ${}^{\prime\prime}\bar{a}$, ${}^{\prime\prime}b$, ${}^{\prime\prime}\bar{b}$, ${}^{\prime\prime}w$ und ${}^{\prime\prime}\bar{w}$ sowie die obere Integrationsgrenze $\bar{w}$ sehr wohl von der Temperatur ab.

Will man nun für einen gewissen Temperaturbereich die Transportkoeffizienten erhalten, so müssen alle in (3.3.2.5) auftretenden Summen und Integrale für jede Temperatur berechnet werden.

Das Flußdiagramm in Abbildung 3.3.3.2.1 stellt den Arbeitsablauf für das Programmpaket TC dar.

Den Aufbau und die Funktion der einzelnen Unterprogramme des Programmpaketes TC zeigt das Diagramm der Abbildung 3.3.3.2.2. Für die detaillierte Darstellung befinden sich die Flußdiagramme und Programmlisten aller im Programmpaket TC verwendeten Unterprogramme im Anhang (A.2.1.3).

T C - I N P U T

TEMP= .200E+02

1-TE SPEKTRALFUNKTION

POLYNOM-KOEFFIZIENTEN (0-6)

.970E-12 .177E+02 -.233E-11 -.113E+00 -.126E-12

.909E-14 -.247E-15

DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...

0. 0. , .499021E+01 0.
 .125000E+02 0. , -1 -1

2-TE SPEKTRALFUNKTION

POLYNOM-KOEFFIZIENTEN (0-6)

0. 0. 0. 0. 0.

0. 0.

DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...

0. 0. , .499021E+01 0.

3-TE SPEKTRALFUNKTION

POLYNOM-KOEFFIZIENTEN (0-6)

-.467E-12 -.504E-12 .835E-12 .113E+00 .610E-13

-.516E-14 .160E-15

DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...

0. 0. , .499021E+01 0.
 .125000E+02 0. , -1 -1

4-TE SPEKTRALFUNKTION

POLYNOM-KOEFFIZIENTEN (0-6)

0. 0. 0. 0. 0.

0. 0.

DELTA FUNKTIONEN X-KORDINATE1 AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...

0. 0. , .499021E+01 0.
 -.499021E+01 0. , -1 -1

5-TE SPEKTRALFUNKTION

POLYNOM-KOEFFIZIENTEN (0-6)

.367E-04 -.829E-19 .696E-05 .469E-21 -.524E-07

-.207E-23 .165E-09

DELTA FUNKTIONEN X-KOORDINATE1 AMPLITU1 , X-KOORDINATE2 AMPLITU2...

0.	0.	,	.499021E+01	0.
-.499021E+01	0.	,	.125000E+02	0.
-.125000E+02	0.	,	-1	-1

6-TE SPEKTRALFUNKTION

POLYNOM-KOEFFIZIENTEN (0-6)

0. 0. 0. 0. 0.

0. 0.

DELTA FUNKTIONEN X-KOORDINATE1 AMPLITU1 , X-KOORDINATE2 AMPLITU2...

0.	0.	,	.499021E+01	0.
-.499021E+01	0.	,	.125000E+02	.593506E-02
-.125000E+02	.593506E-02	,	-1	-1

Tabelle 3.3.3.2.1: Die Spektralfunktionen ($1=G_{--}^0, \dots, 6=G_{++}^1$) der Phononen-Streuung als Input für das Programmpaket TC bei $T = 20 \text{ K}$

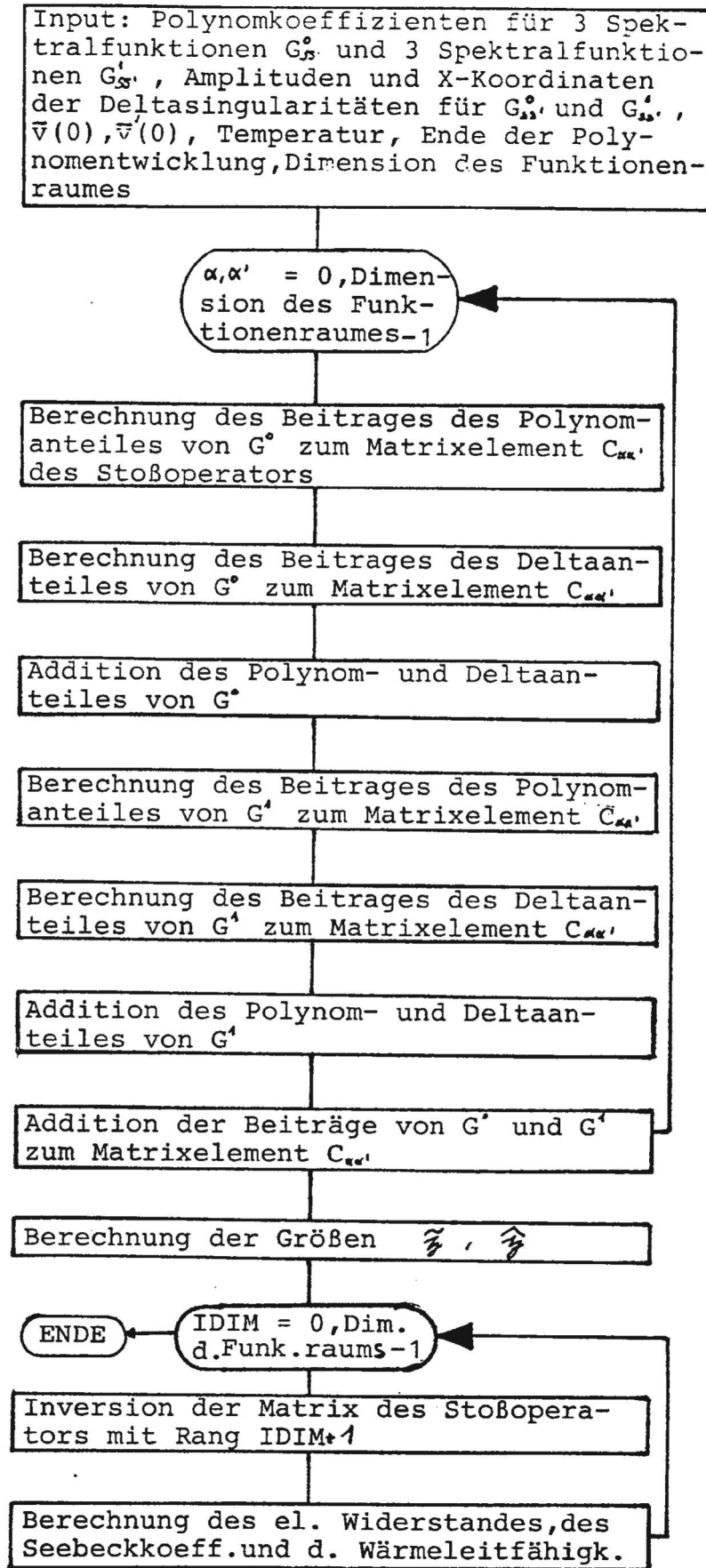


Abbildung 3.3.3.2.1: Flußdiagramm für das Programmpaket TC

TCTRCOE:
 Berechnet die Transportkoeffizienten
 Input: 6 Spektralfunktionen in der Form

$$G(\omega) = \sum a_i \omega^i + \sum \bar{b}_j \delta(\omega - \omega_j)$$

 $\bar{V}(0), \bar{V}'(0),$ Temperatur, Ende der Polynomentwicklung, Größe des Funktionsraumes;
 Zweck: Berechnung der Transportkoeffizienten zu fester Temperatur

TCCOLIS:
 Berechnung der Matrix des Stoßoperators

TCMAINV:
 Inversion der Matrix des Stoßoperators

TCFESUR:
 Berechnung der Größen $\bar{f}_n, \bar{f}_n'$

TCSPEC0:
 Berechnung des Anteiles der Spektralfunktionen $G_{\alpha'}$ zum Matrixelement $C_{\alpha'}$ des Stoßoperators

TCSPEC1:
 Berechnung des Anteiles der Spektralfunktionen $G_{\alpha'}$ zum Matrixelement $C_{\alpha'}$ des Stoßoperators

TCPOLY0:
 Berechnung des Anteiles der Polynome von $G_{\alpha'}$ zum Matrixelement $C_{\alpha'}$

TCDELTO:
 Berechnung des Anteiles der Deltafunktionen von $G_{\alpha'}$ zum Matrixelement $C_{\alpha'}$

TCPOLY1:
 Berechnung des Anteiles der Polynome von $G_{\alpha'}$ zum Matrixelement $C_{\alpha'}$

TCDELTO1:
 Berechnung des Anteiles der Deltafunktionen von $G_{\alpha'}$ zum Matrixelement $C_{\alpha'}$

TCINTEG:
 Auswertung der Integralen

$$\int_0^x \frac{u^n}{(e^u - 1)(1 - e^{-u})} du$$

TCCOEFF:
 Bereitstellung der Koeffizienten ${}^{11}K^{\alpha\alpha'}$ und ${}^{12}K^{\alpha\alpha'}$

TCCOCOE:
 Berechnung der Koeffizienten ${}^{11}K^{\alpha\alpha'}$ und ${}^{12}K^{\alpha\alpha'}$

Abbildung 3.3.3.2.2:

Struktur, Aufbau und Funktion der Unterprogramme für das Programmpaket TC

4. Die Modellspektralfunktionen

4.1 Die Berechnung der Modellspektralfunktionen aus den Modell-Hamiltonoperatoren

Die Einführung der Spektralfunktionen in Gleichung (3.2.1.12) hat es mit sich gebracht, daß man für eine ganze Klasse von Wechselwirkungen die Transportkoeffizienten berechnen kann, und dabei die den Stoßprozeß beschreibenden Spektralfunktionen zu verwenden hat. Dies führt zu einer wesentlichen Verallgemeinerung der Berechnung der Transportkoeffizienten.

Die in Gleichung (3.2.1.12) gegebene Definition der Spektralfunktionen $G_{SS'}(E, E', \Omega)$ sei hier noch einmal wiederholt

$$G_{SS'}(E, E', \Omega) = \frac{m}{n} \sum_{\sigma\sigma'} \iint d^3k d^3k' P_{T\sigma'}(\Omega) [v_i(\gamma) - s v_i(\gamma')] [v_i(\gamma) - s' v_i(\gamma')] \cdot \\ \cdot \delta(E - E_\gamma + \mu) \delta(E' - E_{\gamma'} + \mu) \quad (4.1.1).$$

Der Integrand (4.1.1) enthält die von der Bandstruktur abhängigen Größen $v_i(\gamma)$, E_γ und die Funktion $P_{T\sigma'}(\Omega)$, für deren Gestalt die Art der Streuprozesse, die die Leitungselektronen erfahren, bestimmend ist. $P_{T\sigma'}(\Omega)$ wurde in (3.2.1.7) eingeführt und enthält die Matrixelemente des Operators, der die Wechselwirkungen der Leitungselektronen im Festkörper modellmäßig beschreibt. Über seine Gestalt gibt es in der Literatur /8/ Angaben, um die Streuprozesse, wie sie bei den hier behandelten Seltenen Erd Verbindungen auftreten, realistisch zu beschreiben. Für die weitere Rechnung beschränken wir uns auf Modell-Hamiltonoperatoren, die (i) die elastische Streuung der Leitungselektronen, (ii) die Streuung der Leitungselektronen an den

magnetischen Momenten der Seltenen Erd Ionen, deren Elektronenzustände durch die Seltene Erd Ion - Seltene Erd Ion Wechselwirkung (H_{ff} -Wechselwirkung) bezüglich der Quantenzahl M_j aufspalten und dadurch auch inelastische Streuprozesse mit spezifischer Temperaturabhängigkeit hervorrufen sowie (iii) die Streuung der Leitungselektronen an Phononen, beschreiben.

Für jeden dieser Streumechanismen gilt es nun, ausgehend von den aus der Literatur bekannten Modell-Hamiltonoperatoren /8/ die Funktionen $P_{\gamma\gamma'}(\Omega)$ zu ermitteln. Weiters sind, um die Integrale in (4.1.1) auszuwerten, die Funktionen $v_i(\gamma)$ und E_γ erforderlich.

Für die Wechselwirkungen der Leitungselektronen mit den sie umgebenden Atomen, Ionen und Leerstellen setzen wir /8/

$$V_{\text{Potential}}(\vec{r}) = \sum_{\tau} \sum_{n\nu} C_{n\nu}^{\tau} V^{\tau}(\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}), \quad \vec{R}_{n\nu} = \vec{R}_n + \vec{R}_\nu$$

ν ...Basisnummer, τ ...Atomart, $\vec{R}_n$...Gittervektor (4.1.2), wobei für die $C_{n\nu}^{\tau}$ gilt, $C_{n\nu}^{\tau} = 1$, wenn sich die Atomart τ auf der Stelle $\vec{R}_{n\nu}$ befindet und, $C_{n\nu}^{\tau} = 0$, wenn dies nicht der Fall ist. Als Streupotential haben wir aber nur die Abweichung von $V_{\text{Potential}}$ vom gitterperiodischen Potential V_O^P

$$V_O^P(\vec{r}) = \sum_{\tau, n, \nu} C_{n\nu}^{\tau} V^{\tau}(\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) \quad (4.1.3)$$

zu verwenden, da wir den gitterperiodischen Anteil der Potentiale in den Zuständen und Energien der Leitungselektronen berücksichtigen.

Für die Konzentrationen C_v^{τ} gilt dabei :

$$C_v^{\tau} = \frac{1}{N} \sum_n C_{n\nu}^{\tau} = N_v^{\tau}/N \quad (4.1.4).$$

Für das Streupotential $V_s^P = V_{\text{Potential}} - V_O^P$ erhalten wir

$$V_S^P(\vec{r}) = \sum_{n\nu} \left\{ \sum_{\tau} C_{n\nu}^{\tau} V^{\tau}(\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) - \bar{V}_V^P(\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) \right\} \quad (4.1.5)$$

$$\text{mit } \bar{V}_V^P(r) = \sum_{\tau} C_V^{\tau} V^{\tau}(\vec{r}) \quad (4.1.6).$$

Die Berücksichtigung von V_O^P in den Zuständen $|\gamma\rangle$ der freien Leitungselektronen bringt in Störungstheorie erster Ordnung lediglich eine Verschiebung des Energie-Nullpunktes mit sich, und ist daher für die weitere Rechnung ohne Bedeutung.

Als nächstes betrachten wir die Wechselwirkung der Leitungselektronen mit den magnetischen Seltenen Erd Ionen. Die Seltenen Erd Ionen wechselwirken untereinander durch eine Kopplung ihres Gesamtdrehimpulses. Wegen den um den Kern lokalisierten 4f - Elektronen (geringer Überlapp von Elektronen benachbarter Seltenen Erd Ionen) ist der Beitrag der direkten Kopplung klein. Durch die Leitungselektronen, die ebenfalls mit den Spins der Seltenen Erd Ionen wechselwirken (H_{sf} -Wechselwirkung), wird nun eine indirekte (f-f) - Kopplung vermittelt/5,7,8/.

Als Wechselwirkungsoperator der H_{ff} -Wechselwirkung schreiben wir den Heisenberg-Hamiltonoperator /5,8/

$$H_{ff} = -\frac{1}{2} \sum_{n\nu} \sum_{n'\nu'} C_{n\nu}^{\tau} C_{n'\nu'}^{\tau'} \alpha_{n\nu, n'\nu'}^{\tau\tau'} \vec{J}_{n\nu}^{\tau} \cdot \vec{J}_{n'\nu'}^{\tau'} \quad (4.1.7) \text{ an.}$$

Die $\alpha_{n\nu, n'\nu'}^{\tau\tau'}$ stellen in (4.1.7) die Kopplungskonstanten der verschiedenen Spins an einander dar. Für $GdAl_2$ liegt die

Stärke dieser H_{ff} -Wechselwirkung bei ≈ 150 K. Dies ist wesentlich schwächer als die Stärke, mit der die Spins der Leitungselektronen an die der Seltenen Erd Ionen koppeln, ≈ 1000 K.

Für den Hamiltonoperator, der die Wechselwirkung zwischen Leitungselektronen und Seltenen Erd Ionen modellmäßig beschreibt,

setzen wir /8/

$$H_{sf} = - \sum_{nv} \sum_{\tau} C_{nv}^{\tau} G^{\tau} (\vec{r} - \vec{R}_{nv}) \cdot \vec{J}_{nv}^{\tau} \cdot \vec{S}_{el} \quad (4.1.10).$$

Das zu (4.1.10) gehörende gitterperiodische Potential lautet

$$H_{sf}^{per} = - \sum_{nv} \sum_{\tau} C_{nv}^{\tau} G^{\tau} (\vec{r} - \vec{R}_{nv}) \langle \vec{J}_{nv}^{\tau} \rangle \cdot \vec{S}_{el} \quad (4.1.11).$$

$\langle \rangle$...thermodynamischer Mittelwert

Aus (4.1.10) und (4.1.11) erhält man das magnetische Streupotential $H_{sf} - H_{sf}^{per}$

$$H_{magnetisch} = H_{sf} - H_{sf}^{per} = - \sum_{nv} \sum_{\tau} G^{\tau} (\vec{r} - \vec{R}_{nv}) (C_{nv}^{\tau} \vec{J}_{nv}^{\tau} - C_{nv}^{\tau} \langle \vec{J}_{nv}^{\tau} \rangle) \cdot \vec{S}_{el} \quad (4.1.12).$$

Für die Leitungselektronen ergibt sich, und das ist für die weitere Rechnung von großer Bedeutung, eine Aufspaltung des Energiebandes für Spin $\uparrow$ und Spin $\downarrow$. In erster Ordnung Störungstheorie gelten die Gleichungen

$$E_{k\uparrow} = E_k^0 + \Delta b \quad (4.1.13)$$

$$E_{k\downarrow} = E_k^0 - \Delta b \quad (4.1.14).$$

Für die Größe Δb (das ist die halbe Bandaufspaltung) erhält man (für nur eine Atomart)

$$\Delta b = - \frac{1}{2} \langle J_z \rangle \frac{N_{RE}}{Vol_{EZ}} |G_0| \text{sign}(G_0) \quad (4.1.15)$$

$$\text{und für } G_0 \quad G_0 = \int d\vec{r} G(\vec{r}) \quad (4.1.16)$$

N_{RE} ist die Zahl der Seltenen Erd Ionen in der Einheitszelle und Vol_{EZ} das Volumen der Einheitszelle.

Die Aufspaltung Δb liegt bei ungefähr 1000 K (für Gd Al₂)

und ist temperaturabhängig. Im Vergleich mit der Fermienergie = 10000 - 100000 K sieht man, daß Δb tatsächlich klein ist.

Neben den Streumechanismen Potential-Streuung und Magnetische-Streuung berücksichtigen wir die Wechselwirkung der Leitungselektronen mit den Gitterschwingungen. Diese wird durch den Hamiltonoperator

$$V(\vec{r}) = \sum_{n\nu} V^\nu(\vec{r} - \vec{R}_{n\nu} - \vec{S}_{n\nu}) \quad (4.1.17)$$

beschrieben. Dabei sind die $\vec{S}_{n\nu}$ die Auslenkungen der Ionen am Ort $\vec{R}_{n\nu}$. Wir subtrahieren nun wieder den gitterperiodischen Anteil von $V(\vec{r})$ und erhalten für das Streupotential $V_s(\vec{r})$

$$V_s(\vec{r}) = V(\vec{r}) - V_o(\vec{r}) \quad (4.1.18)$$

$$\text{mit } V_o(\vec{r}) = \sum_{n\nu} V^\nu(\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) \quad (4.1.19).$$

Führt man nun für $V_s(\vec{r})$ eine Reihenentwicklung in den $\vec{S}_{n\nu}$ durch, und bricht man die Reihe nach dem zweiten Glied ab, so erhält man /6/

$$H_{\text{el-ph}} = - \sum_{n\nu i} \frac{\partial V^\nu}{\partial r_i}(\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) S_{n\nu i} \quad (4.1.20)$$

als effektiven Wechselwirkungsoperator für die Phononen-Streuung (Ein-Phonon Näherung).

Als nächstes sollen ausgehend von den oben angegebenen Modell-Hamiltonoperatoren die zugehörigen Modellspektralfunktionen berechnet werden. Dabei sollte man beachten, daß die Bandaufspaltung des Leitfähigkeitsbandes, wie man sie durch die Anwesenheit der wechselwirkenden magnetischen Seltenen Erd Ionen erhält, klein gegenüber der Fermienergie ist. Deshalb werden wir uns bei der Berechnung der Transportkoeffizienten und auch der Spektralfunktionen auf Terme die höchstens linear in Δb sind beschränken, und Terme höherer Ordnung ver-

nachlässigen.

4.1.1 Die Modellspektralfunktionen für die Potential-Streuung

Bei der Potential-Streuung werden die Wechselwirkungen der Leitungselektronen mit Fehlstellen und Fremdatomen berücksichtigt. Ausgehend vom Streupotential V_S (4.1.5)

$$V_S^P(\vec{r}) = \sum_{nv} \left(\sum_{\vec{r}} C_{nv}^{\vec{r}} V^{\vec{r}}(\vec{r} - \vec{R}_{nv}) - \bar{V}_v^P(\vec{r} - \vec{R}_{nv}) \right) \quad (4.1.1.1)$$

$$\text{mit } \bar{V}_v^P(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}} C_v^{\vec{r}} V^{\vec{r}}(\vec{r}) \quad (4.1.1.2)$$

geht man nun heran die Funktion $P_{YY'}(\Omega)$, definiert in Gleichung (3.2.1.7) als

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1 - e^{-\omega}}{\omega} \sum_{MM'} g_M \frac{\Delta^3 r}{(2\pi)^3} |\langle Y | H_{WW} | Y' \rangle|^2 \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) \quad (4.1.1.3)$$

zu berechnen. Wegen der Gestalt von V_S werden die Systemzustände $|M\rangle$ und Energien E_M in (4.1.1.3) nicht verändert. Für das Matrixelement in Gleichung (4.1.1.3) schreibt man:

$$\langle Y | H_{WW} | Y' \rangle = \sum_{nv} \langle Y | H_{nv}(\vec{r} - \vec{R}_{nv}) | Y' \rangle = \sum_{nv} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}_n} \cdot \langle Y | H_{nv}(\vec{r} - \vec{R}_v) | Y' \rangle \quad (4.1.1.4)$$

$$\text{mit } H_{nv}(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}} (C_{nv}^{\vec{r}} - C_v^{\vec{r}}) V^{\vec{r}}(\vec{r}) \quad (4.1.1.5).$$

Dabei sind die Zustände $|Y\rangle$ Blochzustände $|n, k, \sigma\rangle$, mit der Eigenschaft

$$\psi_Y(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \psi_Y(\vec{r}) \quad (4.1.1.6).$$

Man überzeugt sich schnell, daß für $\vec{k} = \vec{k}'$

$$\langle Y | H_{WW} | Y' \rangle = \langle Y | \sum_{nv} H_{nv}(\vec{r} - \vec{R}_v) | Y' \rangle = 0 \quad (4.1.1.7)$$

gilt. Man erhält weiter

$$|\langle \gamma | H_{\text{WW}} | \gamma' \rangle|^2 = \sum_{\tau \tau'} \sum_{\nu \nu'} \sum_{\mu} (C_{\nu \nu'}^{\tau} - C_{\nu}^{\tau}) (C_{\nu \nu'}^{\tau'} - C_{\nu}^{\tau'}) \langle \gamma | V^{\tau}(\vec{r} - \vec{R}_{\nu}) | \gamma \rangle \langle \gamma' | V^{\tau'}(\vec{r} - \vec{R}_{\nu'}) | \gamma' \rangle$$

$$+ \sum_{\tau \tau'} \sum_{\nu \nu'} \langle \gamma | V^{\tau}(\vec{r} - \vec{R}_{\nu}) | \gamma \rangle \langle \gamma' | V^{\tau'}(\vec{r} - \vec{R}_{\nu'}) | \gamma' \rangle \sum_{\vec{k} \neq 0} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}_{\mu}} \sum_{\mu'} (C_{\mu' + \mu, \nu}^{\tau} - C_{\nu}^{\tau}) (C_{\mu \nu'}^{\tau'} - C_{\nu'}^{\tau'})$$

(4.1.1.8)

Führt man nun das Matricelement $|V_{\gamma \gamma'}|^2$ ein

$$|V_{\gamma \gamma'}|^2 = (\Delta^3 r)^2 \sum_{\tau, \mu, \nu, \tau'} C_{\nu \nu'}^{\tau \tau'} \langle \gamma | V^{\tau}(\vec{r} - \vec{R}_{\nu}) | \gamma \rangle \langle \gamma' | V^{\tau'}(\vec{r} - \vec{R}_{\nu'}) | \gamma' \rangle$$

(4.1.1.9)

$$\text{mit } N C_{\nu \nu'}^{\tau \tau'} = \sum_{\mu} (C_{\mu \nu}^{\tau} - C_{\nu}^{\tau}) (C_{\mu \nu'}^{\tau'} - C_{\nu'}^{\tau'})$$

(4.1.1.10)

$$\text{und setzt } n_{\text{git}} = \frac{N}{\Delta^3 r} = \frac{1}{\text{Vol}_{\text{EZ}}}$$

(4.1.1.11),

so erhält man für $P_{\gamma \gamma'}(\Omega)$ der Potential-Streuung wegen der statistischen Unabhängigkeit der Verteilung der Fremdatome und Leerstellen auf die Einheitszellen

$$P_{\gamma \gamma'}(\Omega) = \frac{1}{(\Delta^3 r)^2} \delta(\Omega) n_{\text{git}} |V_{\gamma \gamma'}|^2$$

(4.1.1.12).

Zur Berechnung der Spektralfunktionen verwendet man ihre Definition (Gleichung (4.1.1)) in der Form

$$G_{\text{SS}}(E, E', \Omega) = \frac{m}{3n} \frac{(2\pi)^6}{(\Delta^3 r)^2} \sum_{\tau \tau'} P_{\gamma \gamma'}(\Omega) [v(\gamma) - sv(\gamma')] [v(\gamma) - s'v(\gamma')] \cdot$$

$$\cdot \delta(E - E_{\gamma} + \mu) \delta(E' - E_{\gamma'} + \mu)$$

(4.1.1.13).

$$\text{Es wurde angenommen, daß } \frac{1}{\Delta^3 r} \sum_{\tau} v^2(\gamma) \delta(E - E_{\gamma} + \mu) = \frac{3}{\Delta^3 r} \sum_{\tau} v^2(\gamma) \delta(E - E_{\gamma} + \mu)$$

(4.1.1.14)

gilt. Vernachlässigt man die Abhängigkeit von $|V_{\gamma \gamma'}|^2$ von γ und

γ' , also

$$|V_{\gamma \gamma'}|^2 = |V|^2, \text{ und nimmt man weiters}$$

an, daß

$$\vec{v}(\gamma) = \vec{v}(\vec{k})$$

(4.1.1.15)

$$\vec{v}(-\vec{k}) = -\vec{v}(\vec{k})$$

(4.1.1.16)

$$E_{\gamma} = E_{\vec{k}}$$

(4.1.1.17)

$$E_{-\vec{k}} = E_{\vec{k}}$$

(4.1.1.18)

gilt, so erhält man für die Spektralfunktionen G_{SS} ,

$$G_{++}(E, E', \Omega) = k_B a_V \frac{\bar{V}(E) N(E') + \bar{V}(E') N(E)}{V(0) N(0)} \delta(\Omega) \quad (4.1.1.19)$$

und

$$G_{+-}(E, E', \Omega) = k_B a_V \frac{\bar{V}(E) N(E') - \bar{V}(E') N(E)}{V(0) N(0)} \delta(\Omega) \quad (4.1.1.20),$$

mit den Größen

$$\bar{V}(E) = \frac{m}{3n} \frac{1}{\Delta r} \sum_{\gamma} v^2(\gamma) \delta(E - E_{\gamma} + \mu) \quad (4.1.1.21)$$

$$N(E) = \frac{1}{\Delta r} \sum_{\gamma} \delta(E - E_{\gamma} + \mu) \quad (4.1.1.22)$$

$$k_B a_V = (2\pi)^3 n_{\text{git}} |V|^2 \frac{m}{3n\Delta r} \sum_{\gamma} v^2(\gamma) \delta(E_{\gamma} - \mu) \frac{1}{\Delta r} \sum_{\gamma'} \delta(E_{\gamma'} - \mu) \quad (4.1.1.23)$$

Die Spektralfunktionen der Potential-Streuung hängen somit über das chemische Potential μ von der Temperatur ab.

Wegen der elastischen Streuung, $\delta(\Omega)$ in den Gleichungen 4.1.1.19, 4.1.1.20, erhält man bei einer Aufspaltung des Leitfähigkeitsbandes, wie sie durch die Anwesenheit magnetisch mit den Leitungselektronen wechselwirkender Seltener Erd Ionen auftritt, keine Terme der Ordnung Δb in den Spektralfunktionen für die Potential-Streuung.

4.1.2 Die Modellspektralfunktionen für die Magnetische-Streuung

Wie schon am Anfang von Kapitel 4 erwähnt, treten bei intermetallischen Seltenen Erd Verbindungen Streuprozesse der Leitungselektronen an den magnetischen Seltenen Erden auf.

Wegen der durch die Leitungselektronen induzierten magnetischen Seltenen Erd Ion - Seltenen Erd Ion Wechselwirkung H_{ff} (4.1.7)

$$H_{ff} = -\frac{1}{2} \sum_{n\nu} \sum_{n'\nu'} C_{n\nu}^r C_{n'\nu'}^{r'} \alpha_{n\nu, n'\nu'}^{rr'} \vec{J}_{n\nu}^r \vec{J}_{n'\nu'}^{r'} \quad (4.1.2.1)$$

spalten die Zustände der Elektronen der Seltenen Erd Ionen bezüglich der Quantenzahl M_j auf. Dies hat unter anderem auch inelastische Streuprozesse der Leitungselektronen an den Seltenen Erd Ionen zur Folge.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Spinsystembeschreibung (=Elektronenzustände der Seltenen Erd Ionen) in der Molekularfeldnäherung durchgeführt werden. Dazu setzen wir

$$\vec{J}_{n\nu}^r = \langle \vec{J}_{n\nu}^r \rangle + [\vec{J}_{n\nu}^r - \langle \vec{J}_{n\nu}^r \rangle] \quad (4.1.2.3)$$

$\langle \rangle$... thermodynamischer Mittelwert

in Gleichung (4.1.2.1) ein, und erhalten bei Vernachlässigung

$$\text{von Termen der Art } [\vec{J}_{n\nu}^r - \langle \vec{J}_{n\nu}^r \rangle] [\vec{J}_{n'\nu'}^{r'} - \langle \vec{J}_{n'\nu'}^{r'} \rangle] \quad (4.1.2.4)$$

für H_{ff} , H_{MF} als

$$H_{MF} = -\frac{1}{2} \sum_{n\nu} \sum_{n'\nu'} C_{n\nu}^r C_{n'\nu'}^{r'} (\alpha_{n\nu, n'\nu'}^{rr'} + \alpha_{n'\nu', n\nu}^{r'r}) [\vec{J}_{n\nu}^r \langle \vec{J}_{n'\nu'}^{r'} \rangle - \frac{1}{2} \langle \vec{J}_{n\nu}^r \rangle \langle \vec{J}_{n'\nu'}^{r'} \rangle] \quad (4.1.2.5)$$

Mit (4.1.2.5) und der Definition

$$\bar{\alpha}_{n\nu, n'}^{rr'} = \frac{1}{2} \sum_{\nu'} (\alpha_{n\nu, n'\nu'}^{rr'} + \alpha_{n'\nu', n\nu}^{r'r}) C_{n'\nu'}^{r'} \quad (4.1.2.6)$$

erhält man H_{MF} als

$$H_{MF} = - \sum_n \sum_{\nu\nu'} \sum_{\tau\tau'} C_{n\nu}^{\tau} \bar{\alpha}_{n\nu\nu'}^{\tau\tau'} [\vec{J}_{n\nu}^{\tau} \langle \vec{J}_{\nu'}^{\tau'} \rangle - \frac{1}{2} \langle \vec{J}_{\nu}^{\tau} \rangle \langle \vec{J}_{\nu'}^{\tau'} \rangle] \quad (4.1.2.7).$$

Mit $\langle \vec{J}_{\nu}^{\tau} \rangle = \langle J_{\nu z}^{\tau} \rangle \vec{e}_z$ in H_{MF} für alle ν, τ gilt

$$H_{MF} | \{ \dots M_{n\nu}^{\tau} \dots \} \rangle = E_{\{ \dots M_{n\nu}^{\tau} \dots \}} | \{ \dots M_{n\nu}^{\tau} \dots \} \rangle \quad (4.1.2.8)$$

mit den Spinsystemzuständen

$$| \{ \dots M_{n\nu}^{\tau} \dots \} \rangle = \prod_{n\nu\tau} \{ \dots | J^{\tau} M_{n\nu}^{\tau} \rangle \dots \} \quad (4.1.2.9)$$

und

$$E_{\{ \dots M_{n\nu}^{\tau} \dots \}} = - \sum_{\nu\nu'} \sum_{\tau\tau'} C_{n\nu}^{\tau} \bar{\alpha}_{n\nu\nu'}^{\tau\tau'} (M_{n\nu}^{\tau} - \frac{1}{2} \langle J_{\nu z}^{\tau} \rangle) \langle J_{\nu' z}^{\tau'} \rangle \quad (4.1.2.10).$$

Für das Streupotential der Leitungselektronen an den Seltenen Erd Ionen $H_{\text{magn.}}$ (4.1.12) gilt

$$H_{\text{magn.}} = - \sum_{n\nu} \sum_{\tau} G^{\tau} (\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) [C_{n\nu}^{\tau} \vec{J}_{n\nu}^{\tau} - C_{\nu}^{\tau} \langle \vec{J}_{\nu}^{\tau} \rangle] \vec{S}_{e1} \quad (4.1.2.12).$$

Wir wollen nun $P_{YY'}(\Omega)$

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1-e^{-\omega}}{\omega} \frac{\Delta^3 r}{(2\pi)^3} \sum_{M, M'} g_M \langle YM | H_{ww} | Y'M' \rangle \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) \quad (4.1.2.13)$$

berechnen. Wegen (4.1.2.12) läßt sich $H_{\text{magn.}}$ bzw. H_{ww} in (4.1.2.13) als

$$H_{ww} = \sum_{n\nu\tau} H_{n\nu}^{\tau} \quad (4.1.2.14)$$

schreiben. Als Systemzustände $|M\rangle$ haben wir

$$|M\rangle = \prod_{n\nu\tau} \{ \dots | J^{\tau} M_{n\nu}^{\tau} \rangle \dots \} \quad (4.1.2.15)$$

zu verwenden. Damit erhalten wir

$$\sum_{MM'} g_M \varepsilon(\Omega + E_M - E_{M'}) \sum_{\substack{n\nu\tau \\ n'\nu'\tau'}} \langle YM | H_{n\nu}^{\tau} | Y'M' \rangle \langle Y'M' | H_{n'\nu'}^{\tau'} | YM \rangle =$$

$$= \sum_{M \neq M'} g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) \sum_{n\nu\tau} \sum_{n'\nu'\tau'} \langle YM | H_{n\nu}^\tau | Y'M' \rangle \langle Y'M' | H_{n'\nu'}^{\tau'} | YM \rangle + \\ + \delta(\Omega) \sum_{n\nu\tau} \sum_{n'\nu'\tau'} \sum_M g_M \langle YM | H_{n\nu}^\tau | Y'M' \rangle \langle Y'M' | H_{n'\nu'}^{\tau'} | YM \rangle \quad (4.1.2.16).$$

Für $M \neq M'$ und wegen der Gestalt von $H_{n\nu}^\tau$ und der Orthogonalität der Systemzustände $|M\rangle$, $\langle M'|M\rangle = \delta_{M,M'} = \frac{1}{\Omega} \langle M'|H_{n\nu}^\tau|M\rangle = \frac{1}{\Omega} \delta_{M,M'} \delta_{n\nu\tau, n'\nu'\tau'}$, gilt:

$$\langle YM | H_{n\nu}^\tau | Y'M' \rangle \langle Y'M' | H_{n'\nu'}^{\tau'} | YM \rangle = \langle YM | H_{n\nu}^\tau | Y'M' \rangle \langle Y'M' | H_{n\nu}^\tau | YM \rangle \delta_{n\nu\tau, n'\nu'\tau'} \quad (4.1.2.17)$$

Für Gleichung (4.1.2.16) erhält man weiter

$$\sum_{M \neq M'} g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) \sum_{n\nu\tau} \sum_{n'\nu'\tau'} \langle YM | H_{n\nu}^\tau | Y'M' \rangle \langle Y'M' | H_{n'\nu'}^{\tau'} | YM \rangle = \\ \sum_{n\nu\tau} \sum_{n'\nu'\tau'} g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) \langle YM | H_{n\nu}^\tau | Y'M' \rangle \langle Y'M' | H_{n'\nu'}^{\tau'} | YM \rangle - \\ - \delta(\Omega) \sum_{n\nu\tau} \langle Y | \langle H_{n\nu}^\tau \rangle | Y' \rangle \langle Y' | \langle H_{n\nu}^\tau \rangle | Y \rangle + \\ + \delta(\Omega) \sum_{n\nu\tau} \sum_{n'\nu'\tau'} \langle Y | \langle H_{n\nu}^\tau \rangle | Y' \rangle \langle Y' | \langle H_{n'\nu'}^{\tau'} \rangle | Y \rangle \quad (4.1.2.18)$$

Für den Fall $n\nu\tau \neq n'\nu'\tau'$ haben wir hier

$$\sum_M g_M \langle YM | H_{n\nu}^\tau | Y'M' \rangle \langle Y'M' | H_{n'\nu'}^{\tau'} | YM \rangle = \langle Y | \langle H_{n\nu}^\tau \rangle | Y' \rangle \langle Y' | \langle H_{n'\nu'}^{\tau'} \rangle | Y \rangle \quad (4.1.2.19)$$

verwendet. Wir schreiben weiter

$$\langle Y | \langle H_{n\nu}^\tau \rangle | Y' \rangle = \langle Y | -G^\tau (\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) \vec{S}_{el} | Y' \rangle [C_{n\nu}^\tau \langle \vec{J}_{n\nu}^\tau \rangle - C_v^\tau \langle \vec{J}_v^\tau \rangle] \quad (4.1.2.20)$$

und setzen für

$$\langle Y | -G^\tau (\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) S_z | Y' \rangle = G_{YY}^{\tau\nu} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}_a} \quad (4.1.2.21)$$

und

$$[C_{n\nu}^\tau \langle \vec{J}_{n\nu}^\tau \rangle - C_v^\tau \langle \vec{J}_v^\tau \rangle] = \langle \Delta_{n\nu}^\tau \rangle \quad (4.1.2.22),$$

wobei die Summe $\sum_n \langle \Delta_{n\nu}^\tau \rangle = 0$ (4.1.2.23) ist.

Damit kann für den letzten Term aus (4.1.2.18)

$$\sum_{n\nu\tau} \sum_{n'\nu'\tau'} \langle Y | \langle H_{n\nu}^\tau \rangle | Y' \rangle \langle Y' | \langle H_{n'\nu'}^{\tau'} \rangle | Y \rangle = \sum_{n\nu\tau} \sum_{n'\nu'\tau'} G_{YY}^{\tau\nu} G_{YY}^{\tau'\nu'} \sum_{a,a'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{R}_a - \vec{R}_{a'})} \langle \Delta_{n\nu}^\tau \rangle \langle \Delta_{n'\nu'}^{\tau'} \rangle \quad (4.1.2.24)$$

geschrieben werden. Mit

$$\sum_{n,n'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle \Delta_{nn'}^T \rangle \langle \Delta_{n'n'}^{T'} \rangle = \sum_n \langle \Delta_{nn}^T \rangle \langle \Delta_{nn}^{T'} \rangle + \sum_{n' \neq 0} e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{R}_n} \sum_{n'} \langle \Delta_{n'n'}^T \rangle \langle \Delta_{n'n'}^{T'} \rangle =$$

$$= N \langle \langle \Delta_{nn}^{TT'} \rangle \rangle (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}^T) \quad (4.1.2.25)$$

und

$$\langle \langle \Delta_{nn}^{TT'} \rangle \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \langle \Delta_{nn}^T \rangle \langle \Delta_{nn}^{T'} \rangle \quad (4.1.2.26)$$

erhält man :

$$\sum_{n\nu T} \sum_{n'\nu' T'} \langle \gamma | \langle H_{n\nu}^T | \gamma \rangle \langle \gamma' | \langle H_{n'\nu'}^{T'} | \gamma' \rangle = \sum_n \sum_{\substack{\nu T \\ \nu' T'}} G_{\gamma\gamma'}^{T\nu} G_{\gamma'\gamma'}^{T'\nu'} \langle \langle \Delta_{nn}^{TT'} \rangle \rangle (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}^T) \quad (4.1.2.27).$$

Wir ersetzen nun näherungsweise

$$1 - \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}^T = 1 \quad (4.1.2.28), \text{ und erhalten mit (4.1.2.17)}$$

$$\sum_{M,M'} g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) |\langle \gamma M | H_{\nu\nu'}^T | \gamma' M' \rangle|^2 =$$

$$= \sum_{n\nu T} \sum_{M,M'} g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) |\langle \gamma M | H_{n\nu}^T | \gamma' M' \rangle|^2 +$$

$$+ \sum_{n\nu T} \sum_{\nu' T'} (1 - \delta_{\nu T, \nu' T'}) G_{\gamma\gamma'}^{T\nu} G_{\gamma'\gamma'}^{T'\nu'} \langle \langle \Delta_{nn}^{TT'} \rangle \rangle \delta(\Omega) \quad (4.1.2.30).$$

Der erste Term in (4.1.2.30) stellt dabei eine Summe von Einzelstreuungsprozessen dar, der zweite Term inkohärente elastische Streuungen.

Wir beschränken uns auf Einzelstreuungen. Dabei setzen wir

$$\langle \vec{J}_\nu^T \rangle = \langle J_{\nu z}^T \rangle \vec{e}_z \quad (4.1.2.31) \text{ voraus, und verwenden die}$$

Beziehungen

$$\vec{J} \cdot \vec{S} = J_z S_z + \frac{1}{2} (J_+ S_- + J_- S_+) \quad (4.1.2.32)$$

$$\text{mit } J_\pm = J_x \pm i J_y \quad (4.1.2.33)$$

$$\text{und } J_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle \quad (4.1.2.34)$$

$$J_\pm |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} |j, m\pm 1\rangle \quad (4.1.2.35).$$

Es gilt :

$$\sum_{M,M'} g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) |\langle \gamma M | H_{n\nu}^T | \gamma' M' \rangle|^2 =$$

$$\begin{aligned}
 &= |\langle \gamma | -G^T (\vec{r} - \vec{R}_{nv}) S_z | \gamma' \rangle|^2 \delta(\Omega) \sum_M g_M \langle M | [C_{nv}^T J_{nvz} - C_v^T \langle J_z^T \rangle] | M \rangle + \\
 &+ \frac{1}{4} |\langle \gamma | -G^T (\vec{r} - \vec{R}_{nv}) S_- | \gamma' \rangle|^2 \sum_M g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M-1}) \langle M | C_{nv}^T J_+ + C_{nv}^T J_- | M \rangle + \\
 &+ \frac{1}{4} |\langle \gamma | -G^T (\vec{r} - \vec{R}_{nv}) S_+ | \gamma' \rangle|^2 \sum_M g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M+1}) \langle M | C_{nv}^T J_- - C_{nv}^T J_+ | M \rangle \\
 &\quad (4.1.2.36).
 \end{aligned}$$

Wir mitteln C_{nv}^T über n gemäß $\sum_n C_{nv}^T = \sum_n C_{nv}^T = N C_v^T = \sum_n C_v^T$,
und erhalten für (4.1.2.36) in der Molekularfeldnäherung mit

$$\Delta E = E_M - E_{M+1} = E_{M-1} - E_M.$$

$$\begin{aligned}
 &|\langle nk | G^T (\vec{r} - \vec{R}_v) | nk' \rangle|^2 (|\langle \sigma | S_z | \sigma' \rangle|^2 \delta(\Omega) [\langle J_z^T \rangle - \langle J_z^T \rangle C_v^T] + \\
 &+ \frac{1}{4} |\langle \sigma | S_- | \sigma' \rangle|^2 \delta(\Omega - \Delta E) \langle J_+ J_- \rangle + \frac{1}{4} |\langle \sigma | S_+ | \sigma' \rangle|^2 \delta(\Omega + \Delta E) \langle J_- J_+ \rangle) C_v^T \\
 &\quad (4.1.2.37).
 \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für die Funktion $P_{YY}(\Omega)$ unter der Verwendung

$$|\langle \sigma | S_z | \sigma' \rangle|^2 = \frac{1}{4} \delta_{\sigma, \sigma'} \quad (4.1.2.38)$$

$$|\langle \sigma | S_{\pm} | \sigma' \rangle|^2 = \delta_{\sigma, \sigma' \pm 1} \quad (4.1.2.39)$$

$$\begin{aligned}
 P_{YY}(\Omega) &= \frac{1 - e^{-\omega}}{\omega} N \sum_{\nu r} C_v^T \frac{\Delta^2 r}{(2r)^3} |\langle nk | -G^T (\vec{r} - \vec{R}_v) | nk' \rangle|^2 \\
 &\quad \frac{1}{4} (\delta_{\sigma, \sigma'} \delta(\Omega) [\langle J_z^T \rangle - \langle J_z^T \rangle C_v^T] + \delta_{\sigma, \sigma'-1} \delta(\Omega - \Delta E) \langle J_+ J_- \rangle \\
 &\quad + \delta_{\sigma, \sigma'+1} \delta(\Omega + \Delta E) \langle J_- J_+ \rangle) \\
 &\quad (4.1.2.40).
 \end{aligned}$$

Als das Matricelement $|G_{kk'}|^2$ definieren wir für nur eine Atomart

$$|G_{kk'}|^2 = (\Delta^2 r)^2 \sum_{\nu} |\langle nk | -G^T (\vec{r} - \vec{R}_v) | nk' \rangle|^2 \quad (4.1.2.41)$$

$$\text{und setzen } n_{\text{git}} = \frac{N}{\Delta^2 r} = \frac{1}{V/L^2} \quad (4.1.2.42).$$

Für nur eine Atomart setzen wir alle $J^T = J$ und $C_v^T = 1$, und können dann für $P_{YY}(\Omega)$

$$\begin{aligned}
 P_{YY}(\Omega) &= \frac{1}{(2r)^3} n_{\text{git}} |G_{kk'}|^2 \frac{1}{4} \frac{1 - e^{-\omega}}{\omega} (\delta(\Omega) \delta_{\sigma, \sigma'} [\langle J_z^T \rangle - \langle J_z^T \rangle] \\
 &+ \delta(\Omega - \Delta E) \delta_{\sigma, \sigma'-1} \langle J_+ J_- \rangle + \delta(\Omega + \Delta E) \delta_{\sigma, \sigma'+1} \langle J_- J_+ \rangle) \\
 &\quad (4.1.2.43)
 \end{aligned}$$

schreiben.

Wir haben nun zwei Fälle zu unterscheiden: (i) die Temperatur ist kleiner als die kritische Temperatur für magnetische Ordnung (T_c) oder (ii) die Temperatur ist gleich oder größer T_c . Für $T < T_c$ erhält man

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} n_{\text{git}} |G_{kk'}|^2 \frac{1}{4} (\delta(\Omega) \delta_{\sigma,\sigma'} [\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \delta(\Omega - \Delta E) \delta_{\sigma,\sigma'-1} \frac{1}{\eta} \langle J_z \rangle + \delta(\Omega + \Delta E) \delta_{\sigma,\sigma'+1} \frac{1}{\eta} \langle J_z \rangle) \quad (4.1.2.44),$$

wenn man beachtet, daß

$$\langle J_+ J_- \rangle = (1 + \text{ctgh}(\eta)) \langle J_z \rangle \quad (4.1.2.45)$$

$$\langle J_- J_+ \rangle = (-1 + \text{ctgh}(\eta)) \langle J_z \rangle \quad (4.1.2.46)$$

$$\text{und} \quad \eta = \frac{1}{2} \Delta E \beta \quad (4.1.2.47)$$

gelten.

Für $T \gg T_c$ erhält man $P_{YY'}(\Omega)$ in der Form

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} n_{\text{git}} |G_{kk'}|^2 \frac{1}{4} \delta(\Omega) (\delta_{\sigma,\sigma'} \langle J_z^2 \rangle + \delta_{\sigma,\sigma'-1} [J(J+1) - \langle J_z^2 \rangle] + \delta_{\sigma,\sigma'+1} [J(J+1) - \langle J_z^2 \rangle]) \quad (4.1.2.48).$$

Dabei wurde

$$J_+ J_- = J(J+1) - J_z^2 + J_z \quad (4.1.2.49)$$

$$\text{und} \quad J_- J_+ = J(J+1) - J_z^2 - J_z \quad (4.1.2.50)$$

verwendet, und berücksichtigt, daß für $T \gg T_c$ $\Delta E = \langle J_z \rangle = 0$

gilt. Für $T \gg T_c$ hängt $P_{YY'}(\Omega)$ nicht von der Temperatur ab -

für $T < T_c$ jedoch schon, und zwar durch die Größen $\langle J_z^2 \rangle$, $\langle J_z \rangle$

und ΔE .

4.1.2.1 Die temperaturabhängigen Größen $\langle J_z \rangle$, $\langle J_z^2 \rangle$ und η in der Molekularfeldnäherung

Wir führen zunächst die Zustandssumme

$$Z = \sum_M e^{-\beta E_M} \quad (4.1.2.1.1)$$

ein, und haben dabei

$$E_M = -\Delta E M \quad (4.1.2.1.2) \quad \text{und}$$

$$\eta = \frac{1}{2} \Delta E \beta \quad (4.1.2.1.3) \quad \text{zu setzen. Damit ergibt sich}$$

für Z

$$Z(\eta) = \sum_M e^{2\eta M} = \frac{\sinh(\eta(2J+1))}{\sinh \eta} \quad (4.1.2.1.4).$$

Für $\langle J_z \rangle$ erhält man

$$\langle J_z \rangle = \frac{1}{2J} \frac{dZ}{d\eta} = -\frac{1}{2} \operatorname{ctgh} \eta + \frac{2J+1}{2} \operatorname{ctgh}[(2J+1)\eta] \quad (4.1.2.1.5),$$

und für $\langle J_z^2 \rangle$

$$\begin{aligned} \langle J_z^2 \rangle &= \frac{1}{4J} \frac{d^2 Z}{d\eta^2} = J(J+1) - \frac{2J+1}{2} \operatorname{ctgh} \eta \operatorname{ctgh}[(2J+1)\eta] + \\ &+ \frac{1}{2} \operatorname{ctgh}^2 \eta \end{aligned} \quad (4.1.2.1.6).$$

Wir haben für die obigen Gleichungen

$$J(J+1) - \langle J_z^2 \rangle = \operatorname{ctgh} \eta \langle J_z \rangle \quad (4.1.2.1.7)$$

verwendet. Die Hyperbolischen Funktionen wurden entsprechend der Definition in /14/ verwendet.

Berücksichtigen wir in H_{ff} nur eine Atomart und indizieren wir die Spins mit i und j, so können wir für H_{ff} aus (4.1.7)

$$H_{ff} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \alpha_{ij} \vec{J}_i \vec{J}_j \quad (4.1.2.1.8) \quad \text{schreiben.}$$

Setzen wir nun für $\alpha_{ij} = 4\alpha (g-1)^2$ ($g \dots$ Landee Faktor), so erhalten wir für

$$H_{ff} = -2\alpha (g-1)^2 \sum_{ij} \vec{J}_i \vec{J}_j = -2\alpha (g-1)^2 \sum_i J_i \sum_j J_j \quad (4.1.2.1.9).$$

Mit $\sum_{j=1}^n \vec{J}_j = n \langle \vec{J} \rangle$ (4.1.2.1.10) bekommen wir für die Energieauf-

spaltung ΔE verursacht durch das Molekularfeld

$$E_M - E_{MF} = \Delta E = g \mu_B |\vec{H}_{MF}| \quad \mu \dots \text{Bohr'sches Magneton (4.1.2.1.11)}$$

mit

$$\frac{2\alpha(g-1)^2}{g \cdot \mu_B} \sum_j \vec{J}_j = \frac{2\alpha(g-1)^2 \mu}{g \cdot \mu_B} \langle \vec{J} \rangle = \vec{H}_{MF} \quad (\langle \vec{J} \rangle = \langle J_z \rangle \vec{e}_z)$$

in erster Ordnung Störungstheorie.

Damit gilt für η :

$$\eta = \frac{3}{2} \frac{T_c}{T} \frac{\langle J_z \rangle}{J(J+1)} \quad (4.1.2.1.12),$$

$$\text{wenn man } T_c \text{ als } T_c = \frac{2n\alpha(g-1)^2 J(J+1)}{3 k_B} \quad (4.1.2.1.13)$$

eingeführt. Zu festem J erhält man mit (4.1.2.1.12) die Bestimmungsgleichung für $\langle J_z \rangle$ aus (4.1.2.1.5)

$$\langle J_z \rangle = \frac{1}{2} \left\{ (2J+1) \operatorname{ctgh} \left((2J+1) \frac{\alpha(g-1)^2 \eta}{k_B T} \langle J_z \rangle \right) - \operatorname{ctgh} \left(\frac{\alpha(g-1)^2 \eta}{k_B T} \langle J_z \rangle \right) \right\} \quad (4.1.2.1.14).$$

T_c ist dabei so eingeführt worden, daß $\langle J_z \rangle$ für $T=T_c$ verschwindet.

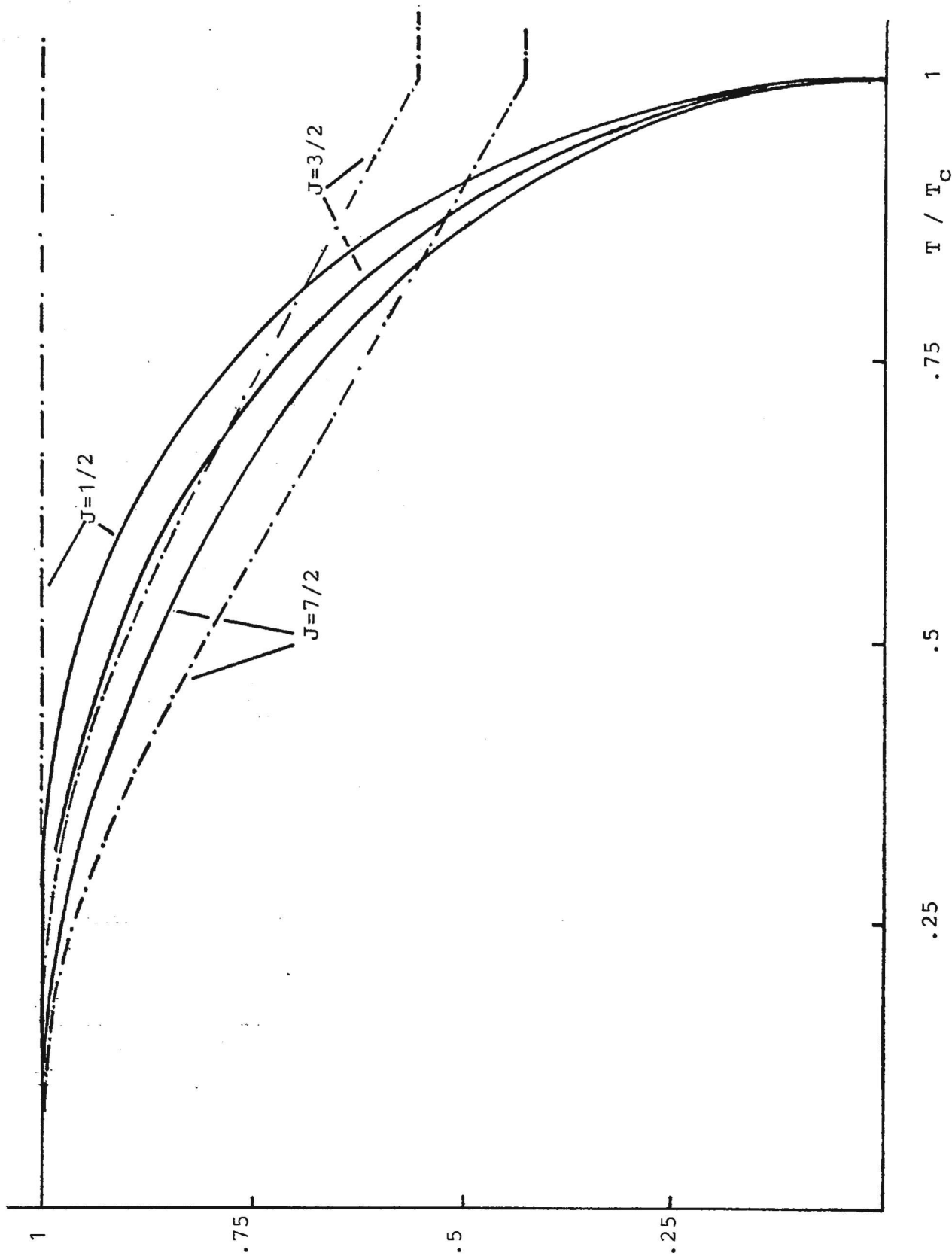
Bei $T \gg T_c$ ergibt sich für $\langle J_z^2 \rangle$

$$\langle J_z^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{M=-J}^J M^2 = \frac{1}{2J+1} \sum_{M=-J}^J M^2 \quad (4.1.2.1.15).$$

In Abbildung 4.1.2.1.1 sind die Größen $\langle J_z^2 \rangle$ und $\langle J_z \rangle$ in Abhängigkeit der dimensionslosen Temperatur T/T_c für $J=1/2$, $3/2$ und $7/2$ dargestellt.

Abbildung 4.1.2.1.1 : Die Größen $\langle J_z \rangle / J$ und $\langle J_z^2 \rangle / J^2$ in der Molekularfeldnäherung für $J = 1/2, 3/2$ und $7/2$

— $\langle J_z \rangle / J$, - - - - $\langle J_z^2 \rangle / J^2$



4.1.2.2 Die Berechnung der Modellspektralfunktionen für die Magnetische-Streuung

In diesem Kapitel wollen wir die Modellspektralfunktionen für die Magnetische-Streuung für $T > T_c$ und $T < T_c$ im Rahmen der Molekularfeldnäherung berechnen. Wir behandeln zunächst den Fall $T < T_c$. Dabei gilt für die Funktion $P_{YY'}(\Omega)$ der Gleichung (4.1.2.44)

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} n_{\text{git}} |G_{kk'}|^2 \frac{1}{4} (\delta(\Omega) \delta_{\sigma, \sigma'} [\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \delta(\Omega - 4E) \delta_{\sigma, \sigma'-1} \frac{1}{2} \langle J_z \rangle + \delta(\Omega + 4E) \delta_{\sigma, \sigma'+1} \frac{1}{2} \langle J_z \rangle) \quad (4.1.2.2.1).$$

Für die Spektralfunktionen $G_{SS'}(E, E', \Omega)$ verwenden wir ihre Definition aus Gleichung (3.2.1.12)

$$G_{SS'}(E, E', \Omega) = \frac{m}{3n} \frac{(2\pi)^6}{(4\pi)^2} \sum_{\gamma\gamma'} P_{YY'}(\Omega) [v(\gamma) - sv(\gamma')] [v(\gamma) - s'v(\gamma')] \delta(E - E_\gamma + \mu) \delta(E' - E_{\gamma'} + \mu) \quad (4.1.2.2.2).$$

Wir wollen nun zwei Fälle behandeln, nämlich (i) die Aufspaltung des Leitfähigkeitsbandes in ein $\uparrow$ -Band und ein $\downarrow$ -Band mit einem Energieunterschied

$$\Delta b = -\frac{1}{2} \langle J_z \rangle \frac{N_{\text{af}}}{V_0 |\epsilon_2|} |G_0| \text{sign}(G_0) \quad (4.1.2.2.3)$$

mit G_0 aus (4.1.16), die durch die Wechselwirkung der Leitungselektronen mit den magnetischen Seltenen Erd Ionen verursacht wird, und (ii) die Nichtberücksichtigung dieser Aufspaltung.

Im ersten Fall ergeben sich die Energien E_γ zu:

$$E_\gamma = E_k^0 + E_\sigma \quad (4.1.2.2.4)$$

$$E_{k\uparrow} = E_k^0 + \Delta b \quad (4.1.2.2.5)$$

$$E_{k\downarrow} = E_k^0 - \Delta b \quad (4.1.2.2.6),$$

(in Störungstheorie erster Ordnung).

Für die Geschwindigkeiten setzen wir näherungsweise

$$\vec{v}(\gamma) = \vec{v}(\vec{k}) \quad (4.1.2.2.7)$$

$$\vec{v}(-\vec{k}) = -\vec{v}(\vec{k}) \quad (4.1.2.2.8).$$

Nähern wir noch $|G_{kk}|$ durch

$$|G_{kk}|^2 = |G|^2 \quad (4.1.2.2.9)$$

an, so erhält man für die Spektralfunktionen G_{ss} , mit Berücksichtigung der Bandaufspaltung

$$\begin{aligned} G_{ss}(E, E', \Omega) &= \delta(\Omega) [\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2] [a_{ss}(E-\Delta b, E'-\Delta b) + \\ &a_{ss}(E+\Delta b, E'+\Delta b)] + \delta(\Omega - \Delta E) \frac{1}{n} \langle J_z \rangle a_{ss}(E+\Delta b, E'-\Delta b) + \\ &+ \delta(\Omega + \Delta E) \frac{1}{n} \langle J_z \rangle a_{ss}(E-\Delta b, E'+\Delta b) \end{aligned} \quad (4.1.2.2.10)$$

mit

$$a_{++}(E, E') = a_{--}(E, E') = k_s a_m \frac{1}{\bar{v}(\Omega) N(\Omega)} [\bar{v}(E) N(E') + \bar{v}(E') N(E)] \quad (4.1.2.2.11)$$

und

$$a_{+-}(E, E') = a_{-+}(E, E') = k_s a_m \frac{1}{\bar{v}(\Omega) N(\Omega)} [\bar{v}(E) N(E') - \bar{v}(E') N(E)] \quad (4.1.2.2.12)$$

Für $k_s a_m$, die absolute Stärke der Magnetischen Streuung, gilt dabei

$$k_s a_m = \frac{(2\pi)^3}{16} n_{\text{git}} |G|^2 \frac{m}{3n\Delta r} \sum_{\gamma} v^2(\gamma) \delta(E_{\gamma} - \mu) \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\gamma'} \delta(E_{\gamma'} - \mu) \quad (4.1.2.2.13)$$

Betrachten wir nun den zweiten Fall, nämlich

$$E_{k\sigma} = E_k \quad (4.1.2.2.14),$$

der also die Aufspaltung des Leitfähigkeitsbandes nicht berücksichtigt (Bei der Rechnung werden wir dann (i) mit (ii) vergleichen). Man erhält dann für $G_{ss}(E, E', \Omega)$

$$\begin{aligned} G_{ss}(E, E', \Omega) &= a_{ss}(E, E') (2 \delta(\Omega) [\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \\ &+ \langle J_z \rangle / n [\delta(\Omega - \Delta E) + \delta(\Omega + \Delta E)]) \end{aligned} \quad (4.1.2.2.15).$$

Die Temperaturabhängigkeit der Spektralfunktionen (4.1.2.2.10) und (4.1.2.2.15) ist dabei durch die Größen $\langle J_z^2 \rangle$, $\langle J_z \rangle$, Δb

und E , sowie $\bar{v}$ und N , gegeben

Für $T \gg T_c$ hat man zur Berechnung der Spektralfunktionen $P_{YY}(\Omega)$ aus (4.1.2.48) zu verwenden

$$P_{YY}(\Omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} n_{git} |G_{kk'}|^2 \delta(\Omega) (\delta_{\sigma,\sigma'} \langle J_z^2 \rangle + \delta_{\sigma,\sigma'+1} [J(J+1) - \langle J_z^2 \rangle] + \delta_{\sigma,\sigma'+1} [J(J+1) - \langle J_z^2 \rangle]) \quad (4.1.2.2.16).$$

Benutzen wir die gleichen Näherungen wie für den Fall $T \ll T_c$ ohne Berücksichtigung der Bandaufspaltung, so erhalten wir für die Spektralfunktion der Magnetischen Streuung für $T \gg T_c$

$$G_{ss'}(E, E', \Omega) = a_{ss'}(E, E') 2 J(J+1) \delta(\Omega) \quad (4.1.2.2.17)$$

Für $T \gg T_c$ hängen die Spektralfunktionen somit über die Größen $\bar{v}$ und N von der Temperatur ab.

4.1.3 Die Modellspektralfunktionen der Phononen-Streuung

Der Modell-Hamiltonoperator für die Phononen-Streuung (4.1.20) lautet

$$H_{\text{el-ph}} = - \sum_{n\nu i} \frac{\partial V^{\nu}}{\partial r_i} (\vec{r} - \vec{R}_{n\nu}) S_{n\nu i} \quad (4.1.3.1)$$

$V^{\nu}(\vec{r})$ ist dabei das für das ν -te Atom der Einheitszelle charakteristische Wechselwirkungspotential, das die Wechselwirkung mit den Leitungselektronen beschreibt. $S_{n\nu i}$ ist die i -te Koordinate der Teilchenauslenkung am Ort $\vec{R}_{n\nu}$.

Wir wollen als nächstes die Funktion $P_{YY'}(\Omega)$

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1 - e^{-\Omega}}{\Omega} \sum_{M M'} g_M \frac{\Delta^{\nu} r}{(2\pi)^3} |\langle Y M | H_{\text{WW}} | Y' M' \rangle|^2 \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) \quad (4.1.3.2)$$

berechnen.

Dazu behandeln wir als erstes die Phononen-Systemzustände.

In zweiter Quantisierung lautet der Phononen-Hamiltonoperator

H_{ph}

$$H_{\text{ph}} = \sum_{\vec{q}\lambda} \hbar \omega_{\vec{q}\lambda} (b_{\vec{q}\lambda}^{\dagger} b_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2}) \quad (4.1.3.3).$$

$|\{ \dots n_{\vec{q}\lambda} \dots \} \rangle$ sind die Eigenzustände zu (4.1.3.3)

$$|\{ \dots n_{\vec{q}\lambda} \dots \} \rangle = \prod_{\vec{q}\lambda} \frac{1}{\sqrt{n_{\vec{q}\lambda}!}} (b_{\vec{q}\lambda}^{\dagger})^{n_{\vec{q}\lambda}} |0\rangle \quad (4.1.3.4).$$

$|0\rangle$ ist der Vakuumzustand für das Phononen-System. Die Energien sind durch

$$E_{\{ \dots n_{\vec{q}\lambda} \dots \}} = \sum_{\vec{q}\lambda} \hbar \omega_{\vec{q}\lambda} (n_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2}) \quad (4.1.3.5)$$

festgelegt.

Die Phononen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$[b_{\vec{q}\lambda}, b_{\vec{q}'\lambda'}] = [b_{\vec{q}\lambda}^{\dagger}, b_{\vec{q}'\lambda'}^{\dagger}] = 0 \quad (4.1.3.6)$$

$$[b_{\vec{q}\lambda}, b_{\vec{q}'\lambda'}^{\dagger}] = \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \delta_{\lambda, \lambda'} \quad (4.1.3.7),$$

und sind mit den Operatoren der Teilchenauslenkungen aus (4.1.3.1) durch

$$S_{nvi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}, \lambda} \left(\frac{\hbar}{2M\nu\omega_{\vec{q}, \lambda}} \right)^{1/2} e^{i\vec{q}\vec{R}_n} C_{vi}(\vec{q}, \lambda) [b_{\vec{q}, \lambda}^+ + b_{\vec{q}, \lambda}] \quad (4.1.3.8)$$

verknüpft.

Dabei erfüllen die $\vec{C}_v$ als Eigenvektoren einer hermiteschen Matrix (= Dynamische Matrix) die Orthogonalitätsbeziehungen

$$\sum_{\nu} C_{\nu i}^*(\vec{q}, \lambda) C_{\nu i'}(\vec{q}, \lambda') = \delta_{\lambda, \lambda'} \quad (4.1.3.9)$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{\lambda} C_{vi}^*(\vec{q}, \lambda) C_{vi'}(\vec{q}, \lambda) = \delta_{vi, vi'} \quad (4.1.3.10).$$

Wir führen nun die Größe M als

$$M = \sum_{\nu} M_{\nu} \quad (4.1.3.11) \text{ ein, und setzen}$$

für die C_{vi} näherungsweise

$$C_{vi}(\vec{q}, \lambda_{qk}) = \frac{\sqrt{M_{\nu}}}{M} e_i(\lambda_{qk}) \text{ mit } \vec{e}(\lambda_{qk}) \perp \vec{e}(\lambda_{qk'}), \text{ d.h.}$$

$$\sum_{\lambda_{qk}} C_{vi}^*(\vec{q}, \lambda_{qk}) C_{vi'}(\vec{q}, \lambda_{qk}) = \frac{\sqrt{M_{\nu} M_{\nu'}}}{M} \delta_{i, i'} \quad (4.1.3.12)$$

und wegen (4.1.3.10)

$$\sum_{\lambda_{q\sigma}} C_{vi}^*(\vec{q}, \lambda_{q\sigma}) C_{vi'}(\vec{q}, \lambda_{q\sigma}) = (\delta_{v, v'} - \frac{\sqrt{M_{\nu} M_{\nu'}}}{M}) \delta_{i, i'} \quad (4.1.3.13).$$

Wir wenden uns nun der Auswertung von $P_{YY}(\Omega)$ zu. Für die Matrixelemente (4.1.3.2) erhält man mit (4.1.3.1)

$$\langle YM | H_{ww} | Y'M' \rangle = \sum_{nvi} \langle Y | -\frac{\partial V}{\partial r_i}(\vec{r} - \vec{R}_n) | Y' \rangle \langle M | S_{nvi}^+ | M' \rangle \quad (4.1.3.14)$$

$$\langle Y'M' | H_{ww} | YM \rangle = \sum_{nvi} \langle Y' | -\frac{\partial V}{\partial r_i}(\vec{r} - \vec{R}_n) | Y \rangle \langle M' | S_{nvi}^- | M \rangle \quad (4.1.3.15).$$

Mit (4.1.3.8) gilt:

$$\begin{aligned} \langle M | S_{nvi}^+ | M' \rangle \langle M' | S_{nvi}^- | M \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \lambda} \left(\frac{\hbar}{2M\nu\omega_{\vec{q}, \lambda}} \right)^{1/2} e^{i\vec{q}\vec{R}_n} C_{vi}^*(\vec{q}, \lambda) \langle M | b_{-\vec{q}, \lambda} + b_{\vec{q}, \lambda}^+ | M' \rangle \\ &\quad + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \lambda'} \left(\frac{\hbar}{2M\nu\omega_{\vec{q}, \lambda'}} \right)^{1/2} e^{i\vec{q}\vec{R}_n} C_{vi'}(\vec{q}, \lambda') \langle M' | b_{-\vec{q}, \lambda'} + b_{\vec{q}, \lambda'}^+ | M \rangle \end{aligned} \quad (4.1.3.18).$$

Da es sich um Ein-Phonon Streuprozesse handelt, kann man zu festem $|M\rangle$ Zustände $|M'\rangle$ finden, für die

$$|M'\rangle = b_{\vec{q}\lambda}^+ |M\rangle \quad (4.1.3.20)$$

und $|M'\rangle = b_{-\vec{q}\lambda} |M\rangle \quad (4.1.3.21)$

gilt. Dabei erhält man für (4.1.3.20) $E_M - E_{M'} = \hbar\omega_{\vec{q}\lambda}$ und für (4.1.3.21) $E_M - E_{M'} = -\hbar\omega_{\vec{q}\lambda}$. Somit kann man schreiben :

$$\sum_{MM'} g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) \langle M | S_{nvi}^+ | M' \rangle \langle M' | S_{nvi} | M \rangle = \\ \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}\lambda} \frac{\kappa}{2\omega_{\vec{q}\lambda}} \frac{1}{\sqrt{H_\nu H_\nu}} e^{i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} c_{vi}^*(\vec{q}, \lambda) c_{vi}(\vec{q}, \lambda) [\delta(\Omega + \hbar\omega_{\vec{q}\lambda}) \\ g_M \langle M | b_{\vec{q}\lambda}^+ b_{\vec{q}\lambda} | M \rangle + \delta(\Omega - \hbar\omega_{\vec{q}\lambda}) \sum_M g_M \langle M | b_{-\vec{q}\lambda} b_{-\vec{q}\lambda}^+ | M \rangle] \quad (4.1.3.22)$$

Wir haben die Orthogonalitätsrelation

$$\langle M | M' \rangle = \langle \{ \dots n_{\vec{q}\lambda} \dots \} | \{ \dots n'_{\vec{q}\lambda} \dots \} \rangle = \frac{1}{N} \delta_{n_{\vec{q}\lambda}, n'_{\vec{q}\lambda}} = \delta_{M, M'} \quad (4.1.3.23)$$

für die Systemzustände $|M\rangle = |\{ \dots n_{\vec{q}\lambda} \dots \} \rangle \quad (4.1.3.24)$ ausgenutzt. Beachtet man weiter, daß

$$\sum_M g_M \langle M | b_{\vec{q}\lambda}^+ b_{\vec{q}\lambda} | M \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\vec{q}\lambda}} - 1} \quad (4.1.3.25)$$

$$\sum_M g_M \langle M | b_{-\vec{q}\lambda} b_{-\vec{q}\lambda}^+ | M \rangle = \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_{\vec{q}\lambda}}} \quad (4.1.3.26)$$

gilt, so erhält man:

$$\sum_{MM'} g_M \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) \langle M | S_{nvi}^+ | M' \rangle \langle M' | S_{nvi} | M \rangle = \\ = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}\lambda} \frac{\kappa}{2\omega_{\vec{q}\lambda}} \frac{1}{\sqrt{H_\nu H_\nu}} e^{i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} c_{vi}^*(\vec{q}, \lambda) c_{vi}(\vec{q}, \lambda) \frac{\Omega}{1 - e^{-\beta\Omega}} \\ \left(\frac{1}{\kappa\omega_{\vec{q}\lambda}} [\delta(\Omega - \hbar\omega_{\vec{q}\lambda}) + \delta(\Omega + \hbar\omega_{\vec{q}\lambda})] \right) \quad (4.1.3.27).$$

Für $P_{YY}(\Omega)$ schreibt man weiter

$$P_{YY}(\Omega) = \frac{1}{2\hbar} \frac{\kappa^2}{\Omega^2} \frac{\Delta^2}{(2\pi)^3 N} \sum_{\vec{q}\lambda} \sum_{\vec{q}'\lambda'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} e^{-i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} (\delta(\Omega + \hbar\omega_{\vec{q}\lambda}) + \delta(\Omega - \hbar\omega_{\vec{q}\lambda})) \\ \sum_{\nu_i} \sum_{\nu'_i} \langle \nu_i | \frac{\partial V}{\partial r_i} (\vec{r} - \vec{R}_\nu) | \nu'_i \rangle \langle \nu'_i | \frac{\partial V}{\partial r_i} (\vec{r} - \vec{R}_\nu) | \nu_i \rangle \frac{1}{\sqrt{H_\nu H_\nu}} c_{vi}^*(\vec{q}, \lambda) c_{vi}(\vec{q}, \lambda) \quad (4.1.3.28).$$

Dabei gilt

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{R}_{\mathbf{n}} - \vec{R}_{\mathbf{n}'})} = N \delta_{\vec{q}, \vec{k}' - \vec{k} + \vec{K}_h} \quad (4.1.3.29)$$

Als nächstes definieren wir

$$V_{YY'}^{vi} = \Delta^3 r \langle Y | \frac{\partial V^v}{\partial r_i} (\vec{r} - \vec{R}_v) | Y' \rangle \quad (4.1.3.30)$$

$$n_{git} = \frac{N}{\Delta^3 r} = \frac{1}{V_0 \epsilon_z} \quad (4.1.3.31).$$

Mit den Näherungen aus (4.1.3.12) und (4.1.3.13) erhält man

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1}{2\hbar} \frac{k^2}{\Omega^2} \frac{n_{git}}{(2\pi)^3} \frac{1}{M} \sum_{\nu, \nu'} V_{YY'}^{vi} V_{YY'}^{v'i} [\delta(\Omega + \hbar \omega_{\nu\nu'}) + \delta(\Omega - \hbar \omega_{\nu\nu'})] + \\ + \frac{1}{2\hbar} \frac{k^2}{\Omega^2} \frac{1}{(2\pi)^3} n_{git} \left(\sum_{\nu} \frac{1}{M_\nu} |V_{YY'}^{vi}|^2 - \frac{1}{M} \sum_{\nu, \nu'} V_{YY'}^{vi} V_{YY'}^{v'i} \right) [\delta(\Omega + \hbar \omega_{\nu\nu'}) + \delta(\Omega - \hbar \omega_{\nu\nu'})] \quad (4.1.3.34).$$

Wir nehmen nun für $V_{YY'}^{vi}$ an /6/

$$V_{YY'}^{vi} = i q_i V_{YY'}^v \quad (4.1.3.35)$$

$$\text{mit} \quad \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \quad (4.1.3.36).$$

Im weiteren definieren wir $\bar{V}_{YY'}$, und $\bar{V}_{YY'}^2$, in der Form

$$\bar{V}_{YY'} = \sum_{\nu} V_{YY'}^v \quad (4.1.3.37)$$

$$\bar{V}_{YY'}^2 = \sum_{\nu} \frac{M}{M_\nu} |V_{YY'}^v|^2 \quad (4.1.3.38).$$

Damit ergibt sich für $P_{YY'}(\Omega)$

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1}{2\hbar} \frac{k^2 q^2}{\Omega^2} \frac{n_{git}}{(2\pi)^3} \frac{1}{M} |\bar{V}_{YY'}|^2 [\delta(\Omega + \hbar \omega_{\nu\nu'}) + \delta(\Omega - \hbar \omega_{\nu\nu'})] + \\ + \frac{1}{2\hbar} \frac{k^2 q^2}{\Omega^2} \frac{n_{git}}{(2\pi)^3} \frac{1}{M} [\bar{V}_{YY'}^2 - |\bar{V}_{YY'}|^2] [\delta(\Omega + \hbar \omega_{\nu\nu'}) + \delta(\Omega - \hbar \omega_{\nu\nu'})] \quad (4.1.3.39).$$

Setzen wir noch näherungsweise /6/

$$\frac{k^2 q^2}{\Omega^2} |\bar{V}_{YY'}|^2 \approx \frac{1}{v_s^2} |\bar{V}|^2 \quad (4.1.3.40)$$

v_s ... Schallgeschwindigkeit ,

so erhalten wir schließlich

$$P_{YY'}(\Omega) = \frac{1}{2\hbar} \frac{n_{git}}{(2\pi)^3} \frac{|\bar{V}|^2}{M v_s^2} [\delta(\Omega + \hbar \omega_{\nu\nu'}) + \delta(\Omega - \hbar \omega_{\nu\nu'})] \delta_{\sigma, \sigma'} \quad (4.1.3.41)$$

Weil Phononen Quasiteilchen ohne Spin sind, ist bei Wechselwirkung mit ihnen eine Änderung der Spins der Leitungselektronen verboten. In Gleichung (4.1.3.41) steht noch die vom Festkörper abhängige Funktion $\omega_{\vec{q}}$, für die wir folgende Annahmen treffen, die bereits in Gleichung (4.1.3.40) eingegangen sind:

$$\omega_{\vec{q}} = v_s |\vec{q}| \quad \text{für } q < q_D \quad (4.1.3.42)$$

und
$$\omega_{\vec{q}} = v_s |\vec{q}_D| \quad \text{für } q > q_D \quad (4.1.3.43).$$

Die Gleichungen (4.1.3.42) und (4.1.3.43) legen Modellparameter für die Spektralfunktionen der Phononen-Streuung, nämlich die Größen v_s (Schallgeschwindigkeit) und q_D , fest. Für q_D gilt

$$\hbar v_s |\vec{q}_D| = k_B \theta_{Debye} = \Omega_D \quad (4.1.3.44).$$

Dabei ist θ_{Debye} die Debey-Temperatur.

Wir wollen als nächstes ausgehend von $P_{YY}(\Omega)$ die Spektralfunktionen für $\Omega > 0$ ausrechnen. Für diesen Fall lautet

$$P_{YY}(\Omega) = \frac{1}{2\hbar} \frac{n_{3/2}}{(2\pi)^3} \frac{|\vec{V}|^2}{M v_s^2} \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(\Omega - \hbar \omega_{\vec{q}}) \quad (4.1.3.45).$$

Wir verwenden die Definition der Spektralfunktionen (3.2.1.12) und erhalten für G_{++} und G_{--}

$$G_{++}(E, E', \Omega) = \frac{(2\pi)^3}{2\hbar} n_{3/2} \frac{|\vec{V}|^2}{M v_s^2} \frac{1}{2} \frac{m}{3n} \frac{1}{(\Delta^2)^2} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} [v(\vec{r}) - v(\vec{r}')]^2 \delta(E - E_Y + \mu) \delta(E' - E_Y + \mu) \cdot \frac{\sum_{\vec{q}} [v(\vec{r}) - v(\vec{r}')]^2 \delta(E - E_Y + \mu) \delta(E' - E_Y + \mu) \delta(\Omega - \hbar \omega_{\vec{q}})}{\sum_{\vec{q}} [v(\vec{r}) - v(\vec{r}')]^2 \delta(E - E_Y + \mu) \delta(E' - E_Y + \mu)} \quad (4.1.3.46)$$

$$G_{--}(E, E', \Omega) = \frac{(2\pi)^3}{2\hbar} n_{3/2} \frac{|\vec{V}|^2}{M v_s^2} \frac{1}{2} \frac{m}{3n} \frac{1}{(\Delta^2)^2} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} [v(\vec{r}) + v(\vec{r}')]^2 \delta(E - E_Y + \mu) \delta(E' - E_Y + \mu) \cdot \frac{\sum_{\vec{q}} [v(\vec{r}) + v(\vec{r}')]^2 \delta(E - E_Y + \mu) \delta(E' - E_Y + \mu) \delta(\Omega - \hbar \omega_{\vec{q}})}{\sum_{\vec{q}} [v(\vec{r}) + v(\vec{r}')]^2 \delta(E - E_Y + \mu) \delta(E' - E_Y + \mu)} \quad (4.1.3.47)$$

Dabei gilt für den Quotienten von G_{++} in Gleichung (4.1.3.46) mit (4.1.3.42), (4.1.3.43) und $\mu = E_F$ näherungsweise

$$\frac{\frac{4}{q_0^3} \int_{k_F - k_{E'}}^{k_F + k_{E'}} dq \, q \, q^2 \delta(\Omega - \hbar \omega_q)}{\frac{4}{q_0^3} \int_{k_F - k_{E'}}^{k_F + k_{E'}} dq \, q \, q^2} = \frac{\frac{4 \Omega^3}{\Omega_0^3} + \left[\left(\frac{k_F + k_{E'}}{q_0} \right)^4 - 1 \right] \delta(\Omega - \Omega_0)}{\left(\frac{k_F + k_{E'}}{q_0} \right)^4} \quad (4.1.3.48)$$

und für den von G_{--} , Gleichung (4.1.3.47) näherungsweise

$$\frac{\frac{4}{q_0^4} \int_0^{2k_F} dq \, q \, [4k_F^2 - q^2] \delta(\Omega - \hbar \omega_q)}{\frac{4}{q_0^4} \int_0^{2k_F} dq \, q \, [4k_F^2 - q^2]} = \frac{\left(\frac{2k_F}{q_0} \right)^2 \frac{4\Omega}{\Omega_0^3} - \frac{4\Omega^3}{\Omega_0^3} + \left[\left(\frac{2k_F}{q_0} \right)^4 - 2 \left(\frac{2k_F}{q_0} \right)^2 + 1 \right] \delta(\Omega - \Omega_0)}{\left(\frac{2k_F}{q_0} \right)^4} \quad (4.1.3.49).$$

Setzen wir noch für

$$\left(\frac{q_0}{2k_F} \right)^2 = \alpha \quad (4.1.3.50),$$

und daraus

$$\alpha^2 = \left(\frac{q_0}{k_F + k_{E'}} \right)^4 \frac{\bar{v}(E) N(E') + \bar{v}(E') N(E)}{2 \bar{v}(0) N(0)} = \left(\frac{q_0}{2k_F} \right)^4 \quad (4.1.3.51),$$

so lauten die Gleichungen für G_{++} und G_{--}

$$G_{++}(E, E', \Omega) = \frac{1}{\lambda} a \left[\alpha^2 \frac{4\Omega^3}{\Omega_0^3} \delta(\Omega - \Omega_0) + \left(\frac{\bar{v}(E) N(E') + \bar{v}(E') N(E)}{2 \bar{v}(0) N(0)} - \alpha^2 \right) \delta(\Omega - \Omega_0) \right] \quad (4.1.3.52)$$

$$G_{--}(E, E', \Omega) = \frac{1}{\lambda} a \left[\left(\alpha \frac{4\Omega}{\Omega_0^2} - \alpha^2 \frac{4\Omega^3}{\Omega_0^3} \right) \theta(\Omega_0 - \Omega) + (1 - 2\alpha + \alpha^2) \delta(\Omega - \Omega_0) \right] \quad (4.1.3.53)$$

$$\text{mit } a = \frac{(2\pi)^3 n_{gr} |\bar{v}|^2}{2 M v_F^2} \bar{v}(0) N(0) \quad (4.1.3.54)$$

Für G_{+-} erhält man

$$G_{+-}(E, E', \Omega) = \frac{1}{2\lambda} \frac{(2\pi)^3 n_{gr}}{M v_F^2} |\bar{v}|^2 \frac{m}{3m\lambda^2 r} \sum_{\gamma\gamma'} [v^2(\gamma) - v^2(\gamma')] \delta(E - E_\gamma + \mu) \delta(E' - E_{\gamma'} + \mu) \frac{\sum_{\gamma'} \frac{[v^2(\gamma) - v^2(\gamma')] \delta(E - E_\gamma + \mu) \delta(E' - E_{\gamma'} + \mu) \delta(\Omega - \hbar \omega_\gamma)}{\sum_{\gamma'} [v^2(\gamma) - v^2(\gamma')] \delta(E - E_\gamma + \mu) \delta(E' - E_{\gamma'} + \mu)}} \quad (4.1.3.55),$$

wobei für den Quotienten in (4.1.3.55) näherungsweise gilt:

$$\frac{(k_F^2 - k_{E'}^2) \frac{2}{q_0^2} \int_0^{2k_F} dq \, q \, \delta(\Omega - \hbar \omega_q)}{(k_F^2 - k_{E'}^2) \frac{2}{q_0^2} \int_0^{2k_F} dq \, q} = \frac{\frac{2\Omega}{\Omega_0^3} + \left[\left(\frac{2k_F}{q_0} \right)^2 - 1 \right] \delta(\Omega - \Omega_0)}{\left(\frac{2k_F}{q_0} \right)^2} \quad (4.1.3.56)$$

Somit ergibt sich für G_{+-}

$$G_{+-}(E, E', \Omega) = \frac{1}{\beta} a \frac{\bar{v}(E)N(E') - \bar{v}(E')N(E)}{\bar{v}(0)N(0)} \left[\alpha \frac{2\Omega}{\Omega_0} (\Omega_0 - \Omega) + (1-\alpha) \delta(\Omega - \Omega_0) \right] \quad (4.1.3.57).$$

Die Gleichungen (4.1.3.52), (4.1.3.53) und (4.1.3.57) stellen die Modellspektralfunktionen der Phononen-Streuung für $\Omega \gg 0$ dar. Ihre Temperaturabhängigkeit ist durch den Faktor $1/\beta$, und durch die Größen $\bar{v}$, N gegeben.

Außerdem findet man, daß die Spektralfunktionen wegen des Verbotes der Spinänderung in $P_{YY}(\Omega)$ (4.1.3.41), keine Terme der Ordnung Δb (Energieaufspaltung des Leitfähigkeitsbandes) enthalten.

4.2 Die Modellspektralfunktionen als Ausgangspunkt zur Berechnung der Transportkoeffizienten

Um mit den im Abschnitt 3.3 behandelten Programmpaketen AS und TC tatsächlich Transportkoeffizienten berechnen zu können, benötigen wir die Modellspektralfunktionen G_{ss}° und $G_{ss}^{\prime}$, der einzelnen Wechselwirkungen in der Form

$$G(\Omega) = \begin{array}{|c|} \hline \Omega | G(\Omega) \\ \hline \vdots \\ \hline \end{array} + \sum_j b_j \delta(\Omega - \Omega_j) \quad (4.2.1).$$

Wir haben im ersten Teil von Kapitel 4 für die Potential-, die Magnetische- und die Phononen-Streuung ausgehend von den jeweiligen Modell-Hamiltonoperatoren die Spektralfunktionen G_{ss} erhalten. Wir gehen nun von diesen Funktionen aus, um die G_{ss}° und die $G_{ss}^{\prime}$ zu erhalten, die für die Berechnung des Matrixelementes des Stoßoperators erforderlich sind.

4.2.1 Die Modellspektralfunktionen G_{ss}° und $G_{ss}^{\prime}$ für die einzelnen Streumechanismen

4.2.1.1 Die Modellspektralfunktionen G_{ss}° und $G_{ss}^{\prime}$ für die Potential-Streuung

Für die Potential-Streuung erhielten wir im Kapitel (4.1.1) folgende Spektralfunktionen $G_{ss}^{\prime}(E, E', \Omega)$

$$G_{ss}^{\prime}(E, E', \Omega) = k_{\bullet} a_v \frac{\bar{V}(E)N(E') + \bar{V}(E')N(E)}{\bar{V}(0)N(0)} \delta(\Omega) \quad (4.2.1.1.1)$$

$$G_{+-}(E, E', \Omega) = k_B a_V \frac{\bar{v}(E)N(E') - \bar{v}(E')N(E)}{\bar{v}(0)N(0)} \delta(\Omega) \quad (4.2.1.1.2)$$

mit der Stärke der Potential-Streuung

$$k_B a_V = (2\pi)^3 n_{\text{git}} |V|^2 \frac{m}{3n(4\pi)^3} \sum_{\gamma} v^2(\gamma) \delta(E_Y - \mu) \delta(E_{Y'} - \mu) \quad (4.2.1.1.3)$$

$$\text{und } \bar{v}(E) = \frac{m}{3n(4\pi)^3} \sum_{\gamma} v^2(\gamma) \delta(E - E_Y + \mu) \quad (4.2.1.1.4)$$

$$N(E) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\gamma} \delta(E - E_Y + \mu) \quad (4.2.1.1.5)$$

Damit ergibt sich für $G_{SS'}^{\circ}(\Omega)$

$$G_{++}^{\circ}(\Omega) = G_{--}^{\circ}(\Omega) = k_B a_V \delta(\Omega) \quad (4.2.1.1.6)$$

$$\text{und } G_{+-}^{\circ}(\Omega) = G_{-+}^{\circ}(\Omega) = 0 \quad (4.2.1.1.7),$$

und für $G_{SS'}^1(\Omega)$

$$G_{++}^1(\Omega) = G_{--}^1(\Omega) = \frac{\bar{v}'(0)N(0) + \bar{v}(0)N'(0)}{\bar{v}(0)N(0)} k_B a_V \delta(\Omega) \quad (4.2.1.1.8)$$

$$\text{und } G_{+-}^1(\Omega) = \frac{\bar{v}'(0)N(0) - \bar{v}(0)N'(0)}{\bar{v}(0)N(0)} k_B a_V \delta(\Omega) \quad (4.2.1.1.9)$$

Für das freie Elektronengas erhält man die Größen

$$\left. \frac{\bar{v}'(E)N(E') + \bar{v}(E')N'(E)}{\bar{v}(0)N(0)} \right|_{E=E'=0} = \frac{2}{E_f} \quad (4.2.1.1.10)$$

$$\left. \frac{\bar{v}'(E)N(E') - \bar{v}(E')N'(E)}{\bar{v}(0)N(0)} \right|_{E=E'=0} = \frac{1}{E_f} \quad (4.2.1.1.11),$$

wenn wir $\mu = E_f$, der Fermienergie, setzen.

Für G_{SS}^1 erhält man damit

$$G_{++}^1(\Omega) = G_{--}^1(\Omega) = \frac{2}{E_f} k_B a_V \delta(\Omega) \quad (4.2.1.1.12)$$

$$G_{+-}^1(\Omega) = \frac{1}{E_f} k_B a_V \delta(\Omega) \quad (4.2.1.1.13).$$

4.2.1.2 Die Modellspektralfunktionen G_{ss}° und $G_{ss}^{\prime}$ für die Magnetische-Streuung

Als Ergebnis für die Spektralfunktionen der Magnetischen-Streuung erhielten wir in Kapitel (4.1.2.2) für $T < T_c$ und unter der Berücksichtigung der Bandaufspaltung

$$G_{ss}^{\prime}(E, E', \Omega) = \delta(\Omega) [\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2] [a_{ss}^{\prime}(E - \Delta b, E' - \Delta b) + a_{ss}^{\prime}(E + \Delta b, E' + \Delta b)] \\ + \delta(\Omega - \Delta E) \frac{1}{\hbar} \langle J_z \rangle a_{ss}^{\prime}(E + \Delta b, E' - \Delta b) + \delta(\Omega + \Delta E) \frac{1}{\hbar} \langle J_z \rangle a_{ss}^{\prime}(E - \Delta b, E' + \Delta b) \quad (4.2.1.2.1),$$

mit

$$a_{++}(E, E') = a_{--}(E, E') = k_B a_m \frac{[\bar{V}(E)N(E') + \bar{V}(E')N(E)]}{\bar{V}(0)N(0)} \quad (4.2.1.2.2)$$

$$a_{+-}(E, E') = k_B a_m \frac{[\bar{V}(E)N(E') - \bar{V}(E')N(E)]}{\bar{V}(0)N(0)} \quad (4.2.1.2.3).$$

$k_B a_m$ (Gleichung (4.1.2.2.13)) ist dabei die Stärke der Magnetischen-Streuung. Für die weitere Rechnung berücksichtigen wir nur Terme erster Ordnung in $\frac{\Delta b}{\mu}$ (Δb ..halbe Aufspaltungsenergie des Leitfähigkeitsbandes in ein Band mit Spin $\uparrow$, und eines mit Spin $\downarrow$; G_0 siehe 4.1.16).

$$\Delta b = \frac{1}{2} \langle J_z \rangle \frac{N_{\text{eff}}}{V_{\text{eff}}} G_0 \text{sign}(G_0) \quad (4.2.1.2.4)$$

Für G_{ss}° erhalten wir

$$G_{++}^{\circ}(\Omega) = G_{--}^{\circ}(\Omega) = k_B a_m (2\delta(\Omega) [\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + 2 \frac{\langle J_z \rangle}{\hbar} \delta(\Omega - \Delta E)) \quad (4.2.1.2.5)$$

$$G_{+-}^{\circ}(\Omega) = 2k_B a_m \Delta b (\bar{V}'(0)N(0) - \bar{V}(0)N'(0)) / \bar{V}(0)N(0) \frac{\langle J_z \rangle}{\hbar} \delta(\Omega - \Delta E) \quad (4.2.1.2.6),$$

und für $G_{ss}^{\prime}$

$$G_{++}^{\prime}(\Omega) = G_{--}^{\prime}(\Omega) = k_B a_m \frac{\bar{V}'(0)N(0) + \bar{V}(0)N'(0)}{\bar{V}(0)N(0)} (2\delta(\Omega) [\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle}{\hbar} \delta(\Omega - \Delta E) + \frac{\langle J_z \rangle}{\hbar} \delta(\Omega + \Delta E)) \quad (4.2.1.2.7)$$

und

$$G_{+-}^4(\Omega) = k_B a_m \frac{\bar{v}'(0)N(0) - \bar{v}(0)N'(0)}{\bar{v}(0)N(0)} [2\delta(\Omega) [\langle J_z^4 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega - \Delta E) + \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega + \Delta E)] \quad (4.2.1.2.21)$$

Für das freie Elektronengas erhält man weiter

$$G_{+-}^0(\Omega) = 2k_B a_m \frac{\Delta b}{\mu} \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega - \Delta E)$$

$$G_{++}^4(\Omega) = G_{--}^4(\Omega) = 2k_B a_m \frac{1}{\mu} (2\delta(\Omega) [\langle J_z^4 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle}{n} [\delta(\Omega - \Delta E) + \delta(\Omega + \Delta E)]) \quad (4.2.1.2.22)$$

$$G_{+-}^4(\Omega) = k_B a_m \frac{1}{\mu} (2\delta(\Omega) [\langle J_z^4 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega - \Delta E) + \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega + \Delta E)) \quad (4.2.1.2.23)$$

Als nächstes betrachten wir den Fall $T < T_C$ aber ohne Berücksichtigung der Bandaufspaltung und erhalten für G_{ss}^0 ,

$$G_{++}^0(\Omega) = G_{--}^0(\Omega) = 2k_B a_m (\delta(\Omega) [\langle J_z^4 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega - \Delta E)) \quad (4.2.1.2.24)$$

$$G_{+-}^0(\Omega) = 0 \quad (4.2.1.2.25),$$

und für G_{ss}^4 ,

$$G_{++}^4(\Omega) = G_{--}^4(\Omega) = k_B a_m \frac{\bar{v}'(0)N(0) - \bar{v}(0)N'(0)}{\bar{v}(0)N(0)} (2\delta(\Omega) [\langle J_z^4 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle}{n} [\delta(\Omega - \Delta E) + \delta(\Omega + \Delta E)]) \quad (4.2.1.2.26)$$

$$G_{+-}^4(\Omega) = k_B a_m \frac{\bar{v}'(0)N(0) - \bar{v}(0)N'(0)}{\bar{v}(0)N(0)} (2\delta(\Omega) [\langle J_z^4 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle}{n} [\delta(\Omega - \Delta E) + \delta(\Omega + \Delta E)]) \quad (4.2.1.2.27)$$

Werten wir die Größen $\bar{v}(E)$, $N(E)$, $\bar{v}'(E)$ und $N'(E)$ für das freie Elektronengas aus, so erhalten wir für G_{ss}^4 ,

$$G_{++}^4(\Omega) = G_{--}^4(\Omega) = k_B a_m \frac{2}{\mu} (2\delta(\Omega) [\langle J_z^4 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle}{n} [\delta(\Omega - \Delta E) + \delta(\Omega + \Delta E)]) \quad (4.2.1.2.28)$$

$$G_{+-}^1(\Omega) = k_B a_m \frac{1}{\mu} (2\delta(\Omega) [\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2] + \frac{\langle J_z \rangle^2}{n} [\delta(\Omega - \Delta E) + \delta(\Omega + \Delta E)]) \quad (4.2.1.2.29)$$

Für $T \gg T_c$ berechnen wir für G_{SS}^0

$$G_{++}^0(\Omega) = G_{--}^0(\Omega) = 2k_B a_m J(J+1) \delta(\Omega) \quad (4.2.1.2.30)$$

$$G_{+-}^0(\Omega) = 0 \quad (4.2.1.2.31)$$

und für G_{SS}^1

$$G_{++}^1(\Omega) = G_{--}^1(\Omega) = 2k_B a_m \frac{\bar{V}(0)N(0) + \bar{V}(0)N'(0)}{\bar{V}(0)N(0)} J(J+1) \delta(\Omega) \quad (4.2.1.2.32)$$

$$G_{+-}^1(\Omega) = 2k_B a_m \frac{\bar{V}(0)N(0) - \bar{V}(0)N'(0)}{\bar{V}(0)N(0)} J(J+1) \delta(\Omega) \quad (4.2.1.2.33)$$

Für das freie Elektronengas erhält man

$$G_{++}^1(\Omega) = G_{--}^1(\Omega) = 4k_B a_m \frac{1}{\mu} J(J+1) \delta(\Omega) \quad (4.2.1.2.34)$$

$$G_{+-}^1(\Omega) = 2k_B a_m \frac{1}{\mu} J(J+1) \delta(\Omega) \quad (4.2.1.2.35)$$

4.2.1.3 Die Modellspektralfunktionen G_{SS}^0 und G_{SS}^1 für die Phononen-Streuung

Für die Streuung der Leitungselektronen an Phononen erhielten wir in Kapitel 4.1.3 für die Spektralfunktionen $G_{SS}(E, E', \Omega)$ ($\Omega > 0$) die Gleichungen

$$G_{++}(E, E', \Omega) = \frac{1}{\beta} a (\alpha^2 \frac{4\Omega^2}{\Omega_p^2} \theta(\Omega_p - \Omega) + [\frac{\bar{V}(E)N(E') + \bar{V}(E')N(E)}{2\bar{V}(0)N(0)} - \alpha^2] \delta(\Omega - \Omega_p)) \quad (4.2.1.3.1)$$

$$G_{--}(E, E', \Omega) = \frac{1}{\beta} a ([\alpha \frac{4\Omega}{\Omega_p} - \alpha^2 \frac{4\Omega^2}{\Omega_p^2}] \theta(\Omega_p - \Omega) + [1 - 2\alpha + \alpha^2] \delta(\Omega - \Omega_p)) \quad (4.2.1.3.2)$$

$$G_{+-}(E, E', \Omega) = \frac{1}{\beta} a \frac{\bar{V}(E)N(E') - \bar{V}(E')N(E)}{2\bar{V}(0)N(0)} (\alpha \frac{2\Omega}{\Omega_p^2} \theta(\Omega_p - \Omega) + [1 - \alpha] \delta(\Omega - \Omega_p)) \quad (4.2.1.3.3)$$

Daraus ergeben sich nun die Gleichungen für G_{ss}° ,

$$G_{++}^{\circ}(\Omega) = \frac{1}{\beta} a \left(\alpha^2 \frac{4\Omega^3}{\Omega_D^3} \theta(\Omega_D - \Omega) + [1 - \alpha^2] \delta(\Omega - \Omega_D) \right) \quad (4.2.1.3.4)$$

$$G_{--}^{\circ}(\Omega) = \frac{1}{\beta} a \left(\left[\alpha \frac{4\Omega}{\Omega_D^2} - \alpha^2 \frac{4\Omega^3}{\Omega_D^3} \right] \theta(\Omega_D - \Omega) + [1 - 2\alpha + \alpha^2] \delta(\Omega - \Omega_D) \right) \quad (4.2.1.3.5)$$

$$G_{+-}^{\circ}(\Omega) = 0 \quad (4.2.1.3.6)$$

und für G_{ss}^1 ,

$$G_{++}^1(\Omega) = \frac{1}{\beta} a \frac{\bar{v}'(0)N(0) + \bar{v}(0)N'(0)}{2\bar{v}(0)N(0)} \left(\delta(\Omega - \Omega_D) + \delta(\Omega + \Omega_D) \right) \quad (4.2.1.3.7)$$

$$G_{--}^1(\Omega) = 0 \quad (4.2.1.3.8)$$

$$G_{+-}^1(\Omega) = \frac{1}{\beta} a \frac{\bar{v}'(0)N(0) - \bar{v}(0)N'(0)}{2\bar{v}(0)N(0)} \left(\alpha \frac{2\Omega}{\Omega_D^2} \theta(\Omega_D - \Omega) + [1 - \alpha] \delta(\Omega - \Omega_D) \right) \quad (\Omega > 0) \quad (4.2.1.3.9)$$

$$G_{+-}^1(\Omega) = \frac{1}{\beta} a \frac{\bar{v}'(0)N(0) - \bar{v}(0)N'(0)}{2\bar{v}(0)N(0)} \left(-\alpha \frac{2\Omega}{\Omega_D^2} \theta(\Omega_D + \Omega) + [1 - \alpha] \delta(\Omega + \Omega_D) \right) \quad (\Omega < 0) \quad (4.2.1.3.10).$$

Für das freie Elektronengas erhält man weiter

$$G_{++}^1(\Omega) = \frac{1}{\beta} a \frac{1}{\mu} \left(\delta(\Omega - \Omega_D) + \delta(\Omega + \Omega_D) \right) \quad (4.2.1.3.11)$$

$$G_{+-}^1(\Omega) = \frac{1}{\beta} a \frac{1}{2\mu} \left(\alpha \frac{2\Omega}{\Omega_D^2} \theta(\Omega_D - \Omega) + [1 - \alpha] \delta(\Omega - \Omega_D) \right) \quad (\Omega > 0) \quad (4.2.1.3.12)$$

$$G_{+-}^1(\Omega) = \frac{1}{\beta} a \frac{1}{2\mu} \left(-\alpha \frac{2\Omega}{\Omega_D^2} \theta(\Omega_D + \Omega) + [1 - \alpha] \delta(\Omega + \Omega_D) \right) \quad (\Omega < 0) \quad (4.2.1.3.13).$$

4.2.2 Berechnen der Modellspektralfunktionen

Wir haben im vorangegangenen Kapitel die Modellspektralfunktionen $G_{ss}^{\circ}(\Omega)$ und $G_{ss}^{\prime}(\Omega)$ für die Potential-, die Magnetische- und die Phononen-Streuung erhalten, die wir zur Berechnung des Matrixelementes des Stoßoperators benötigen. Ausgehend von diesen Gleichungen ist es nun erforderlich, $G_{ss}^{\circ}(\Omega)$ und $G_{ss}^{\prime}(\Omega)$ in der Form

$$G(\Omega) = \begin{array}{|c|} \hline \Omega | G(\Omega) \\ \hline \vdots \\ \hline \end{array} + \sum_j b_j \delta(\Omega - \Omega_j) \quad (4.2.2.1)$$

für jede Temperatur, für die man die Transportkoeffizienten berechnen will, verfügbar zu haben und die Daten an die Unterprogramme der Programmpakete AS und TC weiterzureichen.

Um die Modellspektralfunktionen zu erzeugen, benötigen wir das Programmpaket CMS, das die Funktionen G_{ss}° und $G_{ss}^{\prime}$ (6 Stück) in der gewünschten Form (4.2.2.1) für die Potential-, die Magnetische- und die Phononen-Streuung berechnet, und für die angeforderten Temperaturen sequentiell auf eine für jede Wechselwirkung bereitgestellte Datei schreibt.

In Abbildung 4.2.2.1 ist das Flußdiagramm zur Veranschaulichung des Arbeitsablaufes im Programmpaket CMS dargestellt. Außerdem enthält Abbildung 4.2.2.2 ein Diagramm, das den Aufbau, die Struktur und die Funktion der Haupt- und Unterprogramme des Programmpaketes CMS darlegen soll.

Im Anhang (A.3) befinden sich zur detaillierteren Beschreibung die Flußdiagramme und Programmlisten aller in CMS verwendeten Haupt- und Unterprogramme.

Wie die oben erwähnten Dateien, die für eine Wechselwirkung die Spektralfunktionen für die bei der Berechnung gewünschten Temperaturen enthalten, formatiert und aufgebaut sein müssen, damit sie vom Hauptprogramm COTRACO, das in Kapitel 6.1 behandelt wird, richtig verarbeitet werden, zeigt Abbildung 4.2.2.3. In Tabelle 4.2.2.1 ist zur Veranschaulichung die Datei, die die Spektralfunktionen der Phononen-Streuung bei 20 K enthält, dargestellt.

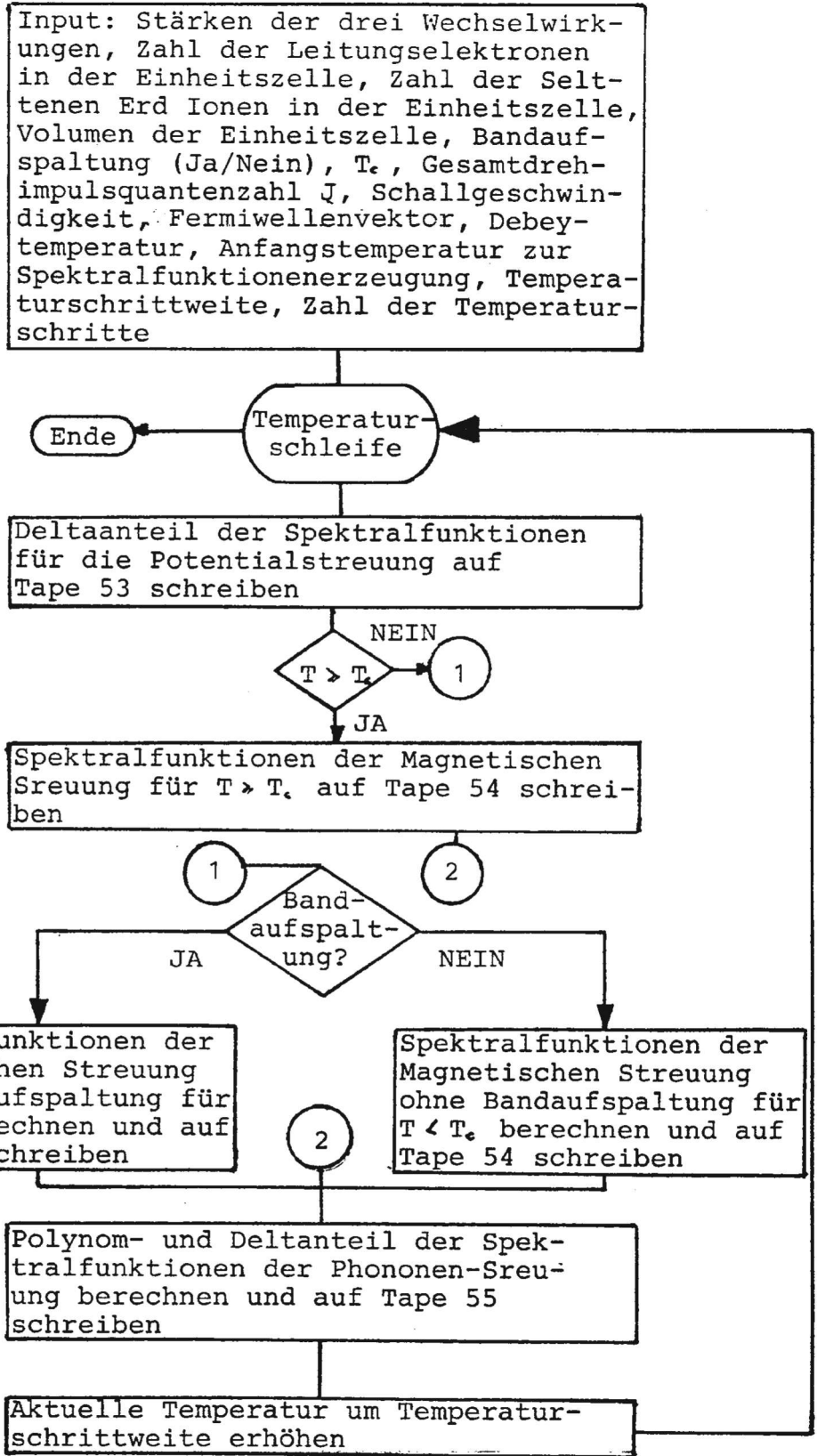


Abbildung 4.2.2.1:

Flußdiagramm für das Programmpaket CMS

CMSFILE:
 Input: Absolute Stärke der Wechselwirkungen, Zahl der Leitungselektronen in der Einheitszelle, Zahl der Seltenen Erd Ionen in der Einheitszelle, Volumen der Einheitszelle, Bandaufspaltung (Ja/Nein), T_c , Gesamtdrehimpulsquantenzahl J , Schallgeschwindigkeit, Fermiwellenvektor, Debeytemperatur, Anfangstemperatur, Temperaturschrittweite, Zahl der Temperaturschritte zur Spektralfunktionenerzeugung
 Zweck: Berechnen der Modellspektralfunktionen und Ablegen der Daten auf die Tapes 53-55

CMSEXPJ:
 Berechnen der Thermodynamischen Erwartungswerte $\langle J_z^2 \rangle$, $\langle J_z \rangle$, sowie der Energieaufspaltung ΔE im Molekularfeld

CMSREFA:
 Nullstellensuche mit Hilfe der Regula Falsi

CMSMAGN:
 Berechnet die Funktion

$$F(x, J, T, T_c) = x - \frac{1}{2} \left(2J+1 \cosh \left(\frac{2J+1}{2J} \frac{T_c}{T} \right) - \cosh \left(\frac{x}{2J} \frac{T_c}{T} \right) \right)$$

Abbildung 4.2.2.2 :
 Struktur, Aufbau und Funktion der Unterprogramme für das Programmpaket CMS

 bedeutet: Programmeinheit A ruft Programmeinheit B auf.

Art der Wechselwirkung (60C.)
Absolute Stärke der Wechselwirkung (60 Character)
Modellparameter für die Spektralfunktionen (60 Character)
Temperaturkontrollparameter: Anfangstemperatur, Temperaturschrittweite, Zahl der Temperaturschritte
Definitionsbereich der Spektralfunktionen

Für jede Temperatur:

Tabellen der Spektralfunktionen

[Zahl der Tabellenwertepaare der Spektralfunktion] 6

$[x_1^j, y_1^j], [x_2^j, y_2^j], \dots$

$[x_1^6, y_1^6], [x_2^6, y_2^6], \dots$

Deltafunktionen der Spektralfunktionen

[Zahl der Deltafunktionen der Spektralfunktion] 6
--

$[v_1^j, w_1^j], [v_2^j, w_2^j], \dots$

$[v_1^6, w_1^6], [v_2^6, w_2^6], \dots$

$[x_i^j, y_i^j]$... i-tes Wertepaar der j-ten Spektralfunktion

$[v_i^j, w_i^j]$... x-Koordinate, Amplitude der i-ten Deltafunktion der j-ten Spektralfunktion

Abbildung 4.2.2.3: Die Formatierung der Dateien, auf denen die die Daten für die Spektralfunktionen einer Wechselwirkung für die angeforderten Temperaturen stehen

PHENOMEN STREUUNG

ABSOLUTE STAERKE: $\text{RHO}(T=\text{TDEBEY})=90.$ [MIKROOHM*CM]

VSDUND=1.,QFERMI=125,WDEBEY=250,FERMIENERGIE=1.E5 [K]

.200E+02 .200E+02 1

.250E+03

16 16 16 31 31 31

0.	0.	.166667E+02	.146546E+02
.333333E+02	.289166E+02	.500000E+02	.423936E+02
.666667E+02	.546930E+02	.833333E+02	.654222E+02
.100000E+03	.741886E+02	.116667E+03	.806002E+02
.133333E+03	.842638E+02	.150000E+03	.847672E+02
.166667E+03	.617778E+02	.183333E+03	.748430E+02
.200000E+03	.635904E+02	.216667E+03	.476274E+02
.233333E+03	.265614E+02	.250000E+03	-.181899E-11

0.	0.	.166667E+02	0.
.333333E+02	0.	.500000E+02	0.
.666667E+02	0.	.833333E+02	0.
.100000E+03	0.	.116667E+03	0.
.133333E+03	0.	.150000E+03	0.
.166667E+03	0.	.183333E+03	0.
.200000E+03	0.	.216667E+03	0.
.233333E+03	0.	.250000E+03	0.

0.	0.	.166667E+02	.654222E-01
.333333E+02	.523378E+00	.500000E+02	.176640E+01
.666667E+02	.418702E+01	.833333E+02	.817776E+01
.100000E+03	.141312E+02	.116667E+03	.224396E+02
.133333E+03	.334962E+02	.150000E+03	.476926E+02
.166667E+03	.654222E+02	.183333E+03	.870770E+02
.200000E+03	.113050E+03	.216667E+03	.143733E+03
.233333E+03	.179519E+03	.250000E+03	.220800E+03

-.250000E+03	0.	-.233333E+03	0.
-.216667E+03	0.	-.200000E+03	0.
-.183333E+03	0.	-.166667E+03	0.
-.150000E+03	0.	-.133333E+03	0.
-.116667E+03	0.	-.100000E+03	0.
-.833333E+02	0.	-.666667E+02	0.
-.500000E+02	0.	-.333333E+02	0.
-.166667E+02	0.	.193268E-11	0.
.166667E+02	0.	.333333E+02	0.
.500000E+02	0.	.666667E+02	0.
.833333E+02	0.	.100000E+03	0.
.116667E+03	0.	.133333E+03	0.
.150000E+03	0.	.166667E+03	0.
.183333E+03	0.	.200000E+03	0.
.216667E+03	0.	.233333E+03	0.
.250000E+03	0.		

-.250000E+03	.474805E-03	-.233333E+03	.443151E-03
-.216667E+03	.411498E-03	-.200000E+03	.379844E-03
-.183333E+03	.348190E-03	-.166667E+03	.316537E-03
-.150000E+03	.284883E-03	-.133333E+03	.253229E-03
-.116667E+03	.221576E-03	-.100000E+03	.189922E-03
-.833333E+02	.158268E-03	-.666667E+02	.126615E-03
-.500000E+02	.949610E-04	-.333333E+02	.633073E-04
-.166667E+02	.316537E-04	.193268E-11	.367058E-17
.166667E+02	.316537E-04	.333333E+02	.633073E-04
.500000E+02	.949610E-04	.666667E+02	.126615E-03
.833333E+02	.158268E-03	.100000E+03	.189922E-03
.116667E+03	.221576E-03	.133333E+03	.253229E-03
.150000E+03	.284883E-03	.166667E+03	.316537E-03
.183333E+03	.348190E-03	.200000E+03	.379844E-03
.216667E+03	.411498E-03	.233333E+03	.443151E-03
.250000E+03	.474805E-03		

-.250000E+03	0.	-.233333E+03	0.
-.216667E+03	0.	-.200000E+03	0.
-.183333E+03	0.	-.166667E+03	0.
-.150000E+03	0.	-.133333E+03	0.
-.116667E+03	0.	-.100000E+03	0.
-.833333E+02	0.	-.666667E+02	0.
-.500000E+02	0.	-.333333E+02	0.
-.166667E+02	0.	.193268E-11	0.
.166667E+02	0.	.333333E+02	0.
.500000E+02	0.	.666667E+02	0.
.833333E+02	0.	.100000E+03	0.
.116667E+03	0.	.133333E+03	0.
.150000E+03	0.	.166667E+03	0.
.183333E+03	0.	.200000E+03	0.
.216667E+03	0.	.233333E+03	0.
.250000E+03	0.		

1 0 1 0 2 2

.250000E+03	0.		
.250000E+03	0.		
.250000E+03	0.	-.250000E+03	0.
.250000E+03	.118701E+00	-.250000E+03	.118701E+00

Tabelle 4.2.2.1: Datei, die die Spektralfunktionen der Phononen-Streuung enthält. Dateikopf - Tabellen der 6 Spektralfunktionen $G_{-}^0, \dots, G_{++}^1$ bei 20 K - Deltafunktionen (X-Koordinate der Singularität, Amplitude der Deltafunktion) der Spektralfunktionen $G_{-}^0, \dots, G_{++}^1$ bei 20 K

5. Die Transportkoeffizienten in niedrigster Ordnung

Nachdem wir in den Kapiteln 3 und 4 die Berechnung der Transportkoeffizienten ausgehend von den Modell-Hamiltonoperatoren erläutert haben, werden wir nun für die niedrigste Ordnung im Variationsverfahren Gleichungen für den elektrischen Widerstand, den Wärmewiderstand und den Seebeckkoeffizienten bei Vorhandensein einzelner Streumechanismen erhalten.

Wir gehen dazu von den Gleichungen (3.3.2)-(3.3.4) aus und haben dabei die Summen

$$\sum_{\alpha} \tilde{z}_{\alpha} c_{\alpha\alpha}^{-1} \tilde{z}_{\alpha} \quad (5.1)$$

$$\sum_{\alpha} \hat{z}_{\alpha} c_{\alpha\alpha}^{-1} \tilde{z}_{\alpha} \quad (5.2)$$

und $\sum_{\alpha} \hat{z}_{\alpha} c_{\alpha\alpha}^{-1} \hat{z}_{\alpha} \quad (5.3)$

auszuwerten. Dabei hat man zu beachten, daß die in (5.1)-(5.3) enthaltenen Größen von verschiedener Größenordnung sind. Bei den vorkommenden Summen sind $\tilde{z}_0, \tilde{z}_1, \hat{z}_1, c_{00}$ und c_{11} Größen der Ordnung $(k_B T / \mu)^0$, hingegen $\hat{z}_0, \tilde{z}_1, c_{10}$ und c_{01} von der Ordnung $(k_B T / \mu)^1$. Wegen

$$(k_B T / \mu) \ll 1 \quad (5.4)$$

für T ungefähr bei Raumtemperatur, werden wir bei den weiteren Rechnungen dieses Kapitels Terme der Ordnung $(k_B T / \mu)^2$ vernachlässigen. So ergibt sich für den zweidimensionalen Unter-
raum die inverse Matrix des Stoßoperators als

$$c^{-1} = \frac{1}{c_{00} c_{11} - c_{01} c_{10}} \begin{pmatrix} c_{11} & -c_{01} \\ -c_{10} & c_{00} \end{pmatrix} \cong \frac{1}{c_{00} c_{11}} \begin{pmatrix} c_{11} & -c_{01} \\ -c_{10} & c_{00} \end{pmatrix}$$

(5.5).

Im weiteren erhalten wir für die in (5.1)-(5.3) angegebenen Summen:

$$\sum_{\alpha\alpha'} \tilde{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \tilde{g}_{\alpha'} \cong \frac{1}{\mathcal{C}_{00} \mathcal{C}_{11}} \tilde{g}_0 \mathcal{C}_{11} \tilde{g}_0 \quad (5.6)$$

$$\sum_{\alpha\alpha'} \hat{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \tilde{g}_{\alpha'} \cong \frac{1}{\mathcal{C}_{00} \mathcal{C}_{11}} \{ \tilde{g}_0 \mathcal{C}_{11} \tilde{g}_1 - \tilde{g}_0 \mathcal{C}_{01} \tilde{g}_2 + \tilde{g}_1 \mathcal{C}_{00} \tilde{g}_1 \} \quad (5.7)$$

$$\sum_{\alpha\alpha'} \hat{g}_\alpha \mathcal{C}_{\alpha\alpha'}^{-1} \hat{g}_{\alpha'} \cong \frac{1}{\mathcal{C}_{00} \mathcal{C}_{11}} \tilde{g}_2 \mathcal{C}_{00} \tilde{g}_2 \quad (5.8),$$

wobei die Summation über $\alpha, \alpha' = 0, 1$ durchgeführt wurde.

Außerdem wurde

$$\hat{g}_\alpha = \tilde{g}_{\alpha+1} \quad (5.9)$$

verwendet. Mit (3.3.2.2) und unter Beachtung von $T/\mu \ll 1$

$$\tilde{g}_0 = \bar{v}(0) = \bar{v}_0 \quad (5.10)$$

$$\tilde{g}_1 = \frac{1}{\beta} \bar{v}'(0) I_2 = \frac{1}{\beta} \bar{v}_0' I_2 \quad (5.11)$$

$$\tilde{g}_2 = \bar{v}(0) I_2 \quad (5.12)$$

und (5.6)-(5.8) erhält man für den elektrischen Widerstand

$$\rho = \frac{1}{4(2\pi)^2} \frac{m \cdot k_B}{e^2 \hbar n \cdot \bar{v}_0^2} T \cdot \mathcal{C}_{00} \quad (5.13)$$

mit

$$\mathcal{C}_{00} = 4 \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\beta\omega/2} - 1)(1 - e^{-\beta\omega})} G_{++}^0(\omega) \quad (5.14).$$

Der Wärmewiderstand ergibt sich zu

$$W = \frac{1}{4(2\pi)^2} \frac{m}{k_B \hbar n} \left(\frac{1}{4n(2) \bar{v}_0} \right)^2 \cdot \mathcal{C}_{11} \quad (5.15)$$

mit

$$\mathcal{C}_{11} = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\beta\omega/2} - 1)(1 - e^{-\beta\omega})} \left\{ 16n(2) G_{++}^0(\omega) + \frac{G_{++}^0(\omega) + 3G_{--}^0(\omega)}{3} \omega \right\} \quad (5.16).$$

Schließlich erhält man für den Seebeckkoeffizienten

$$S = - \frac{k_B}{e} \frac{4n(2)}{\mathcal{C}_{11}} \left[\frac{\bar{v}_0'}{\beta \bar{v}_0} [\mathcal{C}_{11} + 4n(2)\mathcal{C}_{00}] \cdot \mathcal{C}_{10} \right] \quad (5.17)$$

mit

$$\mathcal{C}_{10} = 2 \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3}{(e^{\beta\omega/2} - 1)(1 - e^{-\beta\omega})} G_{++}^0(\omega) + \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\omega^2}{(e^{\beta\omega/2} - 1)(1 - e^{-\beta\omega})} \left\{ [16n(2) + \frac{\omega^2}{3}] \frac{1}{\beta} G_{++}^0(\omega) + \omega \frac{1}{\beta} G_{--}^0(\omega) \right\} \quad (5.18)$$

Wir wollen nun (5.13)-(5.18) dazu verwenden, unmittelbar auswertbare Gleichungen für die Transportkoeffizienten bei Vorhandensein einzelner Streumechanismen zu erhalten.

5.1 Die Transportkoeffizienten für die Potential-Streuung

Verwenden wir nun die Gleichungen (5.13)-(5.18) und (4.2.1.1.6)-(4.2.1.1.9), so erhalten wir für die Transportkoeffizienten in niedrigster Ordnung

$$\rho = (1.1771 \text{ E-}5) \frac{1}{\bar{v}_0^2} \frac{a_v}{[K]} [\mu\Omega \cdot \text{cm}] \quad (5.1.1)$$

$$W = (4.8163 \text{ E-}7) \frac{1}{\bar{v}_0^2} \frac{a_v}{[K]} \frac{[K]}{T} \frac{[\text{cm} \cdot \text{K}]}{[\text{mW}]} \quad (5.1.2)$$

$$S = (-2.8355 \text{ E+}2) \left[\frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} - \frac{N_0'}{N_0} \right] [K] \frac{T}{[K]} [\mu\text{V/K}] \quad (5.13)$$

mit $\bar{v}_0 = \bar{v}(0)$ (entsprechendes gilt auch für $\bar{v}_0'$, N_0 und N_0'), und a_v , der Stärke der Potentialstreuung in [K].

Für die Potential-Streuung stellen die Gleichungen (5.1.1)-(5.1.3) bereits die Werte der Transportkoeffizienten dar, die man in jeder höheren Ordnung des Variationsverfahrens auch erhalten würde. Man sieht, daß der elektrische Widerstand konstant bezüglich der Temperatur ist, der Wärmewiderstand ein $1/T$ - und der Seebeckkoeffizient ein lineares Verhalten in T zeigen. Wie aus (5.1.1) und (5.1.2) ersichtlich, ist das Wiedemann-Franz-Gesetz in der Form

$$\frac{\rho}{W} = 4\eta (2) \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T \quad (5.1.4)$$

gültig.

5.2 Die Transportkoeffizienten für die Magnetische-Streuung

In ähnlicher Weise wie bei der Potential-Streuung werden wir nun (5.13)-(5.18) sowie die Spektralfunktionen aus (4.2.1.2) benutzen, um ρ , W und S für die Magnetische Streuung in niedrigster Ordnung auszuwerten. Zuerst definieren wir aber

noch zwei Funktionen, die im weiteren wichtig sein werden:

$$R_J^0(T/T_c) = \frac{1}{J(J+1)} \left[\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2 + \frac{n^2}{\sinh^2 n} \langle J_z \rangle \right] \quad (5.2.1)$$

und

$$R_J^2(T/T_c) = \frac{1}{J(J+1)} \frac{1}{3n(2)} n^2 \frac{\langle J_z \rangle}{n} \frac{n^2}{\sinh^2 n} \quad (5.2.2).$$

Für die Transportkoeffizienten erhalten wir für $T < T_c$:

$$\rho = (2.3541 \text{ E-}5) \frac{1}{V_0} \frac{a_m}{[K]} J(J+1) R_J^0(T/T_c) [\mu\Omega \cdot \text{cm}] \quad (5.2.3)$$

$$W = (9.6326 \text{ E-}7) \frac{1}{V_0} \frac{a_m}{[K]} \frac{[K]}{T} J(J+1) (R_J^0(T/T_c) + R_J^2(T/T_c)) \cdot [\text{cm} \cdot \text{K/mW}] \quad (5.2.4)$$

a_m ist die Stärke der Magnetischen Streuung in [K].

Berücksichtigt man, daß es durch die Wechselwirkung der Leitungselektronen mit den magnetischen Seltenen Erd Ionen zur Aufspaltung des Leitfähigkeitsbandes kommt, und daß diese Aufspaltung Δb im allgemeinen klein gegenüber der Fermienergie ist, so erhält man für ρ und W bei Berücksichtigung der Aufspaltung bis zu Termen $(\Delta b/\mu)$ das selbe Ergebnis wie ohne Aufspaltung (Das Leitfähigkeitsband spaltet in ein Band mit Spin $\uparrow$ und in eines mit Spin $\downarrow$ auf). Für den Seebeckkoeffizienten ist dies hingegen nicht der Fall. Es ergibt sich ohne Aufspaltung

$$S = (-2.8355 \text{ E+}2) \frac{T}{[K]} [K] \left(\frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} \frac{R_J^0}{R_J^0 + R_J^2} - \frac{N_0'}{N_0} \frac{R_J^0 - \frac{1}{2} R_J^2}{R_J^0 + R_J^2} \right) [\mu\text{V/K}] \quad (5.2.5)$$

hingegen mit Berücksichtigung der Aufspaltung bis zu Termen $(\Delta b/\mu)$

$$S = (-2.8355 \text{ E+}2) \frac{T}{[K]} [K] \left(\left[\frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} - \frac{N_0'}{N_0} \right] \frac{R_J^0}{R_J^0 + R_J^2} + \left[\frac{1}{2} \frac{N_0'}{N_0} - \frac{3}{4} \frac{\Delta b}{\mu} \left[\frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} - \frac{N_0'}{N_0} \right] \right] \frac{R_J^2}{R_J^0 + R_J^2} \right) [\mu\text{V/K}] \quad (5.2.6).$$

Der vierte Term in (5.2.6) enthält dabei das Verhältnis der Stärken H_{sf} zu H_{ff} also der Elektron - Seltenen Erd Ion zur Seltenen Erd Ion - Seltenen Erd Ion Wechselwirkungsstärke, und bewirkt die Änderung des Temperaturverlaufes von S gegenüber (5.2.5).

Die Temperaturabhängigkeit von ρ , W und S ist dabei durch die Funktionen R_J^0 und R_J^2 , die nur von dem Verhältnis T/T_c abhängen, bestimmt. Sie sind in Abbildung 5.2.1 für die J Werte $1/2$, $3/2$, $7/2$ dargestellt.

Für $T \gg T_c$ sind wie auch schon bei der Potential-Streuung die Spektralfunktionen von der Temperatur unabhängig. Man erhält dabei

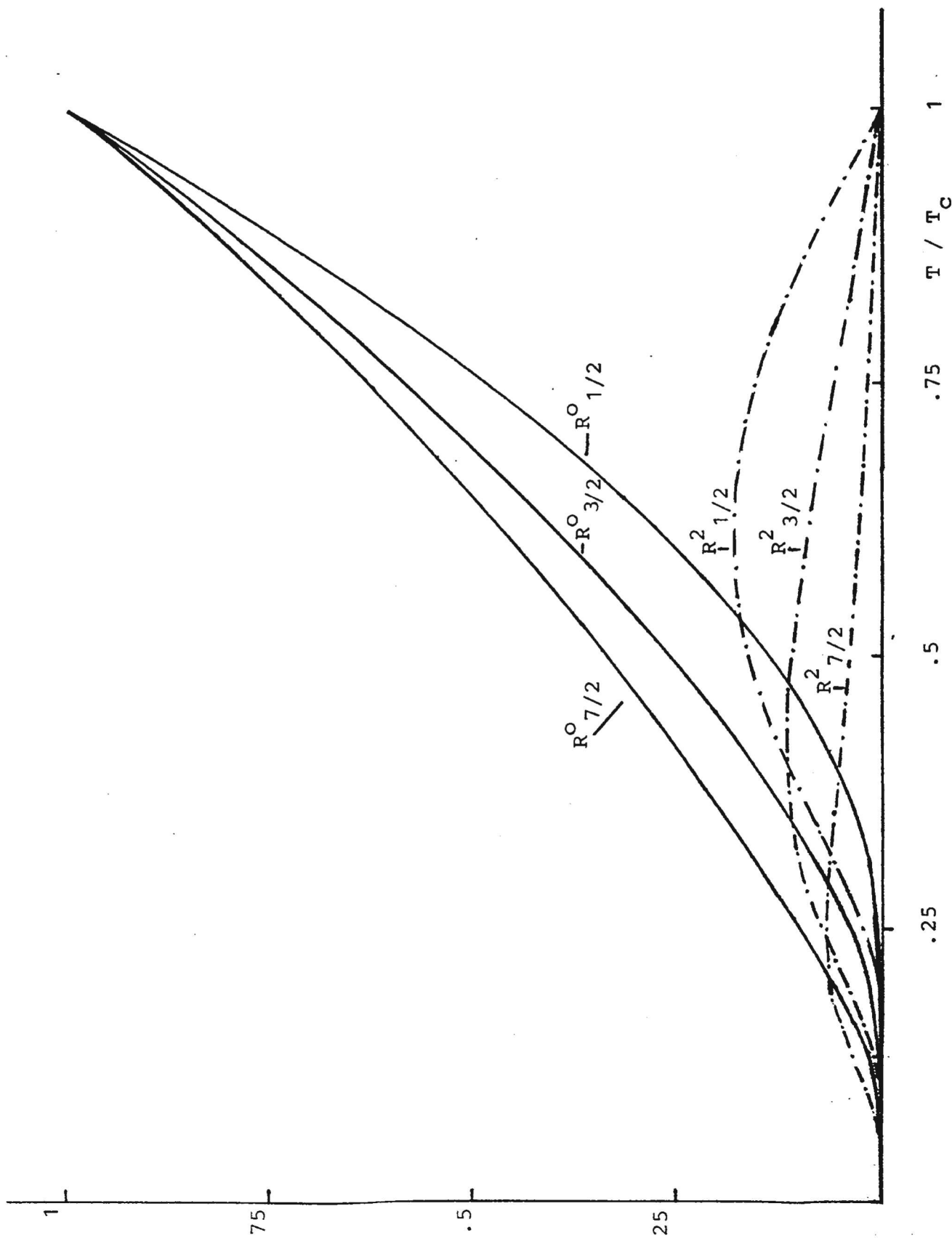
$$\rho = (2.3541 \text{ E-5}) \frac{1}{\bar{v}_0} \frac{a_m}{[K]} J(J+1) [\mu\Omega \cdot \text{cm}] \quad (5.2.7)$$

$$W = (9.6326 \text{ E-7}) \frac{1}{\bar{v}_0} \frac{a_m}{[K]} \frac{[K]}{T} J(J+1) \frac{[\text{cm} \cdot \text{K}]}{[\text{mV}]} \quad (5.2.8)$$

$$S = (-2.8355 \text{ E+2}) [K] \left[\frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} - \frac{N_0'}{N_0} \right] \frac{T}{[K]} [\mu\text{V/K}] \quad (5.2.9).$$

Abbildung 5.2.1 : Die Funktionen R_J^O und R_J^2 für $J = 1/2, 3/2$ und $7/2$

— R_J^O , - - - R_J^2



5.3 Die Transportkoeffizienten für die Phononen-Streuung

Um Gleichungen für die Transportkoeffizienten bei der Phononen-Streuung zu erhalten, gehen wir von den Spektralfunktionen des Kapitels (4.2.1.3) aus und erhalten für $\alpha = \frac{1}{4} (q_D / k_F)^2 = 1$

$$\rho = (4.7083 \text{ E-5}) \frac{1}{\bar{v}_0} a \frac{T}{[K]} \frac{1}{\omega_D^3} J_5(\omega_D) \quad [\mu\Omega \cdot \text{cm}] \quad (5.3.1)$$

$$W = (4.8163 \text{ E-7}) \frac{1}{\bar{v}_0} a \left(\left[1 + \frac{\omega_D^2}{16\eta(2)} \right] 4 \frac{1}{\omega_D^3} J_5(\omega_D) - \frac{1}{6\eta(2)} \frac{1}{\omega_D^4} J_7(\omega_D) \right) \quad \begin{matrix} [\text{cm} \cdot \text{K}] \\ [\text{mW}] \end{matrix} \quad (5.32)$$

sowie für S

$$S = (-2.8355 \text{ E+2}) \frac{T}{[K]} \quad [\mu\text{V/K}] \cdot \frac{\frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} \left[\left(2 + \frac{\omega_D^2}{16\eta(2)} \right) \frac{4}{\omega_D^3} J_5(\omega_D) - \frac{8}{3 \cdot 16\eta(2)} \frac{1}{\omega_D^4} J_7(\omega_D) \right] - \left[\frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} - \frac{N_b'}{N_b} \right] \left[1 + \frac{\omega_D^2}{3 \cdot 16\eta(2)} \right] \left[\frac{\omega_D/2}{\sinh(\omega_D/2)} \right]^2 - \frac{1}{16\eta(2)} \left[\frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} - \frac{N_b'}{N_b} \right] \frac{2}{\omega_D^5} J_5(\omega_D)}{\left(1 + \frac{\omega_D^2}{16\eta(2)} \right) \frac{4}{\omega_D^3} J_5(\omega_D) - \frac{8}{3 \cdot 16\eta(2)} \frac{1}{\omega_D^4} J_7(\omega_D)} \quad (5.3.3).$$

Dabei gilt für $J_n(x)$

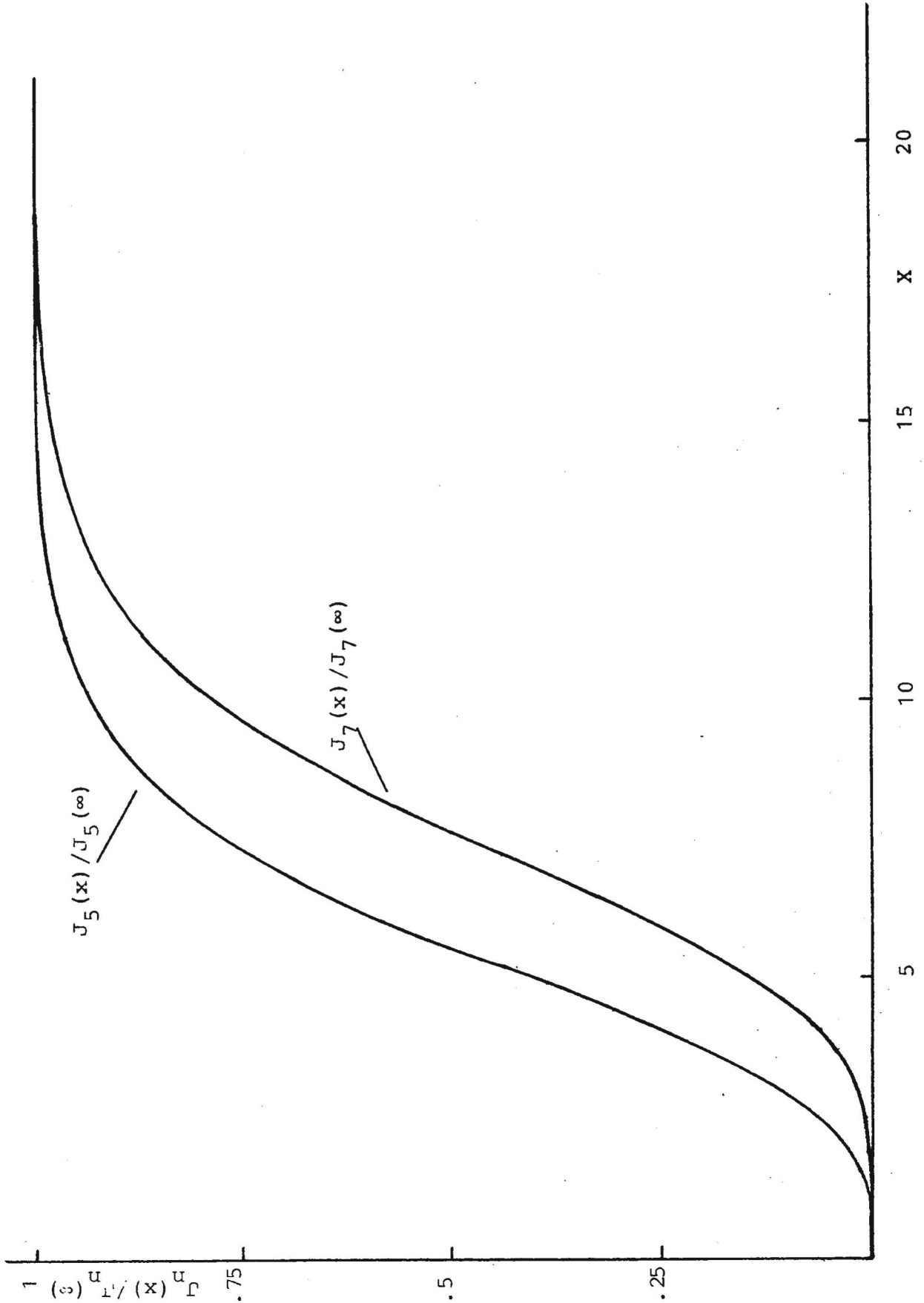
$$J_n(x) = \int_0^x \frac{\omega^n}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} d\omega \quad n \geq 2 \quad (5.3.4).$$

In allen drei Koeffizienten ist die Temperaturabhängigkeit in der Größe ω_D enthalten. Für den elektrischen Widerstand erhält man bei tiefen Temperaturen ein T^5 -Gesetz (für große Argumente ist die Funktion $J_n(x)$ als konstant anzunehmen) - für hohe Temperaturen ein lineares Verhalten in T (für kleine Argumente geht $J_n(x)$ wie $\frac{x^{n-1}}{n-1}$).

Für den Wärmewiderstand erhält man für tiefe Temperaturen zunächst ein T^2 -Verhalten - für hohe Temperaturen verhält sich W temperaturunabhängig.

In Abbildung (5.3.1) sind die Funktionen $J_5(x)$ und $J_7(x)$ dargestellt.

Abbildung 5.3.1 : Die Funktionen $J_5(x)/J_5(\infty)$, $J_7(x)/J_7(\infty)$



6. Durchführung der Rechnung und Ergebnisse für $GdAl_2$

6.1 Durchführung der Rechnung

Bevor wir uns mit den Ergebnissen der mit den erstellten Programmen durchgeführten Rechnungen befassen, soll noch einmal auf die dazu notwendigen Programme und den Rechenablauf eingegangen werden. In diesem Zusammenhang sei auf Kapitel 3 verwiesen, das im Abschnitt 3.3 eine Übersicht über die Programmpakete AS und TC gibt, die zur Berechnung der Transportkoeffizienten dienen. In Kapitel 4 Abschnitt 4.2 wurde das Programmpaket CMS, das die Berechnung der Spektralfunktionen ausgehend von den Modell-Hamiltonoperatoren ermöglicht, behandelt.

Hier wollen wir uns kurz mit dem strukturellen Aufbau der Software, die für die Rechnung notwendig ist, sowie mit den Datenträgern der Ein- und Ausgabe befassen.

Das Hauptprogramm COTRACO, dessen Flußdiagramm und Programmliste sich im Anhang (A.2.1.1) befinden, bedient die Programmpakete AS und TC und ermöglicht den Datentransfer von n Dateien, die jeweils 6 Spektralfunktionen einer Wechselwirkung für die angeforderten Temperaturen enthalten, zu AS und TC. Wie nun die Erzeugung der Dateien, auf denen die Spektralfunktionen stehen, vor sich gegangen ist, ist belanglos, solange die Formatierung der Dateien mit den Angaben aus Kapitel 4 übereinstimmen.

In Abbildung 6.1.1 sind für den Fall von 3 Wechselwirkungen der gesamte Aufbau für die Berechnung der Transportkoeffizienten sowie alle bei der Berechnung verwendeten Datenträger dargestellt:

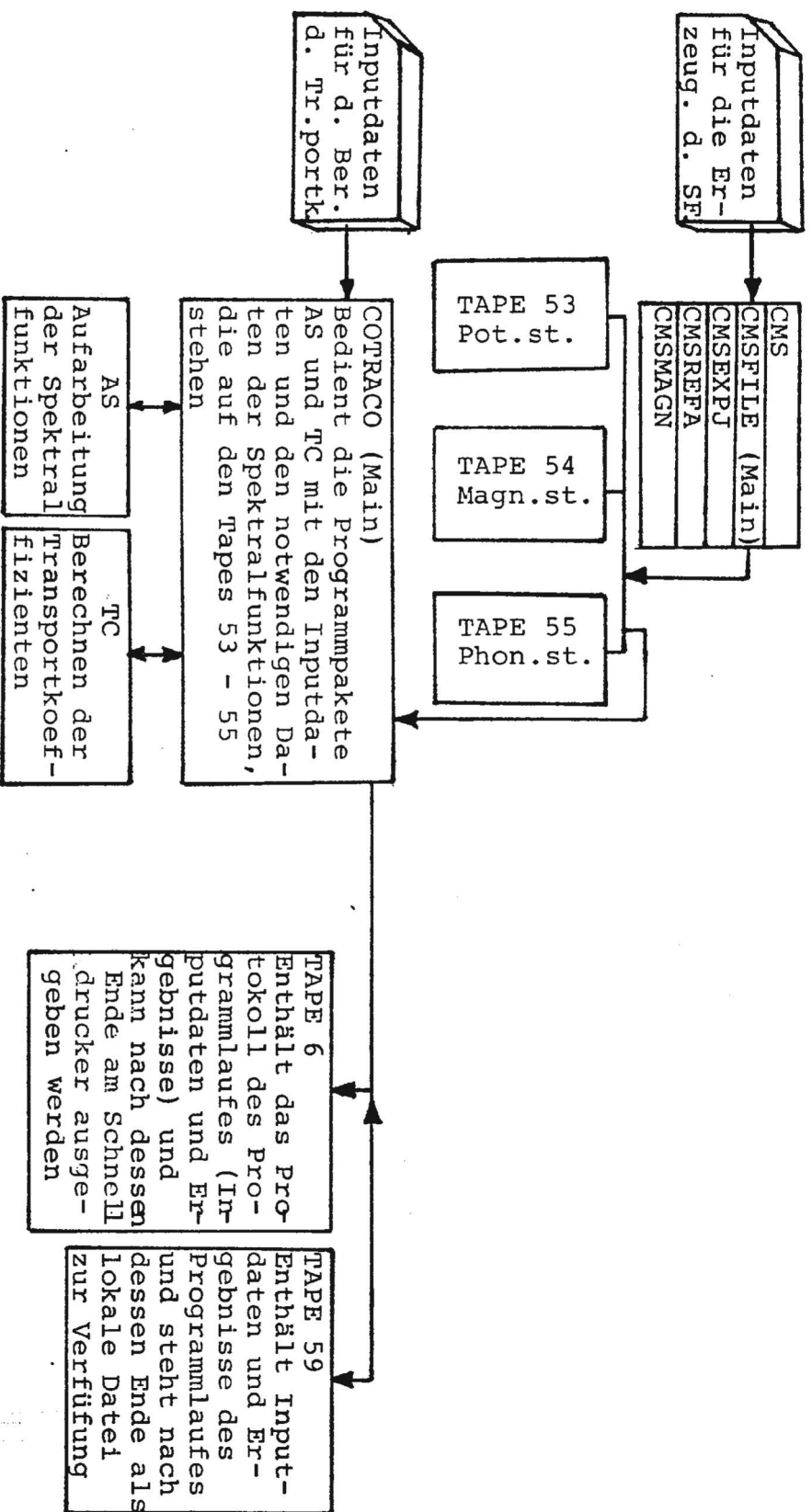


Abbildung 6.1.1 :

Aufbau, Datenträger und Datenfluß bei der Berechnung der Transportkoeffizienten
 ρ , w und s für 3 Streumechanismen (Potential-, Magnetische und Phononen Streuung)

Auf den Dateien TAPE n stehen die benötigten Spektralfunktionen - in diesem Fall werden sie vom Programmpaket CMS erstellt. Das Hauptprogramm COTRACO holt die Daten von den Dateien (TAPE n) und stellt sie den Programmpaketen AS und TC zur Verfügung. Für jede Temperatur werden alle erhaltenen Transportkoeffizienten auf die Ergebnisdatei TAPE 59 und auf TAPE 6, die Datei, die nach jedem Programmdurchlauf am Zentraldrucker ausgedruckt werden kann, geschrieben.

In Abbildung 6.1.2 ist die Formatierung der Ergebnisdatei (TAPE 59) angegeben.

Bei sämtlichen Dateien handelt es sich um sequentiell beschriebene Fortran Dateien.

Abbildung 6.1.2 :

Die Formatierung der Ergebnisdatei TAPE 59

Datum, Uhrzeit, Text (Bemerkung zum aktuellen Programmablauf)

Zahl der Wechselwirkungen, Stärken der Wechselwirkungen, $v(0)$, $\bar{v}(0)$, Grad der Polynome, Stützstellenabstand für die numerische Integration, Anfangstemperatur, Temperaturschrittweite, Zahl der Temperaturschritte, Dimension des Funktionsraumes

Für jede Wechselwirkung:

Art der Wechselwirkung (60 Character)

Absolute Stärke der Wechselwirkung (60 Character)

Modellparameter der Spektralfunktionen (60 Character)

Für jede Temperatur:

Elektrischer Widerstand*IDIM, Seebeckkoeffizient*IDIM, Wärmeleitfähigkeit*IDIM
--

IDIM. . . Dimension des Funktionsraumes

6.2 Ergebnisse der Transportkoeffizienten für die intermetallische Verbindung GdAl_2

GdAl_2 besitzt eine MgCu_2 (C 15) - Struktur. Eine Einheitszelle ist dabei in Abbildung 6.2.1 dargestellt/11/.

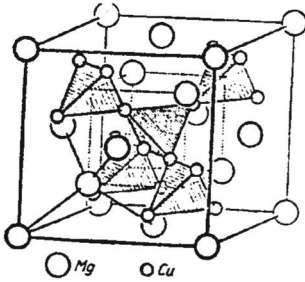


Abbildung 6.2.1: Der MgCu_2 Typ (C 15-Struktur)

Die Gitterkonstante beträgt dabei $7.9 \text{ \AA}$. Es befinden sich 8 Gd-Atome sowie 16 Al-Atome in dieser Zelle. Sowohl das Gadolinium als auch das Aluminium geben 3 Elektronen an das Leitfähigkeitsband ab.

Das Seltene Erd Ion Gadolinium hat Gesamtdrehimpulsquantenzahl $J = 7/2$. Für die kritische Temperatur für magnetische Ordnung wurde T_c mit 150 K festgelegt, die Debeytemperatur mit 250 K angenommen. Für den weiteren Modellparameter $\alpha = (q_p/2k_f)^2$ wurde 1 festgesetzt.

Die Stärken der einzelnen Wechselwirkungen wurden über die Werte des elektrischen Widerstandes bestimmt/13/, und sind in Tabelle 6.2 angegeben:

Potential:	a_v	=	$2.72 \text{ E}+4$	[K]
Magnetisch:	a_m	=	$3.46 \text{ E}+3$	[K]
Phononen:	a	=	690.	

Tabelle 6.2 : Stärken der Wechselwirkungen für GdAl_2

Die von der Bandstruktur abhängigen Größen $\bar{v}(E)$, $N(E)$ und die Fermienergie E_f wurden über das freie Elektronengas bestimmt.

Dabei wurde die Temperaturabhängigkeit der Größen $\bar{v}(0)$, $N(0)$, $\bar{v}'(0)$ und $N'(0)$ nicht berücksichtigt, also $\mu = E_f$ angenommen. Für $\bar{v}(0)$ wurde dabei 1, für $\bar{v}'(0)$ 1.2909 E-5 verwendet.

Zunächst gibt Kapitel 6.2.1 eine Zusammenstellung der Ergebnisse für die Transportkoeffizienten ρ , W und S , wie man sie für GdAl_2 bei Vorhandensein einzelner Streumechanismen (Potential-, Magnetische- und Phononen-Streuung) erhält.

In Kapitel 6.2.2 sind die Ergebnisse für die Überlagerung von Streumechanismen zusammengefaßt.

6.2.1 Ergebnisse für die einzelnen Streumechanismen

Im folgenden werden die Ergebnisse für den Temperaturverlauf der Transportkoeffizienten beim Vorhandensein einzelner Streumechanismen angegeben. In den Abbildungen des Temperaturverlaufes für die Koeffizienten werden neben den Ergebnissen für den größten Unterraum, in dem das Variationsverfahren angewandt wurde (7-dimensional), auch die für die niedrigste Ordnung angegeben, um das Konvergenzverhalten der Transportkoeffizienten studieren zu können. Außerdem eröffnet die Rechnung die Möglichkeit, die Beiträge der einzelnen Streumechanismen zu den Transportkoeffizienten zu erhalten. Darüberhinaus kann man mit Hilfe der in Abschnitt 6.2.2.1 behandelten Matthiessen, Kohler und Nordheim-Gorter Regeln Transportkoeffizienten für die Überlagerung der Streumechanismen bestimmen.

6.2.1.1 Ergebnisse für die Potential-Streuung

Für die Transportkoeffizienten erhalten wir bei reiner Potential-Streuung einen Temperaturverlauf, der in den Abbildungen 6.2.1.1.1 bis 6.2.1.3.1 dargestellt ist:

Der elektrische Widerstand hängt dabei nicht von der Temperatur ab, der Wärmewiderstand verläuft wie $1/T$ und der Seebeckkoeffizient zeigt lineares Verhalten in T . Es stimmen die Ergebnisse, die man in niedrigster Ordnung erhält, mit denen höherer Ordnung überein. Die äußeren Felder bewirken für die Verteilungsfunktion eine Translation des k -Raumes, die bereits in der Relaxationszeitnäherung richtig berücksichtigt wird.

Abbildung 6.2.1.1.1 : Der elektrische Widerstand für die Potential-Streuung

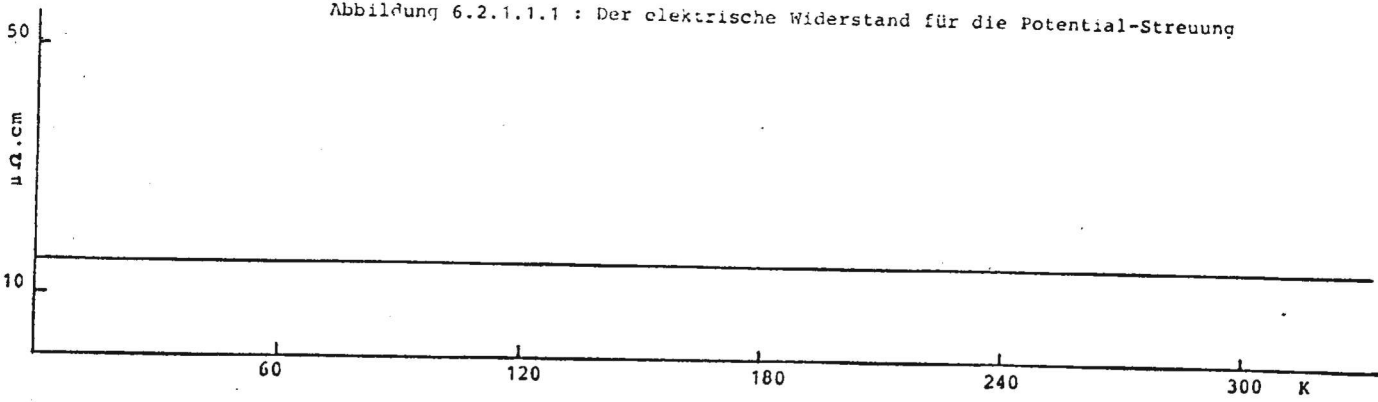


Abbildung 6.2.1.1.2: Der Wärmewiderstand für die Potential-Streuung

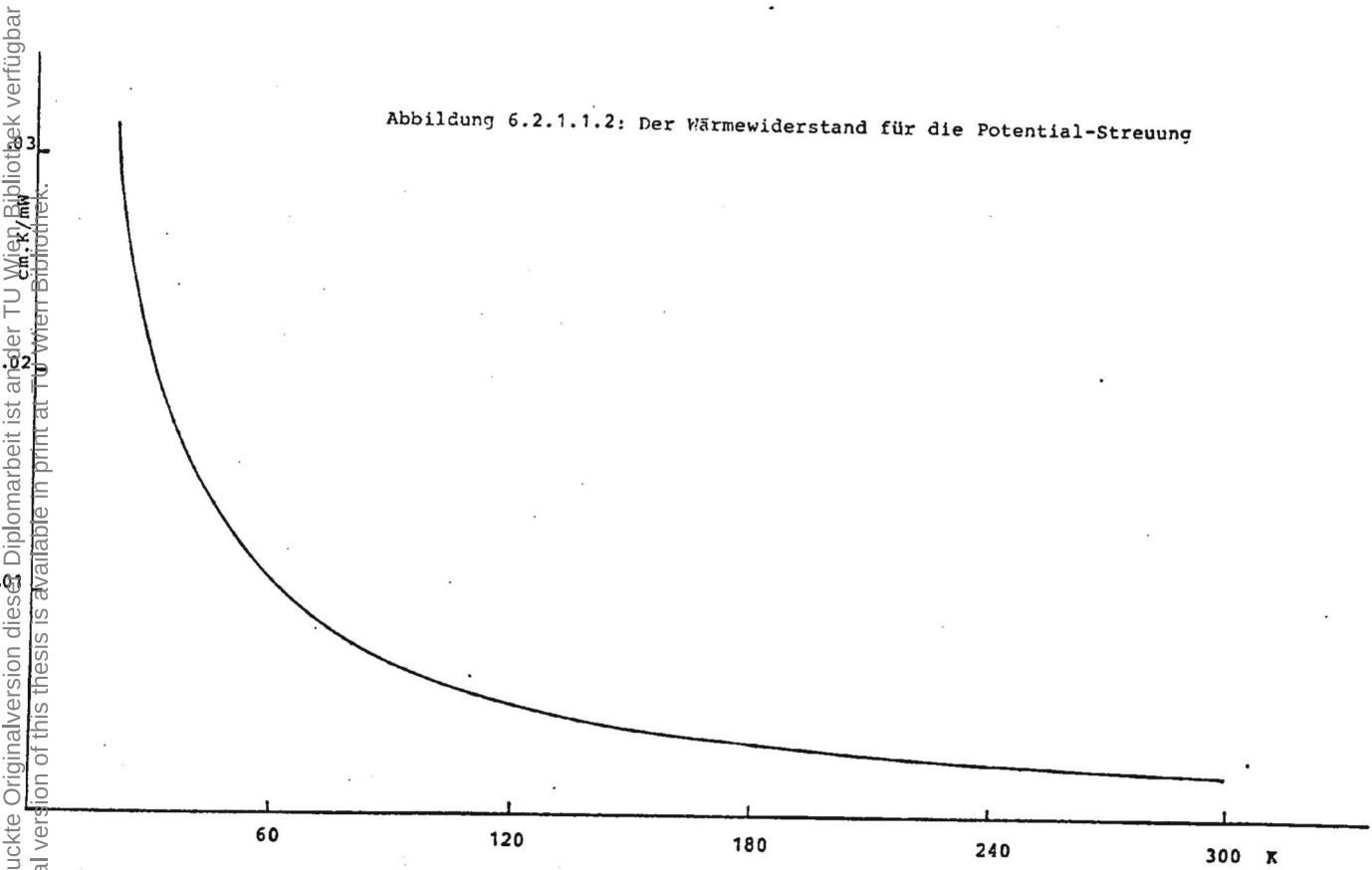
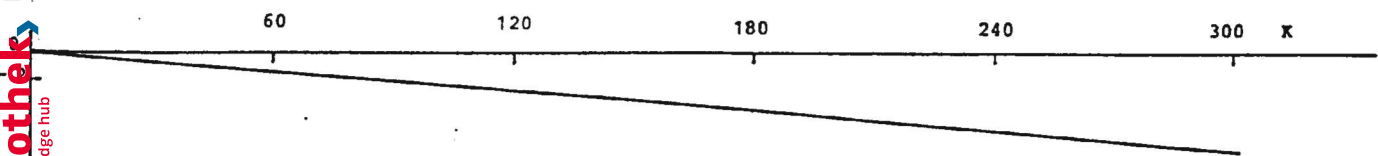


Abbildung 6.2.1.1.3: Der Seebeckkoeffizient für die Potential-Streuung



6.2.1.2 Ergebnisse für die Magnetische-Streuung

Bei GdAl_2 gibt es wegen des magnetischen Gadulinium-Ions (Gesamtdrehimpulsquantenzahl $J = 7/2$) Streuprozesse, die von der Wechselwirkung der Leitungselektronen mit den magnetischen Seltenen Erd Ionen herrühren, mit temperaturcharakteristischem Beitrag zu den Transportkoeffizienten.

Für $T < T_c$ ist die Streuung der Leitungselektronen auch inelastisch, für $T \gg T_c$ ist sie nur mehr elastisch.

Sowohl der elektrische Widerstand wie auch der Wärmewiderstand und der Seebeckkoeffizient zeigen ein stetiges Verhalten beim Übergang von $T < T_c$ nach $T > T_c$. Die Ableitungen der Funktionen bei $T = T_c$ sind jedoch für alle drei Koeffizienten unstetig.

In Abbildung 6.2.1.2.1 ist der Temperaturverlauf des elektrischen Widerstandes für die Magnetische-Streuung angegeben. Berücksichtigen wir in der Rechnung Terme der Ordnung ($\Delta b / \mu$) (Δb ...Aufspaltung des Leitfähigkeitsbandes durch die magnetische Wechselwirkung, μ ...chem.Potential), so erhalten wir für den elektrischen Widerstand mit und ohne Berücksichtigung der Bandaufspaltung das gleiche Ergebnis. Dabei bekommt man ein exponentielles Ansteigen von $T = 0$ aus, und einen konstanten Verlauf für $T \gg T_c$. Der Wert des Widerstandes hängt dabei von der Gesamtdrehimpulsquantenzahl J und dem Landee-Faktor der magnetischen Ionen ab.

Im Unterschied zur Potential-Streuung ändern sich die Werte der Transportkoeffizienten beim Übergang zu immer höher dimensionalen Funktionenräumen. Dabei ist deutlich zu bemerken, daß die relativen Unterschiede zwischen den Ergebnissen der niedrigsten Ordnung und der höchsten (in unserem Fall 7-dimensional) umso höher sind, je tiefer die Temperaturen liegen.

Wegen der Maximalbedingungen, die das Variationsverfahren für die elektrische Leitfähigkeit und die Wärmeleitfähigkeit liefert, und der geeigneten Wahl der Versuchsfunktionen, liegen die Werte für den elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand in niedrigster Ordnung stets höher als die in höherer Ordnung.

Für $T = 5 \text{ K}$ erhält man einen um den Faktor 3 gegenüber der höchsten Ordnung größeren Wert in niedrigster Ordnung. Bei $T = 40 \text{ K}$ ist dann bereits eine Übereinstimmung der Werte in niedrigster und höchster Ordnung von ungefähr 10% gegeben, die für höhere Temperaturen immer besser wird (bei $T = 80 \text{ K}$ ist die relative Übereinstimmung 4%).

Für den Wärmewiderstand (Abbildung 6.2.1.2.2) erhält man einen sehr starken relativen Anstieg bei tiefen Temperaturen (10-40 K) und ein Verhalten wie $1/T$ für $T > T_c$, wie auch schon bei der Potential-Streuung. Auch beim Wärmewiderstand stimmen die Werte mit und ohne Berücksichtigung der Bandaufspaltung überein, wenn man Terme ab der Ordnung $(\Delta b / \mu)^2$ vernachlässigt.

Bei tieferen Temperaturen ergeben sich stärkere relative Abweichungen der Werte, die man für die niedrigste Ordnung des Variationsverhaltens erhält, von denen der höchsten Ordnung als bei höheren Temperaturen. Bei 5 K beträgt der relative Unterschied den Faktor 11, für $T = 40 \text{ K}$ wird eine Übereinstimmung von 10% erreicht. Für höhere Temperaturen wird der relative Unterschied zwischen niedrigster und höchster Ordnung zusehends geringer (ab 60 K kleiner als 1%).

Für den Seebeckkoeffizienten der Magnetischen Streuung ist in der Abbildung 6.2.1.2.3 der Temperaturverlauf mit Berücksichtigung der Bandaufspaltung bis zu Termen $(\Delta b / \mu)$ und in

Abbildung 6.2.1.2.4 ohne Bandaufspaltung dargestellt.

Berücksichtigen wir die Bandaufspaltung, so durchläuft der Seebeckkoeffizient zunächst ein positives Maximum, dessen Wert linear vom Quotienten der Wechselwirkungsstärken H_{sf} (Leitungselektron-Seltene Erd Ion) und H_{ff} (Seltene Erd Ion- Seltene Erd Ion) abhängt. Bei $T = T_C$ hat der Koeffizient bereits sein Vorzeichen gewechselt, und zeigt für $T > T_C$ lineares Verhalten in T .

Ohne Berücksichtigung der Bandaufspaltung erhält man für den Seebeckkoeffizienten ein auch für tiefe Temperaturen nahezu lineares Verhalten. Der Koeffizient ändert sein Vorzeichen auf dem gesamten Temperaturbereich nicht.

Man erhält, vergleicht man wieder Werte der niedrigsten Ordnung des Variationsverfahrens mit denen höherer Ordnung, umso stärkere relative Abweichungen je tiefer die Temperaturen liegen. Für den Seebeckkoeffizienten gibt es keine Minimal- oder Maximalbedingungen wie für den elektrischen Widerstand oder die Wärmeleitfähigkeit. Die Werte konvergieren deswegen nicht monoton von niedrigeren Ordnungen zu höheren.

Für den Seebeckkoeffizienten mit Berücksichtigung der Bandaufspaltung beträgt die relative Abweichung vom minimalen gegenüber dem maximalen Wert bei $T = 5 \text{ K}$ den Faktor 9. Für $T = 40 \text{ K}$ ist der Unterschied 50% und für $T > 80 \text{ K}$ ist die Übereinstimmung besser als 10%.

Abbildung 6.2.1.2.1: Der elektrische Widerstand für die Magnetische-Streuung
— 7-dimensionaler Unterraum; - - - 1-dimensionaler Unterraum

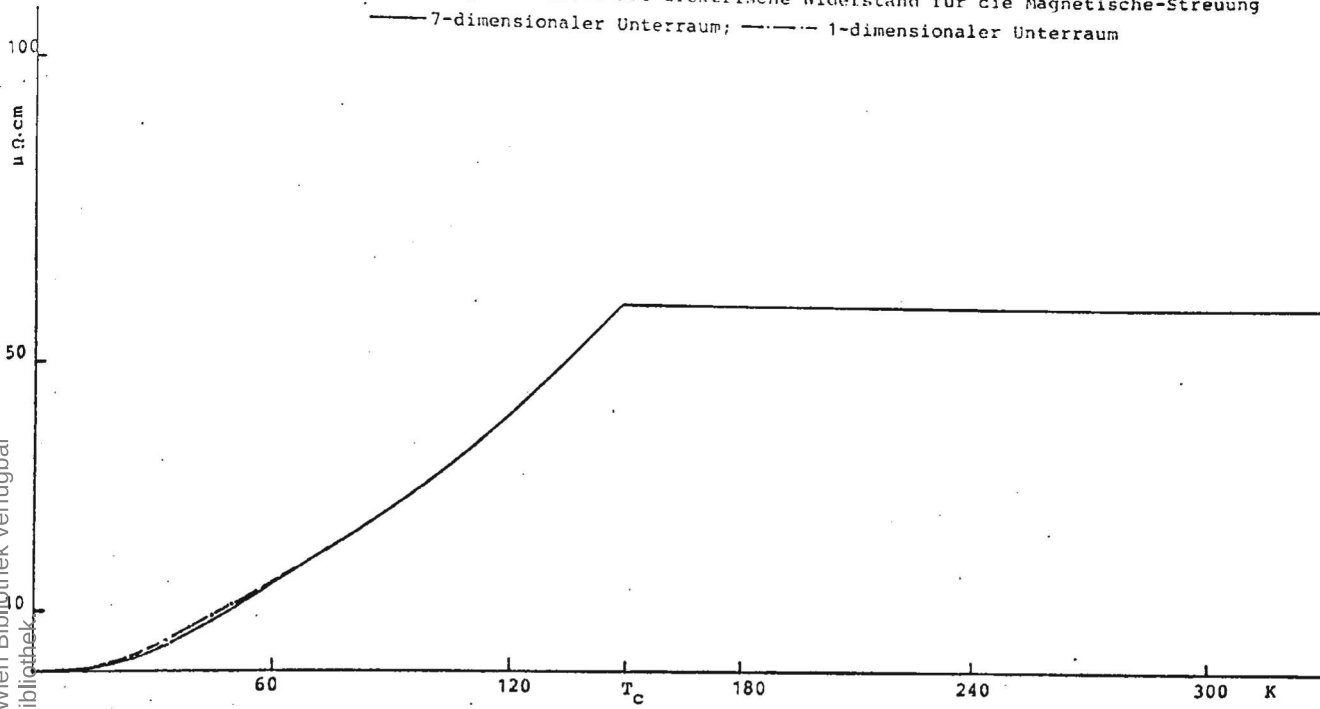


Abbildung 6.2.1.2.2: Der Wärmewiderstand für die Magnetische-Streuung
— 7-dimensionaler Unterraum; - - - 2-dimensionaler Unterraum

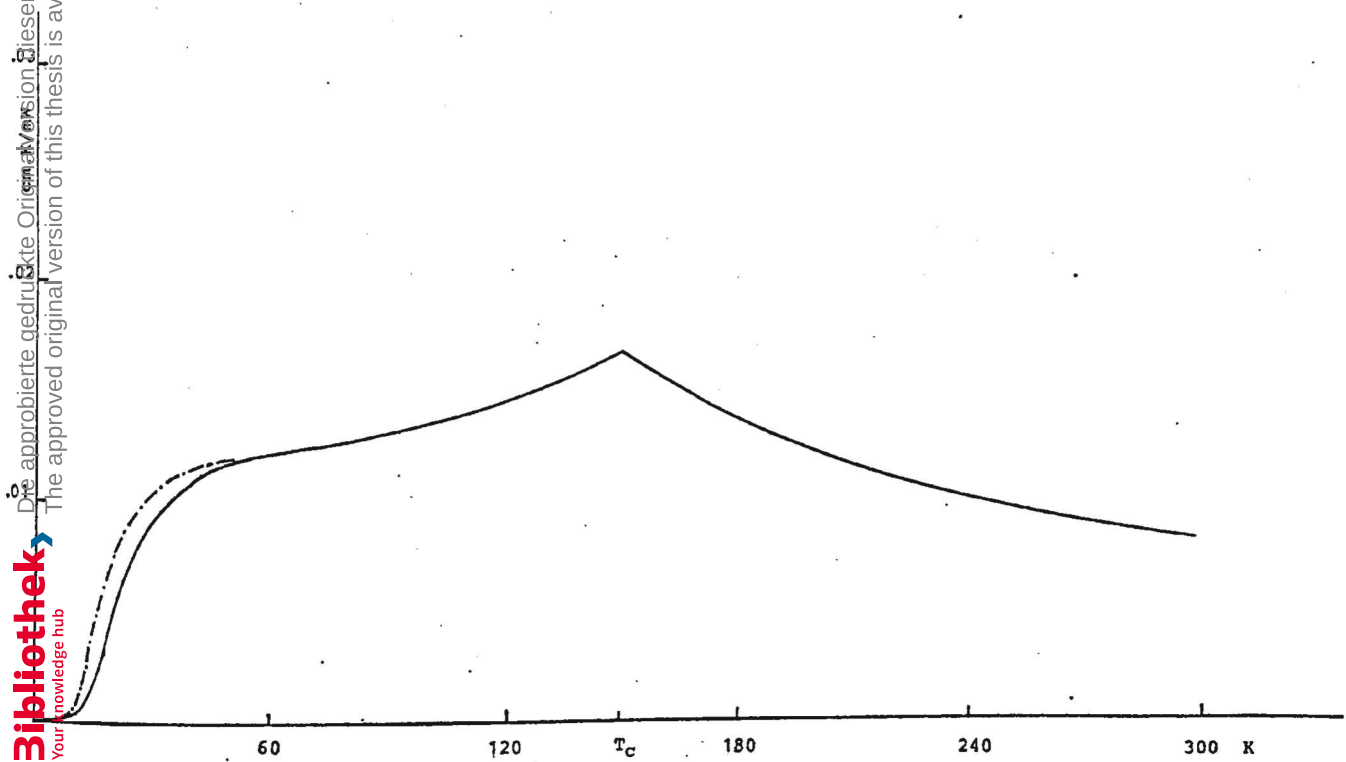


Abbildung 6.2.1.2.3: Der Seebeckkoeffizient für die Magnetische-Streuung mit Berücksichtigung der Bandaufspaltung. — 7-dimensionaler Unterraum
- - - 2-dimensionaler Unterraum

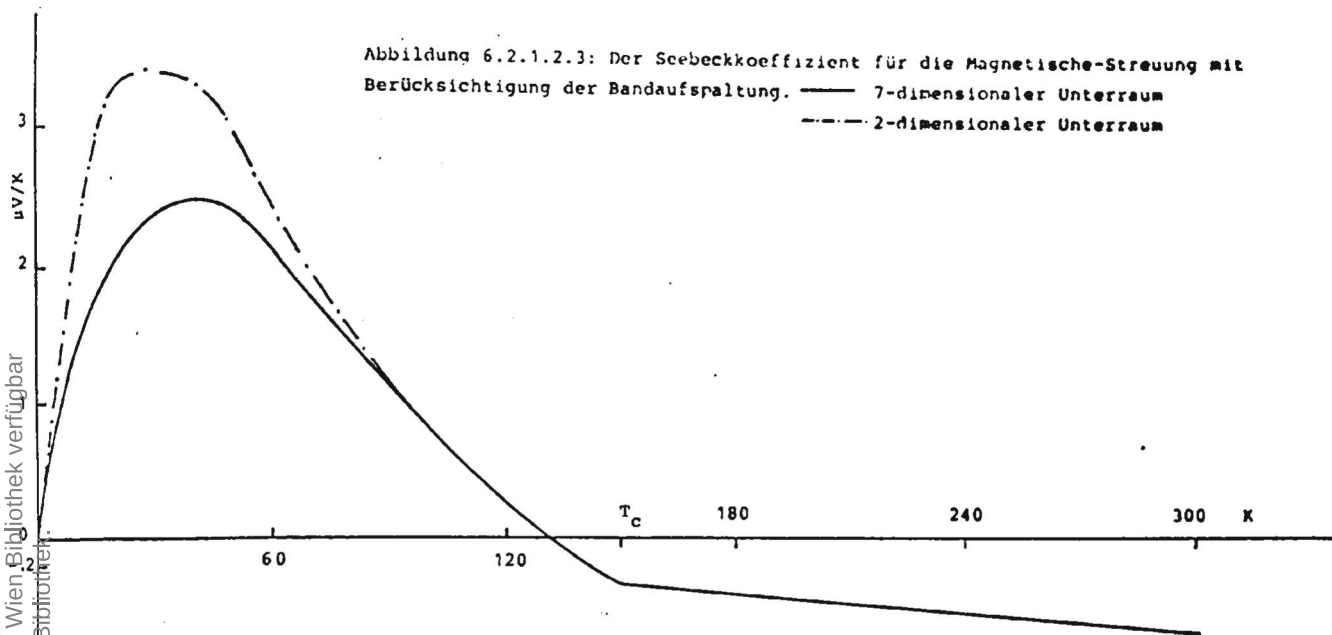
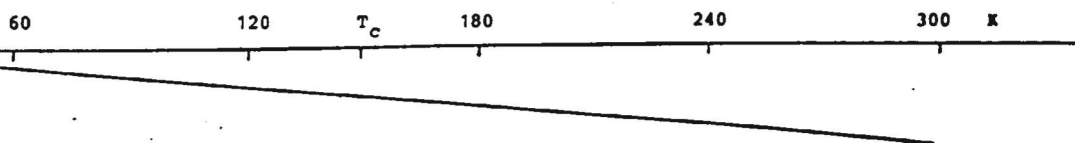


Abbildung 6.2.1.2.4: Der Seebeckkoeffizient für die Magnetische-Streuung ohne Berücksichtigung der Bandaufspaltung. 7-dimensionaler Unterraum
(In der Zeichnung fallen die Ergebnisse für den 2- und den 7-dimensionalen Unterraum zusammen)



6.2.1.3 Ergebnisse für die Phononen-Streuung

Für GdAl_2 nehmen wir für die Debeytemperatur aus Kapitel 4.2.1.3 250 K an, und setzen $\alpha = (q_D/2k_f)^2 = 1$. Damit erhalten wir die Transportkoeffizienten, die in den Abbildungen 6.2.1.3.1-6.2.1.3.3 dargestellt sind.

Für den elektrischen Widerstand ergibt sich dabei das Bloch-Grüneisen-Verhalten /6/. Für kleine Temperaturen erhält man ein T^5 - für große T und asymptotisch ein lineares Verhalten des elektrischen Widerstandes bezüglich der Temperatur.

Für die Abweichung der Ergebnisse in niedrigster Ordnung des Variationsverfahrens von denen in höchster Ordnung (7-dimensional) ergibt sich für den elektrischen Widerstand bei kleinen Temperaturen bessere Übereinstimmung (bis 15 K besser als 10%). Das Maximum der relativen Differenz wird bei 40 K mit 40% erreicht. Für höhere Temperaturen wird die relative Übereinstimmung zusehends besser (bei 80 K besser 10%).

Für den Wärmewiderstand, Abbildung 6.2.1.3.2, erhält man für tiefe Temperaturen ein Verhalten wie T^2 - bei großen T wird der Wärmewiderstand der Phononen-Streuung konstant.

Die relative Abweichung der Werte, die in niedrigster Ordnung erhalten werden, von denen in höchster Ordnung steigt im Intervall 5 - 30 K von 30% auf 40% an, und fällt für höhere Temperaturen ab - für T 80 K ist sie geringer als 10%.

Der Seebeckkoeffizient, Abbildung 6.2.1.3.3, zeigt über den gesamten Temperaturbereich lineares Verhalten.

Im Gegensatz zum Wärmewiderstand und elektrischen Widerstand existieren für den Seebeckkoeffizienten keine Extremalbedingungen. Man beobachtet in den Ergebnissen maximale relative

Abweichungen zwischen den Werten der verschiedenen Unterräume, die für kleine Temperaturen geringer (kleiner 10% für $T \leq 25$ K) sind, und bei $T = 60$ K mit 18% ihr Maximum erreichen. Für $T > 120$ K ist die Übereinstimmung wieder besser als 10%, der relative Unterschied verkleinert sich im weiteren zusehends.

Abbildung 6.2.1.3.1: Der elektrische Widerstand für die Phononen-Streuung
 — 7-dimensionaler Unterraum; - - - 1-dimensionaler Unterraum

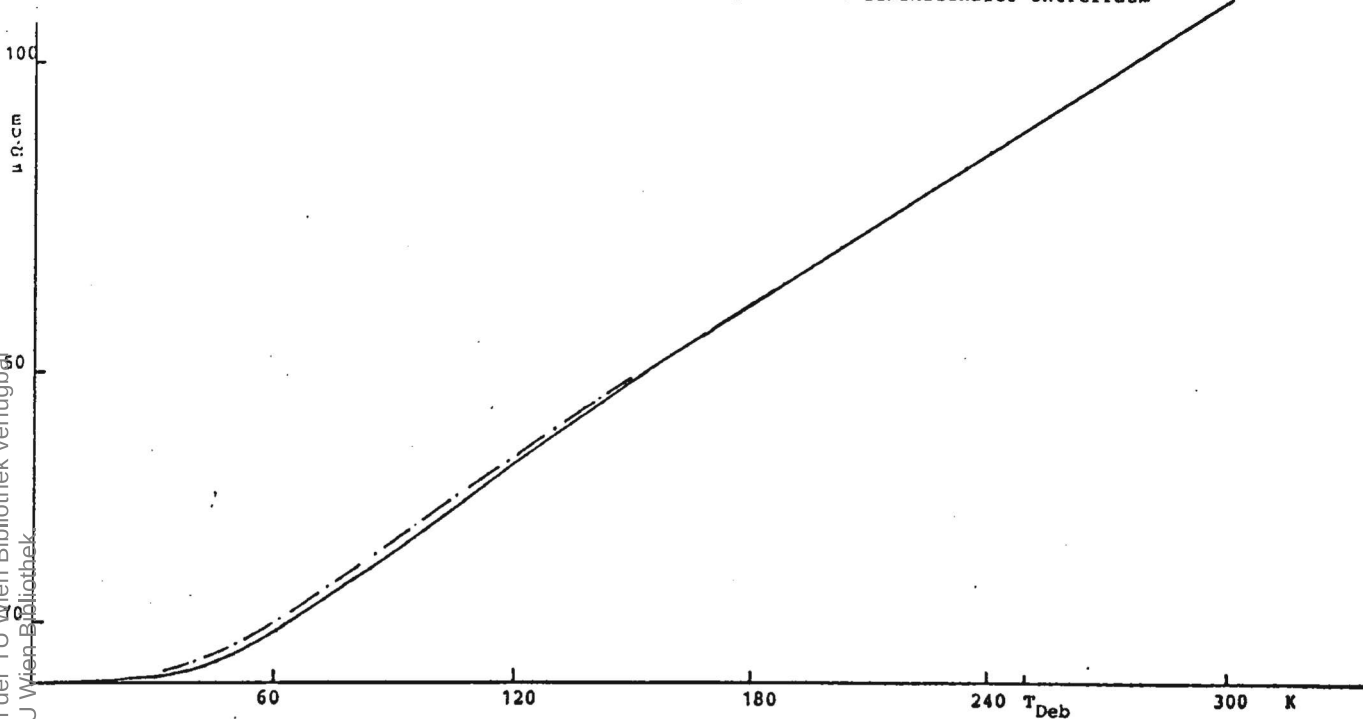


Abbildung 6.2.1.3.2: Der Wärmewiderstand für die Phononen-Streuung
 — 7-dimensionaler Unterraum; - - - 2-dimensionaler Unterraum

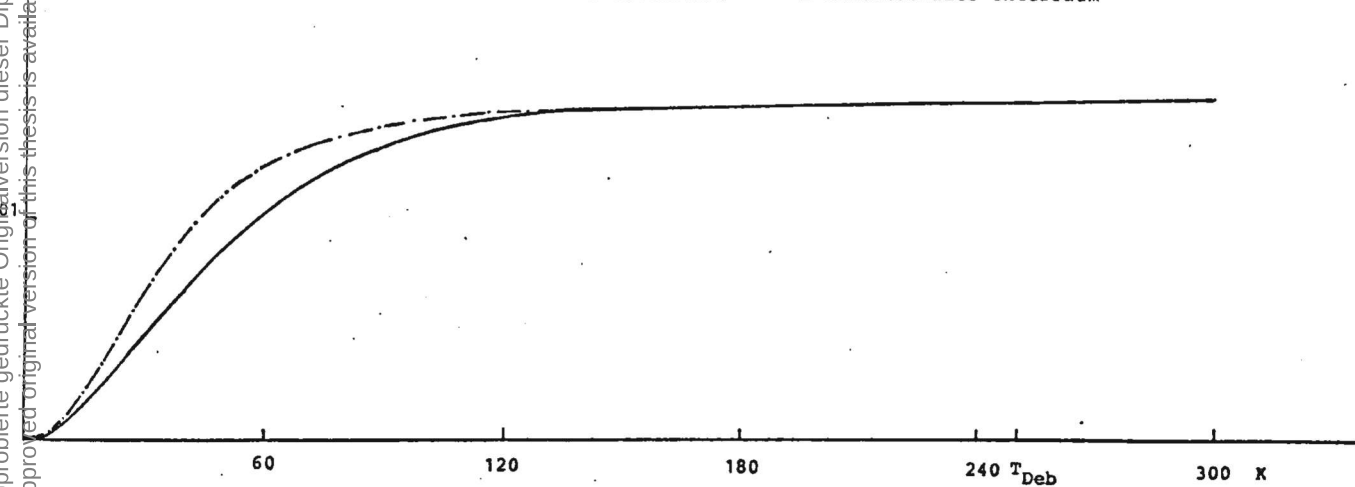
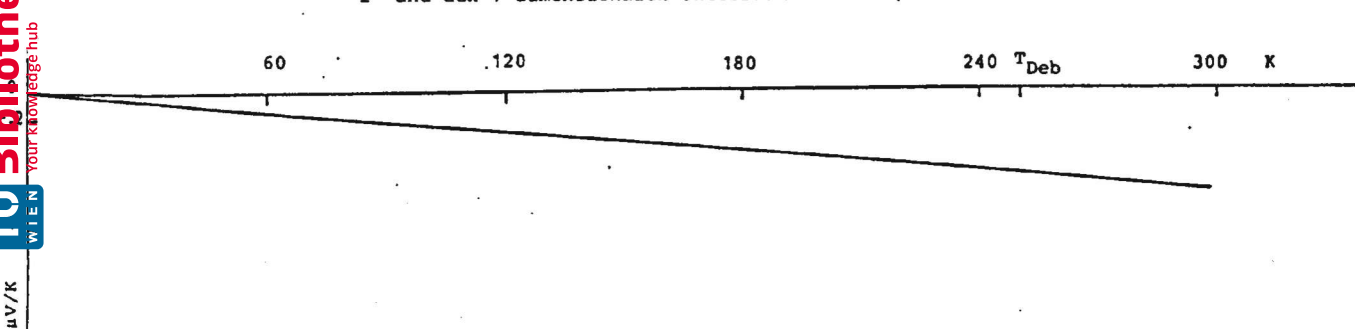


Abbildung 6.2.1.3.3: Der Seebeckkoeffizient für die Phononen-Streuung
 7-dimensionaler Unterraum (In der Zeichnung fallen die Ergebnisse für den 2- und den 7-dimensionalen Unterraum zusammen)



6.2.2 Die Überlagerung von Streumechanismen

Wir haben im letzten Kapitel den Temperaturverlauf der Transportkoeffizienten beim Vorhandensein einzelner Streumechanismen (Potential-, Magnetische- und Phononen-Streuung) erhalten.

Tatsächlich hat man es aber stets mit der Überlagerung von einzelnen Streumechanismen zu tun, d.h. wir haben die Modell-Hamiltonoperatoren der einzelnen Wechselwirkungen zu addieren

$$H_{ww} = H_{ww}^a + H_{ww}^b + H_{ww}^c \dots \quad (6.2.2.1)$$

und erhalten damit einen neuen Operator H_{ww} .

Nimmt man nun an, daß die einzelnen Streumechanismen unabhängig voneinander wirken, daß also

$$| \langle H_{ww}^a + H_{ww}^b \rangle |^2 = | \langle H_{ww}^a \rangle |^2 + | \langle H_{ww}^b \rangle |^2 \quad (6.2.2.2)$$

gilt, so erhalten wir für die Funktion $P_{YY'}^{a+b}(\Omega)$

$$\begin{aligned} P_{YY'}^{a+b}(\Omega) &= \frac{1 - e^{-\omega}}{\omega} \sum_{MM'} g_M \frac{\Delta^3 r}{(2\pi)^3} | \langle YM | H_{ww}^a + H_{ww}^b | YM' \rangle |^2 \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) = \\ &= \frac{1 - e^{-\omega}}{\omega} \sum_{MM'} g_M \frac{\Delta^3 r}{(2\pi)^3} [| \langle YM | H_{ww}^a | YM' \rangle |^2 + | \langle YM | H_{ww}^b | YM' \rangle |^2] \delta(\Omega + E_M - E_{M'}) = \\ &= P_{YY'}^a(\Omega) + P_{YY'}^b(\Omega) \end{aligned} \quad (6.2.2.3)$$

und weiters für die Spektralfunktionen $G_{ss'}(E, E', \Omega)$

$$\begin{aligned} G_{ss'}^{a+b}(E, E', \Omega) &= \frac{m}{3n} \frac{(2\pi)^6}{(\Delta^3 r)^3} \sum_{YY'} P_{YY'}^{a+b}(\Omega) [v(Y) + sv(Y')] [v(Y) + s'v(Y')] \cdot \\ &\quad \times \delta(E - E_Y + \mu) \delta(E' - E_{Y'} + \mu) = G_{ss'}^a(E, E', \Omega) + G_{ss'}^b(E, E', \Omega) \end{aligned} \quad (6.2.2.4)$$

Damit verhält sich das Matricelement des Stoßoperators ebenfalls additiv, nämlich

$$C_{ij}^{a+b} = C_{ij}^a + C_{ij}^b \quad (6.2.2.5)$$

6.2.2.1 Die Matthiessen, die Kohler und die Nordheim-Gorter Regeln

Wir haben bei der Überlagerung von Streumechanismen a,b für das Matrixelement des Stoßoperators ein additives Verhalten in der Form

$$C_{ij}^{a+b} = C_{ij}^a + C_{ij}^b \quad (6.2.2.1.1)$$

erhalten. Wir benützen nun die Gleichungen, die wir in Kapitel 5 für die Transportkoeffizienten in niedrigster Ordnung erhalten haben

$$\rho = \frac{m k_B T}{e^2 n \hbar} \frac{1}{\bar{v}_0} \frac{\mathcal{C}_{00}}{4(2\pi)^2} \quad (6.2.2.1.2)$$

$$W = \frac{m}{n k_B \hbar} \left(\frac{1}{4\eta(2) \bar{v}_0} \right)^2 \frac{\mathcal{C}_{11}}{4(2\pi)^2} \quad (6.2.2.1.3)$$

$$S = - \frac{k_B}{e} \frac{4\eta(2)}{\mathcal{C}_{11}} \left[\frac{1}{\beta} \frac{\bar{v}_0'}{\bar{v}_0} [\mathcal{C}_{11} + 4\eta(2) \mathcal{C}_{00}] - \mathcal{C}_{10} \right] \quad (6.2.2.1.4).$$

Damit erhalten wir bei der Überlagerung von Streumechanismen in der niedrigsten Ordnung des Variationsverfahrens für den elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand :

$$\rho^{a+b} = \rho^a + \rho^b \quad (6.2.2.1.5)$$

$$W^{a+b} = W^a + W^b \quad (6.2.2.1.6).$$

(6.2.2.1.5) und (6.2.2.1.6) sind als Matthiessen Regel bekannt.

Für den Seebeckkoeffizienten ergibt sich bei der Überlagerung von Streumechanismen

$$S^{a+b} = S^a \frac{W^a}{W^{a+b}} + S^b \frac{W^b}{W^{a+b}} \quad (6.2.2.1.7),$$

also eine mit dem Wärmewiderstand gewichtete Addition der einzelnen Beiträge. Dieses Verhalten wird als Kohler Regel bezeichnet. Verwenden wir das Wiedemann-Franz'sche Gesetz

$$\frac{\omega}{\omega} = L T \quad (L \dots \text{Lorenzzahl } /15/) \quad (6.2.2.1.8),$$

so ergibt sich die Nordheim-Gorter Regel als

$$S^{a+b} = S^a \frac{\omega^a}{\rho^{a+b}} + S^b \frac{\omega^b}{\rho^{a+b}} \quad (6.2.2.1.9).$$

Hier werden also die Seebeckkoeffizienten der einzelnen Streumechanismen mit den elektrischen Widerständen gewichtet.

Wie gut die drei hier erwähnten Regeln für die intermetallische Seltene Erd Verbindung $GdAl_2$ erfüllt sind, soll unter anderem im nächsten Abschnitt dargestellt werden.

6.2.2.2 Ergebnisse für die Überlagerung von Streumechanismen

Wir wenden uns nun der Berechnung der Transportkoeffizienten bei der Überlagerung von Streumechanismen zu. Diese Rechnungen führen wir für $GdAl_2$ durch, wobei wir dieselben Modellparameter verwenden wie für die Berechnung bei den einzelnen Streumechanismen. Wir berücksichtigen dabei die Bandaufspaltung, wie sie durch die Anwesenheit der magnetisch wechselwirkenden Seltenen Erd Ionen für das Leitungsband auftritt, in erster Ordnung des Quotienten $\Delta b / \mu$ ($\Delta b \dots$ halbe Bandaufspaltung, $\mu \dots$ chemisches Potential)

Für die Streumechanismen nehmen wir dabei an, daß sie unabhängig von einander seien, und damit für zwei beliebige Streumechanismen a, b

$$| \langle H_{ww}^{a+b} \rangle |^2 = | \langle H_{ww}^a + H_{ww}^b \rangle |^2 = | \langle H_{ww}^a \rangle |^2 + | \langle H_{ww}^b \rangle |^2 \quad (6.2.2.2.1)$$

gilt, wobei H_{ww} die Wechselwirkungsoperatoren darstellen.

Damit muß man, um die Spektralfunktionen für die Überlagerung

der Wechselwirkungen zu erhalten, die Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen addieren.

Bei den Ergebnissen werden wir uns in erster Linie für den Temperaturverlauf der Transportkoeffizienten sowie die Erfüllung der im letzten Kapitel behandelten Matthiessen, Kohler und Nordheim-Gorter Regel interessieren.

6.2.2.2.1 Der elektrische Widerstand bei der Überlagerung von Streumechanismen

In den Abbildungen 6.2.2.2.1.1 - 6.2.2.2.1.3 ist der elektrische Widerstand bei der Überlagerung von jeweils zwei Streumechanismen dargestellt. Es zeigt sich, daß die Matthiessen Regel

$$\rho^{a+b} = \rho^a + \rho^b \quad (6.2.2.2.1.1)$$

sehr gut erfüllt ist. Damit erhalten wir für den elektrischen Widerstand die Summe der Werte, die man beim Vorhandensein einzelner Streumechanismen berechnet hat.

Die Erfüllung der Matthiessen Regel ist dabei so genau, daß im Temperaturintervall 5-300 K eine maximale relative Abweichung zwischen den Werten, die man aus der Matthiessen Regel erhält, und denen, die sich aus der Rechnung ergeben, von kleiner 7% erhalten wird. Dabei ist festzuhalten, daß die Übereinstimmung für tiefe Temperaturen zunächst besser ist, die relative Differenz im Intervall 10-80 K maximal wird, und mit steigender Temperatur immer kleiner wird.

Bei der Überlagerung aller drei Streumechanismen, Abbildung 6.2.2.2.1.4, der Fall also, der real auftritt, sieht man, daß für ganz tiefe Temperaturen die Werte denen der Potential-

Streuung entsprechen. Bei $T = T_c$ ergibt sich eine Unstetigkeit der Ableitung des elektrischen Widerstandes bezüglich der Temperatur und für große T verhält sich der Temperaturverlauf wie bei der Phononen-Streuung, nämlich linear in T .

Dabei betragen die Abweichungen von der Mathiessen Regel bei 5 K weniger als 1% und erreichen zwischen 40 und 60 K ihr Maximum von 2.5% - für höhere Temperaturen wird die Übereinstimmung zunehmend besser (besser als 2% für $T > 80$ K).

Abbildung 6.2.2.1.1: Der elektrische Widerstand bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential- und Magnetische-Streuung
Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
(Abweichung vom Ergebnis der Matthiessens Regel zeichnerisch nicht darstellbar)

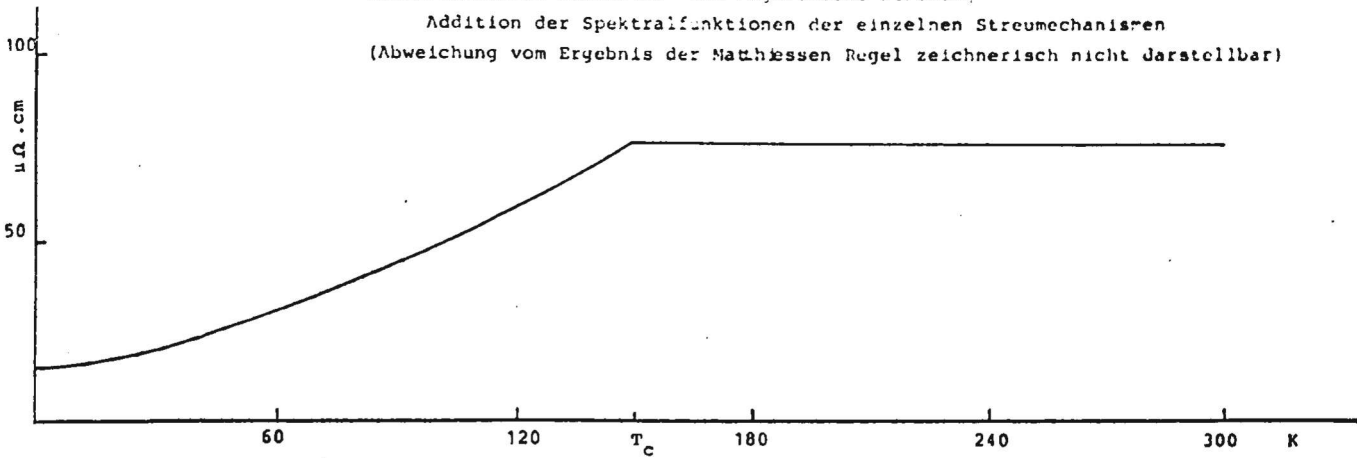


Abbildung 6.2.2.1.2: Der elektrische Widerstand bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential- und Phononen-Streuung
Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen

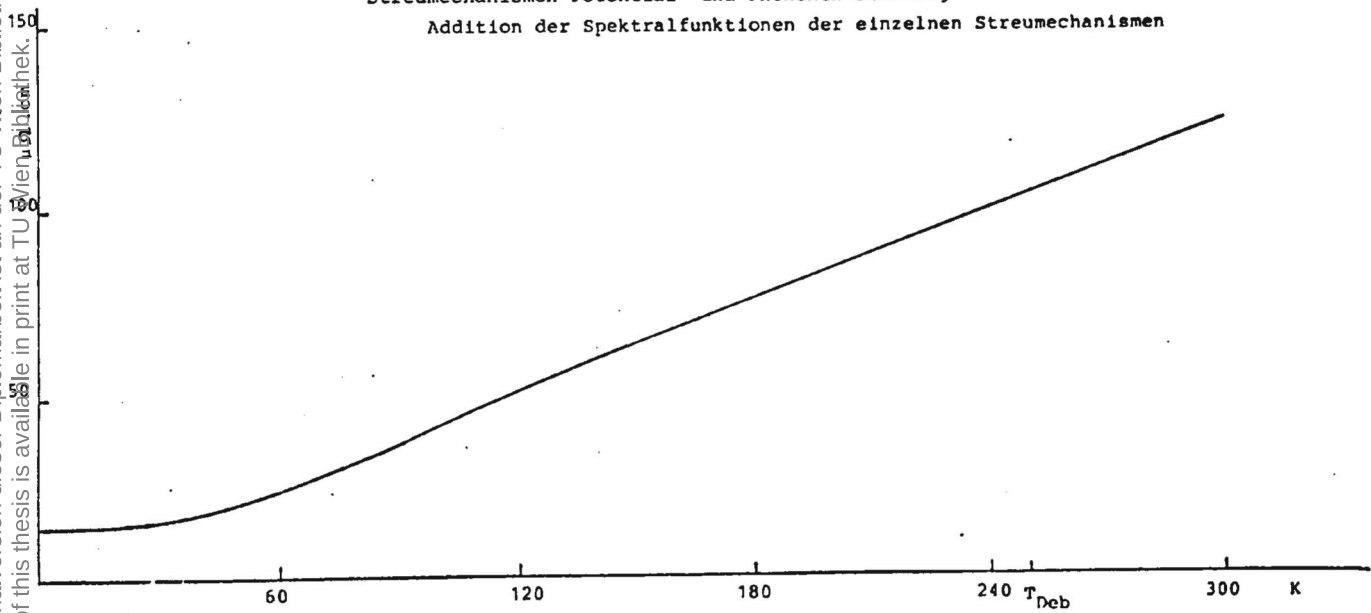


Abbildung 6.2.2.1.3: Der elektrische Widerstand bei der Überlagerung der Streumechanismen Magnetische- und Phononen-Streuung
Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen

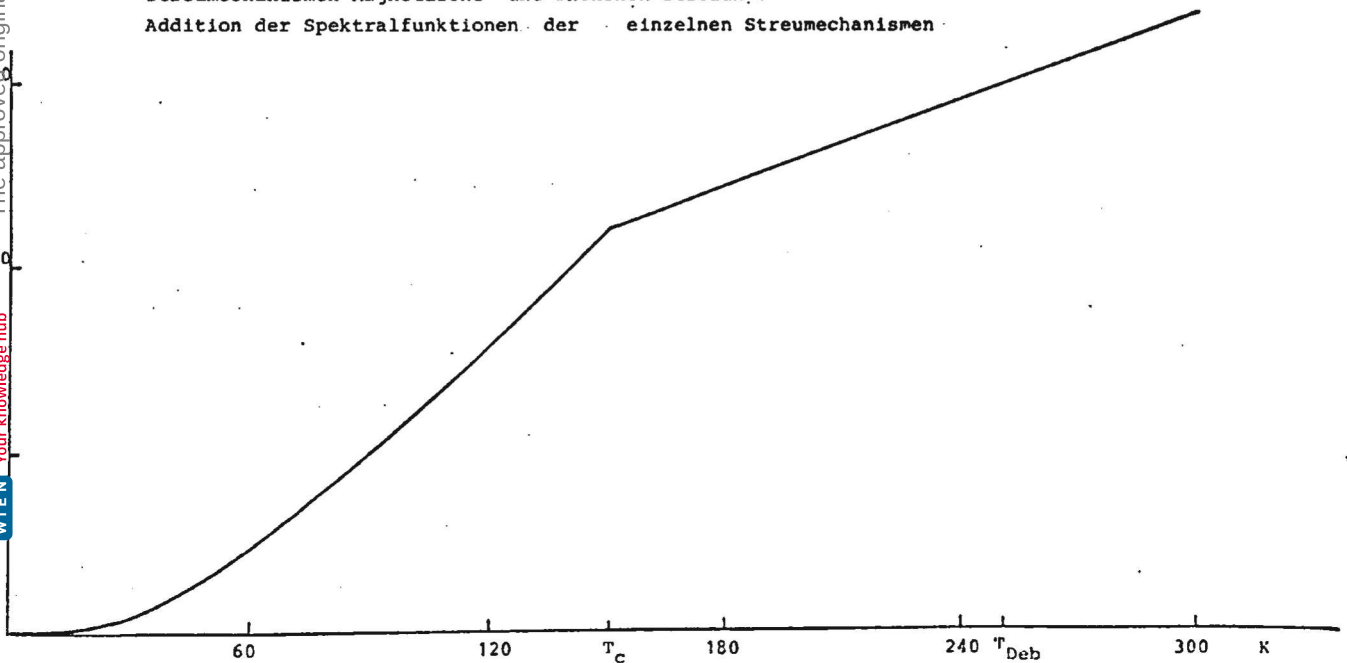
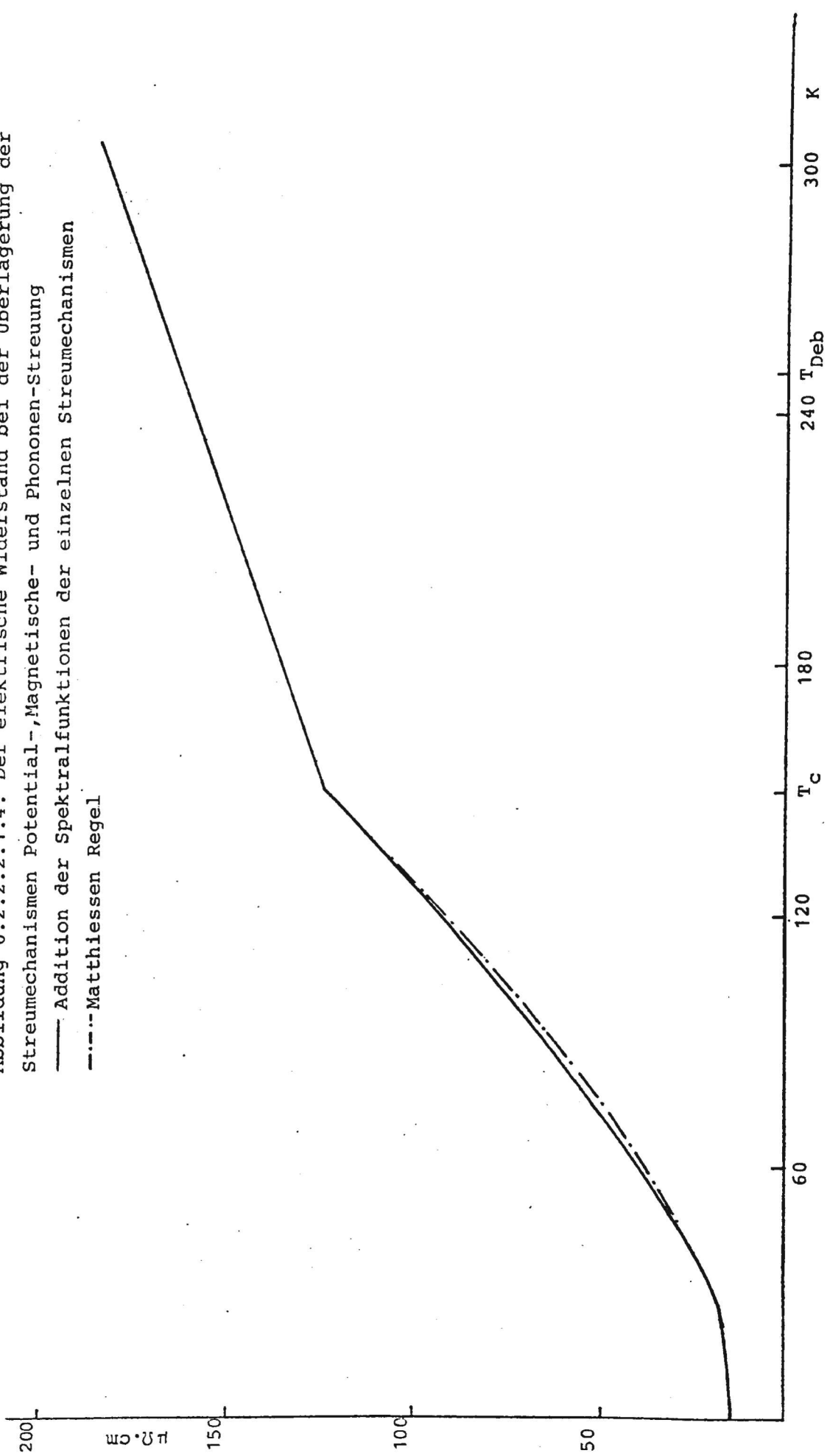


Abbildung 6.2.2.2.1.4: Der elektrische Widerstand bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential-, Magnetische- und Phononen-Streuung
 — Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
 -.-.- Matthiessen Regel



6.2.2.2.2 Der Wärmewiderstand bei der Überlagerung von Streumechanismen

Wie beim elektrischen Widerstand, so ist auch für den Wärmewiderstand bei der Überlagerung der Streumechanismen die Matthiessen Regel

$$W^{a+b} = W^a + W^b \quad (6.2.2.2.2.1)$$

sehr gut erfüllt. Wir erhalten also bei der Überlagerung der Wechselwirkungen nahezu exakt die Summe der Wärmewiderstände, wie wir sie für die einzelnen Streumechanismen erhalten haben. In den Abbildungen 6.2.2.2.2.1 - 6.2.2.2.2.3 ist der Wärmewiderstand für die Überlagerung von jeweils zwei Streumechanismen dargestellt.

Die relative Abweichung von der Matthiessen Regel ist für kleine Temperaturen geringer, steigt dann im Bereich 10-80 K an, und fällt für höhere Temperaturen wieder schnell ab.

Abbildung 6.2.2.2.2.4 zeigt die Überlagerung aller drei Streumechanismen. Für kleine Temperaturen verhält sich der Wärmewiderstand wie bei der Potential-Streuung, weist bei $T = T_c$ den für die Magnetische-Streuung charakteristischen Knick auf, und verläuft für $T > T_c$ wie $1/T$, wo er asymptotisch den Wert des Wärmewiderstandes bei der Phononen-Streuung annimmt.

Die Matthiessen Regel ist für tiefe Temperaturen sehr genau erfüllt (bei 5 K Übereinstimmung). Für T zwischen 20 und 30 K steigt die relative Abweichung zwischen den Werten, die man aus der Rechnung erhält, und jenen mit Hilfe der Matthiessen Regel erhaltenen an (4% bei 30 K) und fällt für Temperaturen größer als 40 K ab - für $T > 100$ K ist die relative Übereinstimmung besser als 1%.

Abbildung 6.2.2.2.1: Der Wärmewiderstand bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential- und Magnetische-Streuung

— Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
 - - - Matthiessen Regel

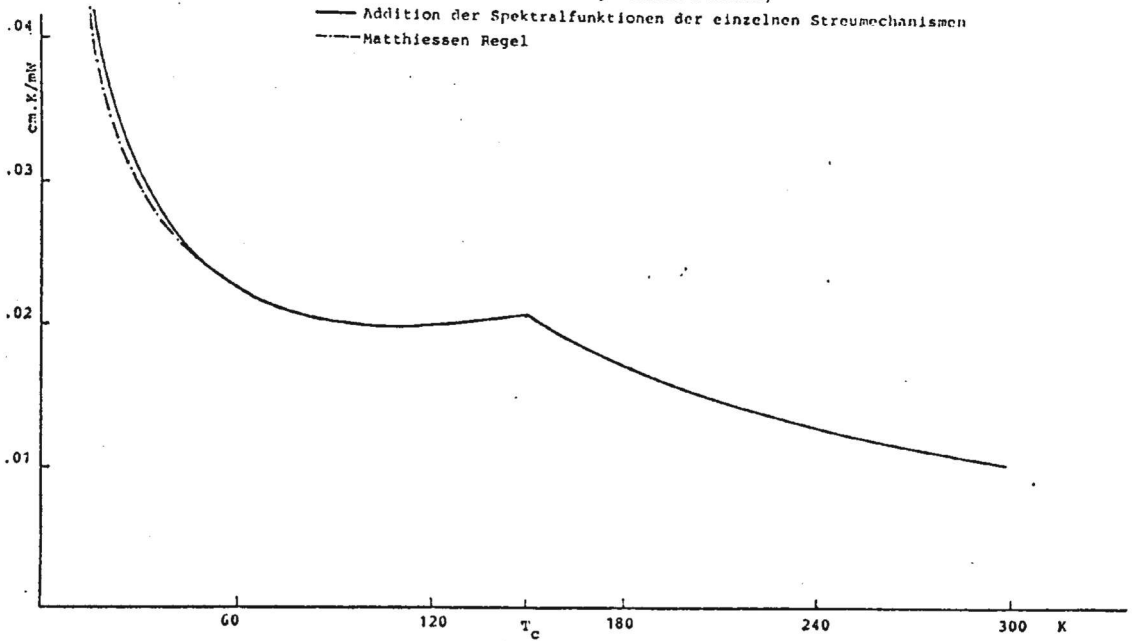


Abbildung 6.2.2.2.2: Der Wärmewiderstand bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential- und Phononen-Streuung

— Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
 - - - Matthiessen Regel

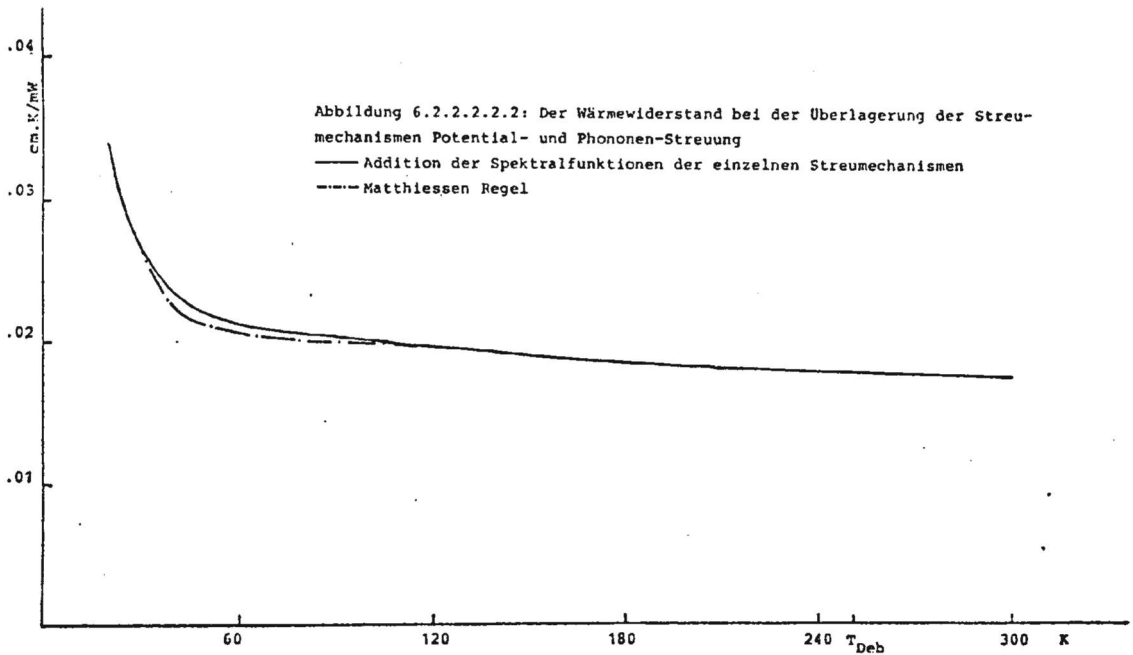


Abbildung 6.2.2.2.3: Der Wärmewiderstand bei der Überlagerung der Streumechanismen Magnetische- und Phononen-Streuung

— Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
 - - - Matthiessen Regel

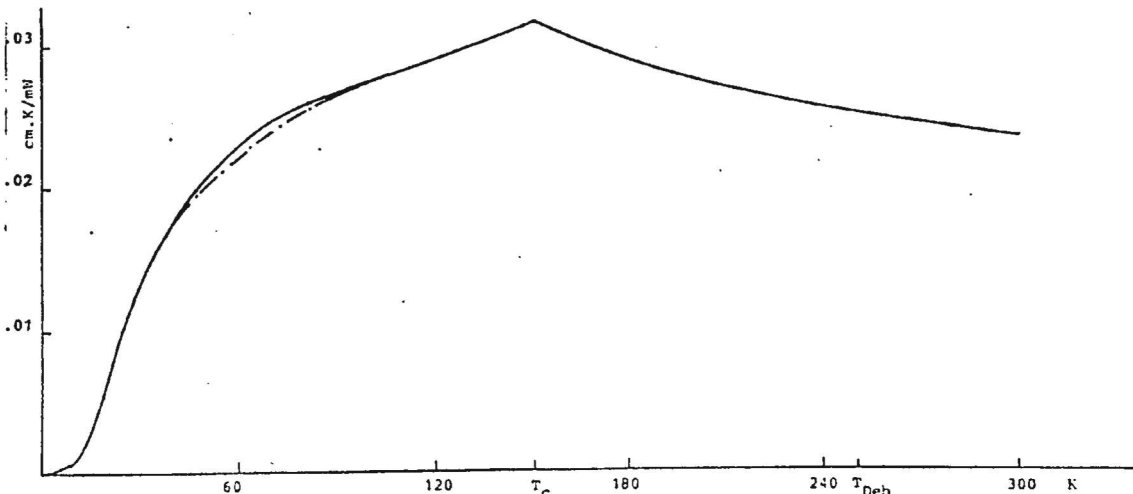
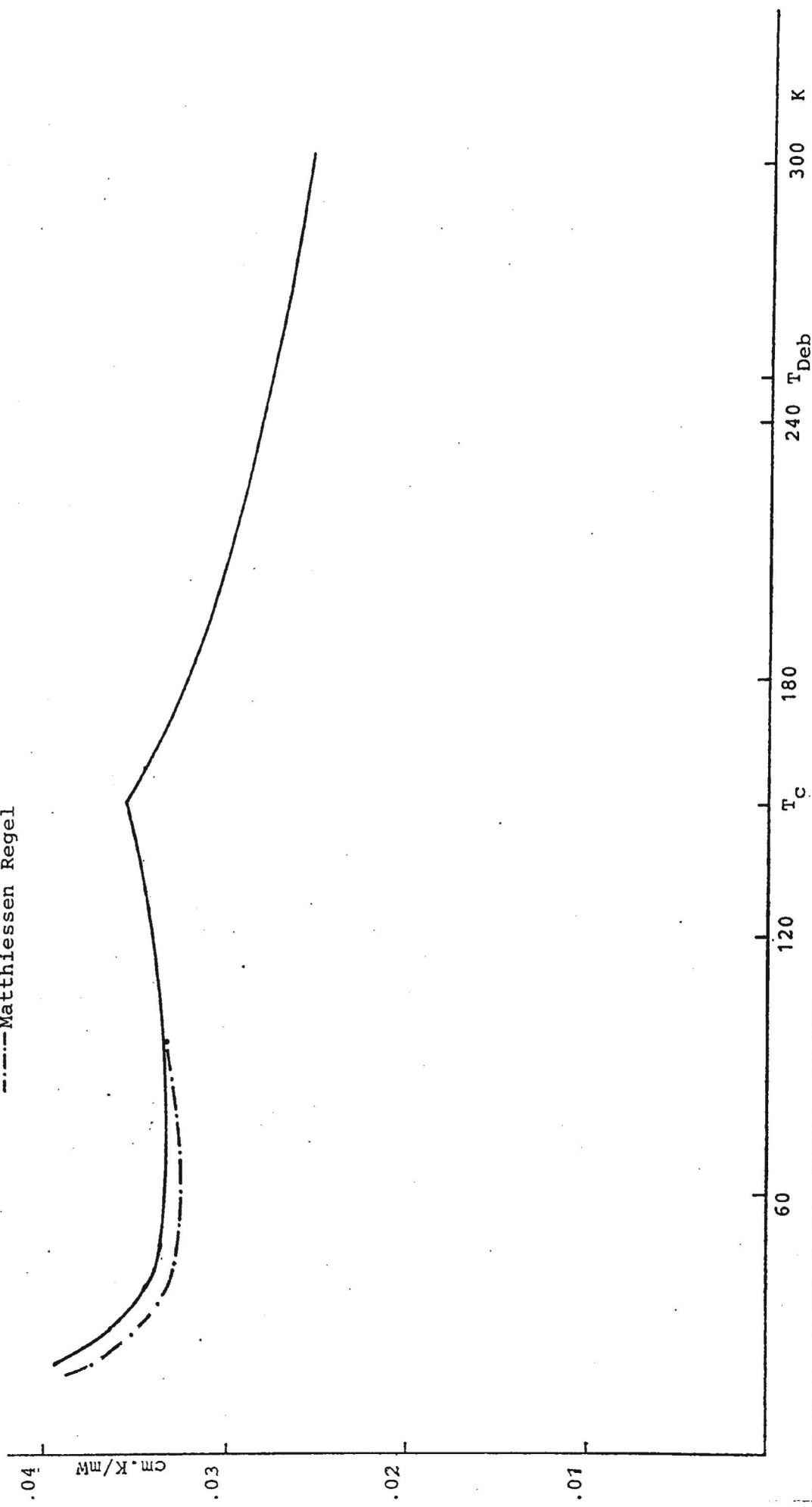


Abbildung 6.2.2.2.4: Der Wärmewiderstand bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential-, Magnetische- und Phononen-Streuung

— Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
- - - - Matthiessen Regel



6.2.2.2.3 Der Seebeckkoeffizient bei der Überlagerung von Streumechanismen

Für den Seebeckkoeffizient erhalten wir bei der Überlagerung der Streumechanismen in der niedrigsten Ordnung des Variationsverfahrens die Kohler Regel

$$S^{a+b} = S^a \frac{W^a}{W^{a+b}} + S^b \frac{W^b}{W^{a+b}} \quad (6.2.2.2.3.1)$$

bzw. bei der Benutzung des Wiedemann-Franz'schen Gesetzes die Nordheim-Gorter Regel

$$S^{a+b} = S^a \frac{\rho^a}{\rho^{a+b}} + S^b \frac{\rho^b}{\rho^{a+b}} \quad (6.2.2.2.3.2).$$

In Abbildung 6.2.2.2.3.1 - 6.2.2.2.3.3 sind die Kurven, die den Temperaturverlauf des Seebeckkoeffizienten bei der Überlagerung zweier Wechselwirkungen zeigen, dargestellt. Ausgenommen der Überlagerung der Potential und Phononen-Streuung sehen wir, daß die Kohler und Nordheim-Gorter Regel (abgesehen von ganz tiefen Temperaturen $T \leq 5$ K) für niedrige Temperaturen nur schlecht erfüllt sind (Die relative Abweichung ist für die Überlagerung der Potential- und Magnetischen-Streuung am höchsten, bei 20 K:

Faktor 2.5 für die Kohler-, Faktor 14 für die Nordheim-Gorter Regel). Für hohe Temperaturen erhält man gute Übereinstimmung, vergleicht man die Werte der Rechnung im 7-dimensionalen Unter- raum mit denen, die man mittels Kohler und Nordheim-Gorter Regel erhält (die relative Übereinstimmung beträgt dabei 1% für

$T > 180$ K). Auch bei ganz tiefen Temperaturen ist die Abweichung geringer (bei der Überlagerung mit der Potential-Streuung kleiner .5% bei 5 K).

Bei der Überlagerung von Potential- und Phononen-Streuung, Abbildung 6.2.2.2.3.2, stimmen die Ergebnisse für Kohler und Nordheim-Gorter Regel mit denen der Rechnung für die Überlagerung der Streumechanismen für tiefe Temperaturen besser als .5% überein. Für höhere Temperaturen steigt dann die relative Abweichung auf maximal 8% an (für T zwischen 30 und 60 K) , um für hohe Temperaturen wieder kleiner zu werden (100 K:kleiner 5%). In Abbildung 6.2.2.2.3.4 ist der Seebeckkoeffizient für die Überlagerung aller Wechselwirkungen dargestellt. Es ergibt sich für kleine Temperaturen ein negativer Wert, der vom Beitrag der Potential-Streuung herrührt. Für größere T erfolgt ein Nulldurchgang und im weiteren ein Kurvenverlauf, der maßgeblich durch die Magnetische-Streuung bestimmt ist. Für $T = T_c$ (Wert wieder negativ) erhält man eine Unstetigkeit in der Ableitung des Seebeckkoeffizienten bezüglich der Temperatur- für $T > T_c$ ist das Verhalten linear bezüglich T .

Die Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Kohler und Nordheim-Gorter Regel ist für tiefe Temperaturen sehr gut (5 K:Abweichung kleiner .5%). Für größere T steigt die Abweichung an ($T = 20$ K: Faktor 2.43 für Kohler Regel, 1.29 für Nordheim-Gorter Regel), und wird für höhere Temperaturen zusehends kleiner ($T = 140$ K : Übereinstimmung für Kohler Regel besser als 2%, für Nordheim-Gorter Regel besser als 4%).

Abbildung 6.2.2.3.1: Der Seebeckkoeffizient bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential- und Magnetische-Streuung

— Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
 - - - Kohler Regel; - · - · - Nordheim-Gorter Regel

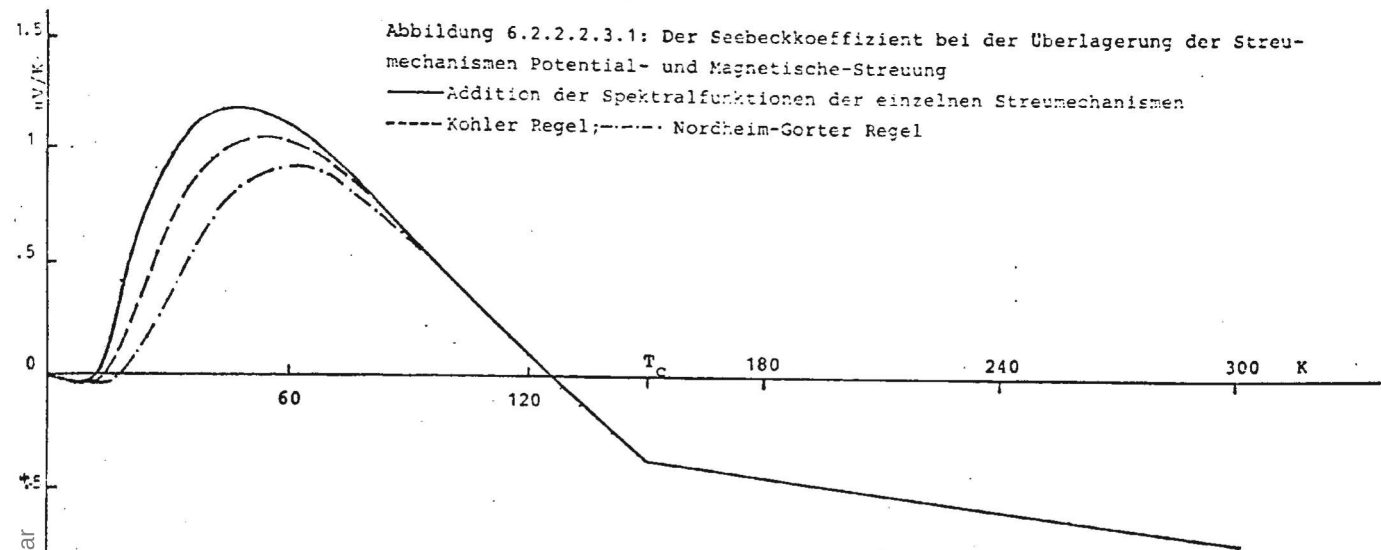


Abbildung 6.2.2.3.2: Der Seebeckkoeffizient bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential- und Phononen-Streuung

— Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
 — Kohler Regel; — Nordheim-Gorter Regel

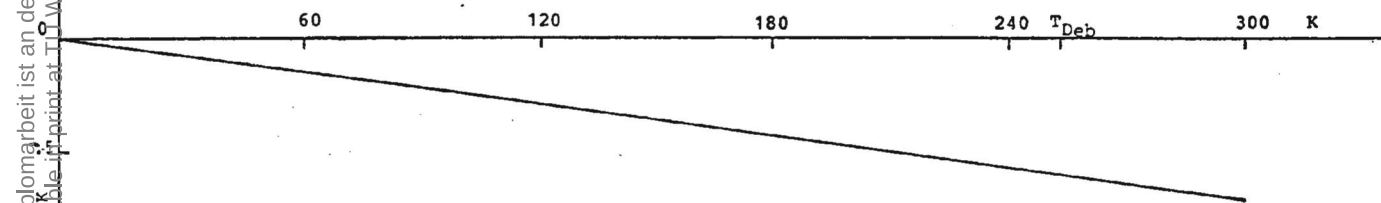


Abbildung 6.2.2.3.3: Der Seebeckkoeffizient bei der Überlagerung der Streumechanismen Magnetische- und Phononen-Streuung

— Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
 - - - Kohler Regel; - · - · - Nordheim-Gorter Regel

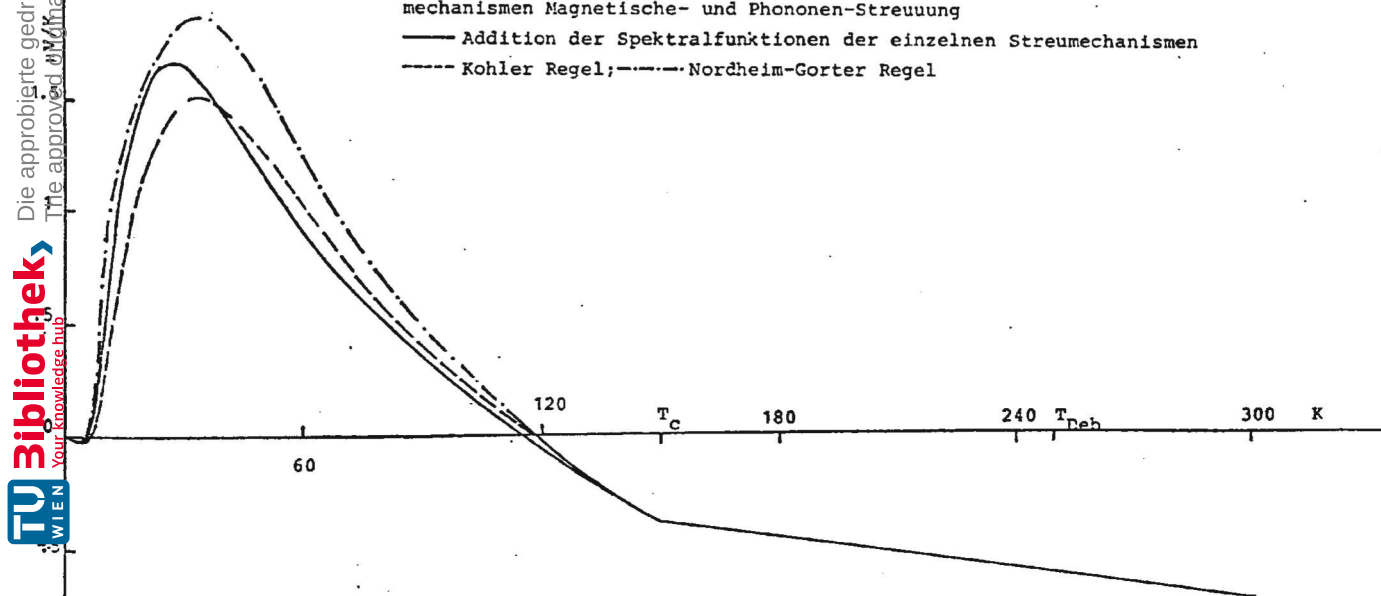
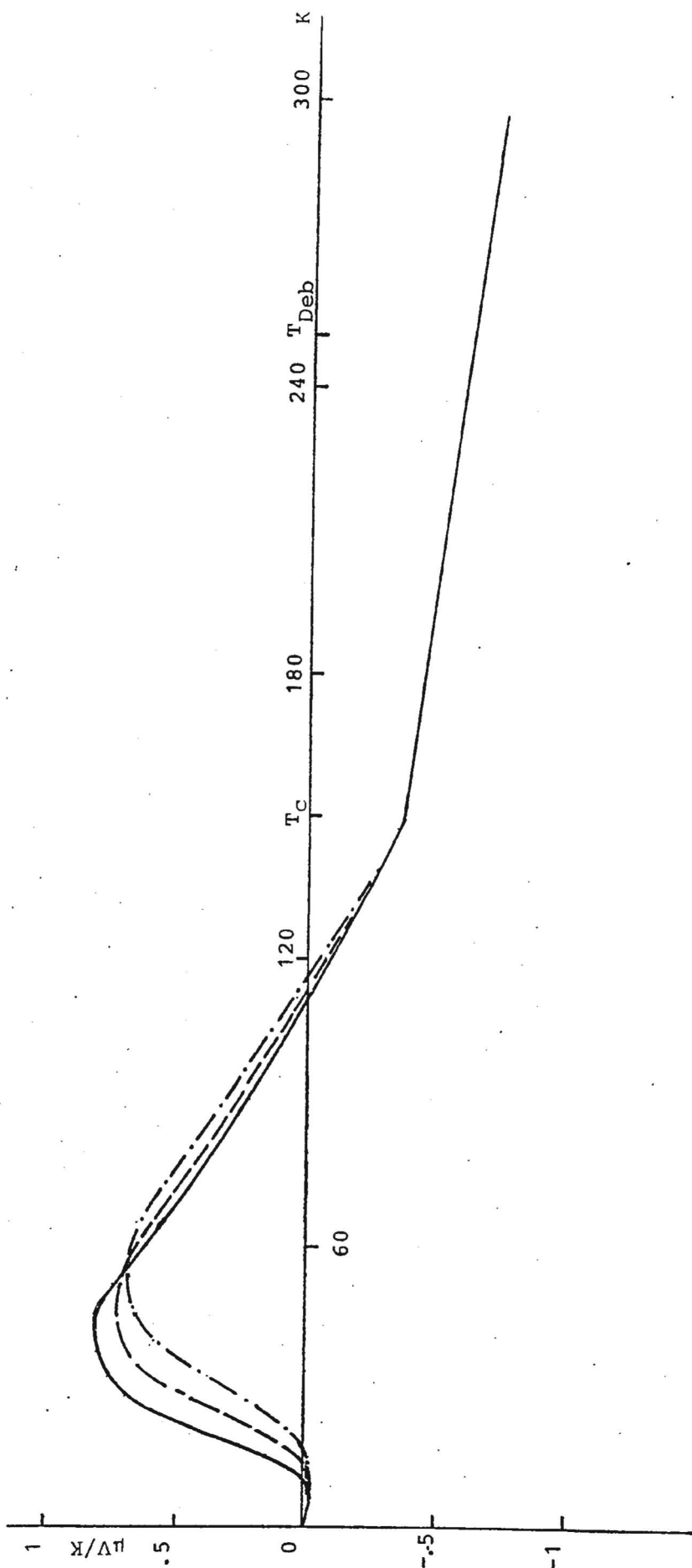


Abbildung 6.2.2.2.3.4: Der Seebeckkoeffizient bei der Überlagerung der Streumechanismen Potential-, Magnetische- und Phononen-Streuung
 — Addition der Spektralfunktionen der einzelnen Streumechanismen
 - - - Kohler Regel; - · - - Nordheim-Gorter Regel



7. Zusammenfassung der Ergebnisse für GdAl_2

7.1 Das Konvergenzverhalten im Rahmen des Variationsverfahrens

In den Abbildungen des Kapitels 6.2.1 befinden sich die Funktionen, die den Temperaturverlauf der Transportkoeffizienten beim Vorhandensein einzelner Streumechanismen für die intermetallische Verbindung GdAl_2 zeigen.

Vergleicht man das Konvergenzverhalten im Rahmen des Variationsverfahrens, also den Verlauf der Werte von niedrigster zur höchsten Ordnung (indiesem Fall 7-dimensionaler Unterraum), so erhält man für die verschiedenen Streumechanismen unterschiedliche Ergebnisse: Liefert die Potential-Streuung bereits in niedrigster Ordnung die Werte für die Transportkoeffizienten, die man auch in jeder höheren Ordnung erhält, so sind bei der Magnetischen- und der Phononen-Streuung deutliche Abweichungen bei niedrigen Temperaturen festzustellen. Im Temperaturbereich zwischen 5 und 80 K, wo die relativen Unterschiede zwischen niedrigster und höchster Ordnung ihr Maximum erreichen, verhalten sich die Koeffizienten eines Streumechanismus ähnlich - hingegen treten beim Vergleich Magnetische-Streuung - Phononen-Streuung deutliche Unterschiede auf. So sind die relativen Abweichungen bei der Magnetischen-Streuung umso höher, je tiefer die Temperaturen liegen, und außerdem wesentlich größer (5 K: elektrischer Widerstand Faktor 3, Wärmewiderstand Faktor 11, Seebeckkoeffizient (Verhältnis $S_{\text{max}}/S_{\text{min}}$) Faktor 9) als bei der Phononen-Streuung, wo die relativen Unterschiede zunächst klein sind (kleiner 5% für den elektrischen Widerstand und Seebeck-

koeffizienten (Verhältnis $S_{\max}/S_{\min}$), 30% für den Wärmewiderstand), und dann ansteigen, um ihr Maximum zwischen 30 und 60 K zu erreichen (elektrischer Widerstand bei 40 K 40%, Wärmewiderstand bei 30 K 40%, Seebeckkoeffizient bei 60 K 18%).

Für hohe Temperaturen wird der Unterschied zwischen niedrigster und höchster Ordnung zusehends kleiner, wobei die Übereinstimmung der Werte bei der Magnetischen-Streuung schneller erreicht wird. Ab 120 K ist für alle Koeffizienten und Streumechanismen die Übereinstimmung zwischen niedrigster und höchster Ordnung besser als 10%.

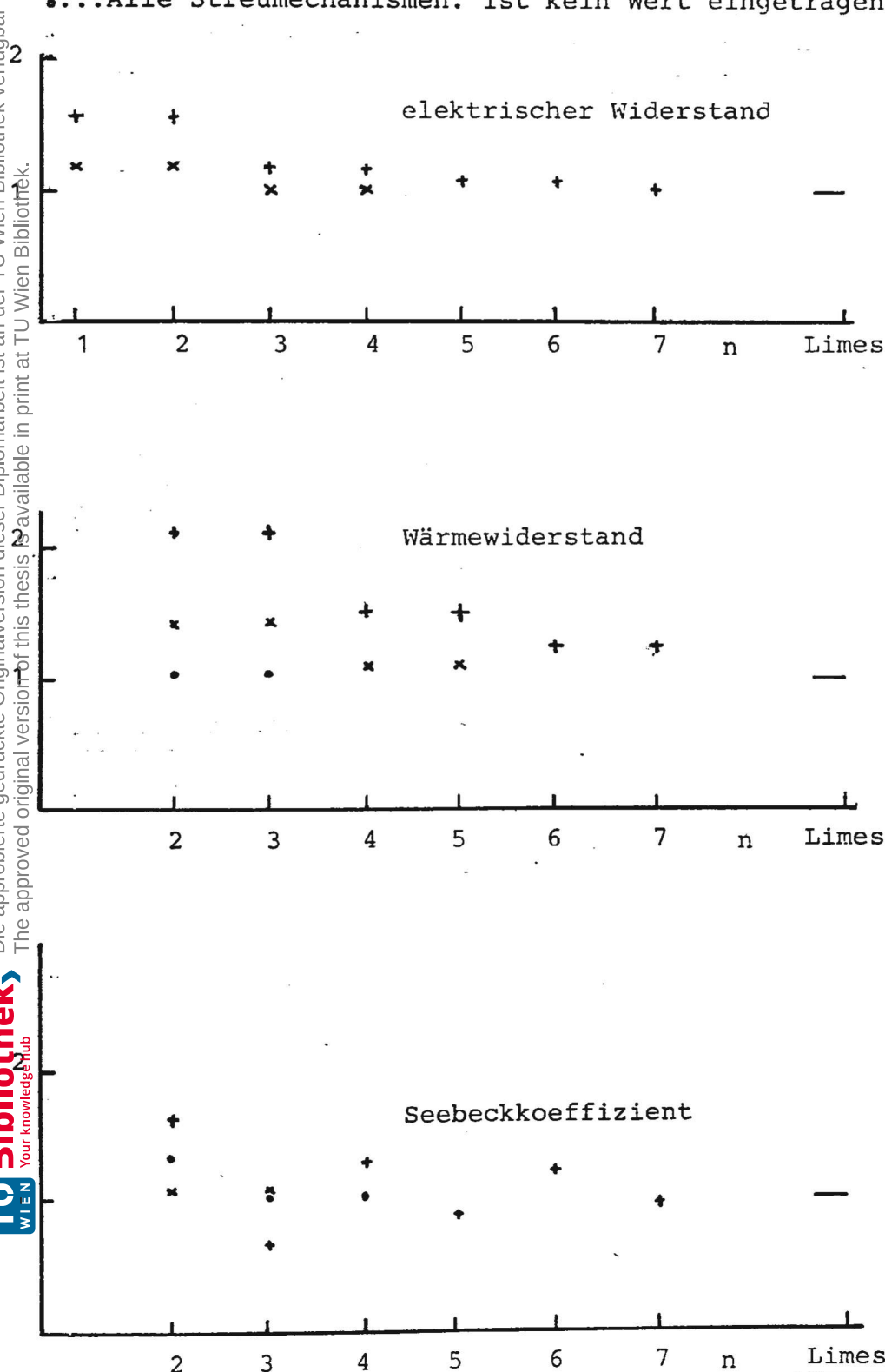
In Abbildung 7.1.1 ist das Konvergenzverhalten für ρ , W und S bei fester Temperatur (20 K) für die einzelnen Streumechanismen (Potential-, Magnetische- und Phononen-Streuung) dargestellt. Weil für die elektrische Leitfähigkeit und die Wärmeleitfähigkeit Maximalbedingungen im Rahmen des Variationsverfahrens bestehen, sieht man in Abbildung 7.1.1 deutlich, daß die relativen Unterschiede zwischen niedrigster und höchster Ordnung für den elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand stets größer 0 sind. Geht man von einem niedrigeren Unterraum zum nächst höheren, so findet man für den elektrischen Widerstand, daß die Werte vom Unterraum der Dimension n zu denen der Dimension $n+1$ sich nur wenig - hingegen vom $n+1$ -ten zum $n+2$ -ten deutlich mehr ändern, wenn n ungerade ist.

Beim Wärmewiderstand, wo im eindimensionalen Unterraum mit der konstanten Versuchsfunktion Ψ (siehe Kapitel 3) kein sinnvoller Wert erhalten wird, gilt obige Aussage für gerade n .

Beim Seebeckkoeffizient, für den im Rahmen des Variationsverfahrens kein Extremalprinzip existiert, ist die Konvergenz nicht

gleichmäßig: Im Fall der Magnetischen-Streuung sind die Werte größer oder kleiner als der nach Wynn-Shanks berechnete Grenzwert.

Abbildung 7.1.1 : Konvergenzverhalten der Transportkoeffizienten im Rahmen des Variationsverfahrens. (Transportkoeffizient des n-ten Unterraumes)/(Grenzwert des Transportkoeffizienten bestimmt nach Wynn-Shank). +...Magnetische-Streuung, x...Phononen-Streuung,Alle Streumechanismen. Ist kein Wert eingetragen, ist er 1.



7.2 Die Leitungsbandaufspaltung

Bei der Magnetischen-Streuung ergibt die Berücksichtigung der Bandaufspaltung, die wegen den mit den Leitungselektronen wechselwirkenden Seltenen Erd Ionen für das Leitungsband auftritt, Terme der Ordnung $\Delta b/\mu$ (Δb ...halbe Bandaufspaltung, μ ...chem. Potential) für die Spektralfunktionen. Dies ist deswegen der Fall, weil bei der Streuung der Leitungselektronen an den Seltenen Erd Ionen inelastische Streuprozesse mit Spinänderung auftreten, die bei der Potential- und Phononen-Streuung verboten sind. (Die Potential-Streuung ermöglicht nur elastische Streuung, die Phononen-Streuung verbietet Spinänderungen, da Phononen spinlose Quasiteilchen sind, und der Spin Erhaltungsgröße ist).

In Kapitel 6.2.1.2 haben wir in den Abbildungen 6.2.1.2.3 und 6.2.1.2.4 den Temperaturverlauf des Seebeckkoeffizienten bei Berücksichtigung der Bandaufspaltung mit Termen $\Delta b/\mu$ und ohne Bandaufspaltung dargestellt. Die starke Abweichung der beiden Funktionen von einander für $T < T_c$ weist auf die Abhängigkeit des Seebeckkoeffizienten von den elektronischen Eigenschaften des Festkörpers hin. In beiden Fällen (mit und ohne Berücksichtigung der Bandaufspaltung) wurde die gleiche Funktion $P_{YY}(\Omega)$ verwendet, die nur von den Eigenschaften des Streumechanismus bestimmt wird.

Berücksichtigt man beim elektrischen Widerstand und beim Wärme-widerstand die Bandaufspaltung mit Termen erster Ordnung in $\Delta b/\mu$, so erhält man keine Änderung des Temperaturverlaufes gegenüber dem Fall ohne Bandaufspaltung.

7.3 Das Wiedemann-Franz Gesetz

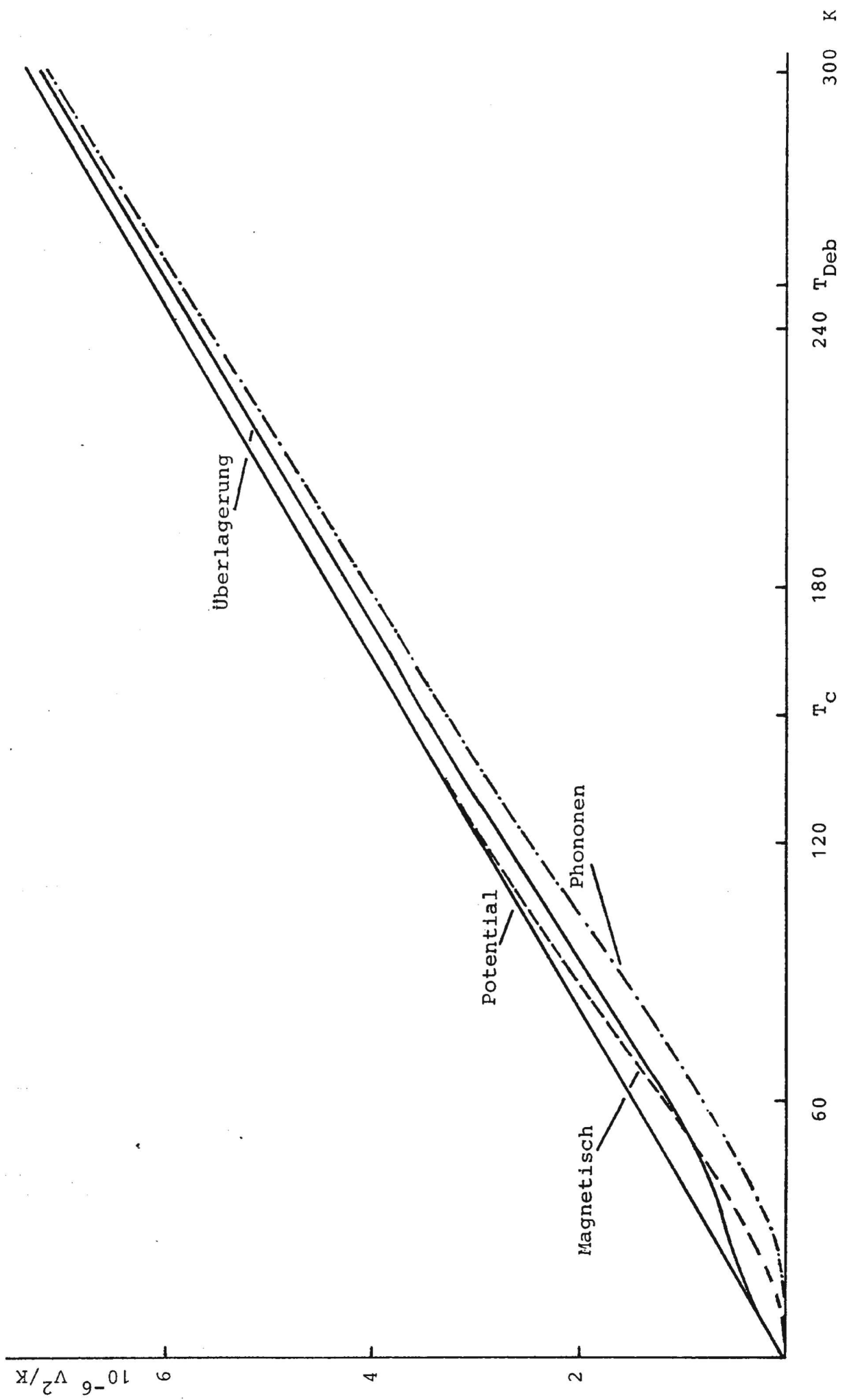
Für den Quotienten aus elektronischem Anteil der Wärmeleitfähigkeit zu elektrischer Leitfähigkeit erhält man im Modell von Drude einen linearen Verlauf bezüglich der Temperatur /15/.

Dieses Verhalten ist als Wiedemann-Franz Gesetz bekannt.

In Abbildung 7.3.1 ist der Verlauf des oben erwähnten Quotienten für die Potential-, die Magnetische- und die Phononen-Streuung dargestellt. Nur die Potential-Streuung zeigt über den gesamten Temperaturbereich lineares Verhalten mit einer Steigung, die als Lorenzzahl bezeichnet wird, von $2.444 \cdot 10^{-8} \text{ V}^2/\text{K}^2$. Bei tiefen Temperaturen erhält man für die Magnetische- und die Phononen-Streuung ein deutliches Abweichen vom Wiedemann-Franz Gesetz- für hohe Temperaturen ($T > 150 \text{ K}$) zeigt sich aber auch bei diesen Streumechanismen lineares Verhalten.

Bei der Überlagerung aller drei Streumechanismen, Abbildung 7.3.1, ergibt sich für tiefe Temperaturen ein Verhalten wie bei der Potential-Streuung, und für hohe ein lineares Verhalten entsprechend der Phononen-Streuung.

Abbildung 7.3.1 : Das Wiedeman-Franz Gesetz für die Potential-, die Magnetische- und die Phononen-
Streuung, sowie für die Überlagerung aller drei Streumechanismen



7.4 Erfüllen der Matthiessen, der Kohler und der Nordheim-Gorter Regel

Die für GdAl_2 durchgeführten Rechnungen bei der Überlagerung der Streumechanismen, Kapitel 6.2.2.2, ergaben für den elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse, die man bei Addition der Spektralfunktionen erhalten hat, mit denen, die mit Hilfe der Matthiessen Regel bestimmt wurden, und zwar nahezu gleich gut für alle Streumechanismen.

So sind die Abweichungen beim elektrischen Widerstand von der Matthiessen Regel für die Überlagerung der Magnetischen- mit der Phononen-Streuung am größten (bei 20 K 7%). Für den Wärmewiderstand ergibt sich eine Abweichung von der Matthiessen Regel von höchstens 5%, für alle möglichen Überlagerungen von Streumechanismen. Dabei ist festzustellen, daß die Übereinstimmung für tiefe Temperaturen (10 K) zunächst besser ist (ausgenommen der Überlagerung der Magnetischen- und der Phononen-Streuung), und dann die Abweichungen ansteigen. Bei 60 K stimmen die Werte für den elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand bei der Überlagerung der Potential- und der Magnetischen-Streuung mit denen aus der Matthiessen Regel erhaltenen besser als 10% überein. Ab 100 K gilt das auch für die Überlagerung aller übrigen Streumechanismen.

Im Vergleich zur Matthiessen Regel weichen die Werte, die man für den Seebeckkoeffizienten bei der Addition der Spektralfunktionen erhält, von denen mit Hilfe der Kohler und Nordheim-Gorter Regel erhaltenen stärker ab.

Dort wo die Potential-Streuung anderen Streumechanismen überlagert wird, ist die Übereinstimmung bei 5 K noch sehr gut (besser als 1%). Für die Überlagerung der Magnetischen- mit der Phononen-Streuung ergeben sich schon hier bemerkenswerte Abweichungen. Im weiteren werden die Abweichungen von der Kohler und Nordheim-Gorter Regel größer, und erreichen bei der Überlagerung der Phononen-Streuung mit der Magnetischen-Streuung die maximalen Werte (bei 20 K den Faktor 2.47 für die Kohler, den Faktor 14 für die Nordheim-Gorter Regel). Für höhere Temperaturen wird die Übereinstimmung mit den beiden Regeln zusehends besser- ab 180 K stimmen die Werte besser als .5% überein. Am besten sind Kohler und Nordheim-Gorter Regel bei der Überlagerung der Potential- mit der Phononen-Streuung erfüllt, weil der Temperaturverlauf des Seebeckkoeffizienten für die einzelnen Streumechanismen gleichartig ist, und die Matthiessen Regel gut erfüllt ist.

7.5 Schlußbetrachtungen

Die Ergebnisse für die einzelnen Streumechanismen in Kapitel 6.2.1 haben für den elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand für die verschiedenen Wechselwirkungen stark unterschiedliche Temperaturverläufe ergeben. Andererseits haben Änderungen der elektronischen Eigenschaften wie die Aufspaltung des Leitfähigkeitsbandes wegen der magnetisch wechselwirkenden Seltenen Erd Ionen bei Berücksichtigung der Ordnung $\Delta b/\mu$ (Δb ...halbe Bandaufspaltung, μ ...chem. Potential) und Vernachlässigung aller höheren keine Auswirkungen auf die beiden Transportkoeffizienten gehabt.

Beim Seebeckkoeffizienten liegen die Dinge anders. Vergleicht man den Temperaturverlauf bei der Potential-Streuung, bei der Magnetischen-Streuung (ohne Bandaufspaltung) und bei der Phononen-Streuung, so stellt man in allen drei Fällen ganz ähnliches Verhalten fest. Für die Potential-Streuung erhält man exakt lineares Verhalten, und für die Magnetische- und die Phononen-Streuung ist der Temperaturverlauf nahezu linear (für tiefe Temperaturen ergeben sich geringfügige Abweichungen). Berücksichtigt man hingegen die Bandaufspaltung in erster Ordnung gegenüber der Fermienergie, so ergibt sich, wie in Kapitel 6.2.1 dargestellt, ein völlig anderer Temperaturverlauf des Seebeckkoeffizienten als ohne Bandaufspaltung. Die elektronischen Eigenschaften des Festkörpers haben großen Einfluß auf den Wert des Seebeckkoeffizienten.

Vergleicht man die bei der Überlagerung aller drei Streumechanismen rechnerisch erhaltenen Ergebnisse für die Transportkoeffizienten mit experimentellen Daten /12/, so ergibt sich für den

elektrischen Widerstand und den Wärmewiderstand gute Übereinstimmung.

Für den Seebeckkoeffizienten zeigt der Temperaturverlauf zwischen dem positiven Maximum und T_c ein zu frühes und zu wenig steiles Abfallen der errechneten Werte. Wegen der starken Abhängigkeit des Seebeckkoeffizienten von den Funktionen, die durch die elektronischen Eigenschaften bestimmt sind, wie z.B. der Zustandsdichte $N(E)$, könnte die Vernachlässigung der Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials in der Rechnung eine Ursache für die schlechte Übereinstimmung in dem oben erwähnten Temperaturbereich darstellen. Trotzdem die Abweichungen im allgemeinen sehr klein - verglichen mit der Fermienergie - sind, sind trotzdem Auswirkungen auf den Temperaturverlauf des Seebeckkoeffizienten zu erwarten.

Literaturliste

- /1/ Messiah, A.;
Quantenmechanik Bd.2. Berlin, New York: De Gruyter Verlag,
(1979)
- /2/ Hittmair, O.;
Lehrbuch der Quantentheorie. München: Thiemig Verlag, (1972)
- /3/ Eder, G.;
Quantenmechanik II. Mannheim: Bibliographisches Institut,
(1978)
- /4/ Madelung, O.;
Festkörpertheorie II (Wechselwirkungen). Berlin: Springer
Verlag, (1972)
- /5/ Ashcroft, N.W., et al.;
Solid State Physics. Philadelphia: Saunders College, (1976)
- /6/ Ziman, J.M.;
Electrons and Phonons (4th edition). Oxford: Carendon Press,
(1960)
- /7/ Froese Fischer, Ch.;
The Hartree Fock Method for Atoms. New York: John Wiley & Sons,
(1976)
- /8/ Coqblin, B.;
The Electronic Structure of Rare Earth Metals and Alloys:
The Magnetic Heavy Rare Earth. London: Academic Press, (1977)
- /9/ Splittorff, O.;
Transport Properties of Metallic Rare Earth Alloys.
University of Copenhagen-Licentiate Thesis, (1976)

/10/ Allen, P.B.;

New Method for solving Boltzmann s equation for electrons in metals. Physical Review B, p. 3725, 17 Number 10, (May 1978)

/11/ Schulze, G.E.R.;

Metallphysik. Wien: Springer Verlag (1974)

/12/ Gratz, E. and Zuckermann, M.J.;

Transport Properties of Rare Earth Intermetallic Compounds. Journal of Magnetism and Magnetic Mat., p.181, 29, (1982)

/13/ Riedelberger, J.S.;

Anpassungen von Modellrechnungen an Messungen der Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstandes von Magnetischen Materialien. Vorbereitungspraktikum TU-Wien (unveröffentlicht), (Oktober 1983)

/14/ Abramowitz, M. and Stegun, I.A. (Editors);

Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover Publications, (1970)

/15/ Adam, G. and Hittmair, O.;

Wärmetheorie. Braunschweig: Vieweg Verlag, (1978)

A.1 Mathematischer Anhang

A.1.1 Bei der Rechnung auftretende Integrale und Reihen und ihre analytischen Lösungen

Wir geben in Anhang A.1.1 eine Zusammenstellung von Funktionen und Reihen, die bei der Berechnung der Transportkoeffizienten aufgetreten sind.

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^n}{e^x - 1} = n! \zeta(n+1) \quad n \geq 1 \quad (\text{A.1.1.1})$$

ζ ... Riemann'sche Zeta-Funktion in

der Definition von /14/

$$\zeta(n) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-n} \quad (\text{A.1.1.2}).$$

$$\int_0^w dx \frac{x^n}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} = n \int_0^w dx \frac{x^{n-1}}{e^x - 1} - \frac{w^n}{e^w - 1} = J_n(w) \quad n \geq 2 \quad (\text{A.1.1.3})$$

$$\int_0^w dx \frac{x^m}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} \frac{w^{m+n}}{m+n} \quad 0 < w < 2\pi \quad (\text{A.1.1.4})$$

B_n ... Bernoulli-Zahlen in der Definition von /14/.

$$\int_0^w dx \frac{x^m}{e^x - 1} = m! \zeta(m+1) - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^m \left(\frac{1}{n}\right)^{m-k+1} \frac{m!}{k!} w^k e^{-wn} \quad (\text{A.1.1.5})$$

$$\frac{1 - e^{-w}}{w} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^n}{(e^{\frac{x}{2} + 1})(e^{\frac{x}{2} - 1})} = \frac{w^n}{n+1} + \sum_{l=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{n!}{(n+1-2l)!} 2^{-n} \eta(2l) = I_n(w) \quad (\text{A.1.1.6})$$

$\eta(1)$... Eta-Funktion in der Definition von /14/

$$\eta(1) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} k^{-1} \quad (\text{A.1.1.7})$$

Die Integrale $I_n(0) = I_n$:

$$n = 2l+1 \quad I_{2l+1} = 0 \quad (\text{A.1.1.8})$$

$$n = 2l \quad I_{2l} = 2 \cdot (2l)! \cdot \eta(2l) \quad (\text{A.1.1.9})$$

A.1.2 Die Funktionen $J_n(x)$

Die Funktionen

$$J_n(x) = \int_0^x d\omega \frac{\omega^n}{(e^\omega - 1)(1 - e^{-\omega})}$$

sind auf den nächsten Seiten für $n \geq 2$ und $n \leq 21$ in tabellierter Form angegeben, und wurden mittels des Unterprogrammes FUNCTION TCINTEG auf 8 Stellen genau berechnet.

X	J(2,X)	J(3,X)
.1000E+00	.99972231E-01	.49979174E-02
.2000E+00	.19977804E+00	.19986711E-01
.3000E+00	.29925202E+00	.44831755E-01
.4000E+00	.39823072E+00	.79469498E-01
.5000E+00	.49655364E+00	.12370669E+00
.6000E+00	.59406415E+00	.17733206E+00
.7000E+00	.69061036E+00	.24007844E+00
.8000E+00	.78604598E+00	.31164530E+00
.9000E+00	.88023102E+00	.39169161E+00
.1000E+01	.97303256E+00	.47984101E+00
.1100E+01	.10643253E+01	.57568532E+00
.1200E+01	.11539922E+01	.67878818E+00
.1300E+01	.12419246E+01	.78868890E+00
.1400E+01	.13280233E+01	.90490639E+00
.1500E+01	.14121979E+01	.10269432E+01
.1600E+01	.14943677E+01	.11542893E+01
.1700E+01	.15744615E+01	.12864266E+01
.1800E+01	.16524177E+01	.14228319E+01
.1900E+01	.17281843E+01	.15629817E+01
.2000E+01	.18017186E+01	.17063547E+01
.2100E+01	.18729870E+01	.18524360E+01
.2200E+01	.19419650E+01	.20007197E+01
.2300E+01	.20086368E+01	.21507118E+01
.2400E+01	.20729946E+01	.23019333E+01
.2500E+01	.21350385E+01	.24539217E+01
.2600E+01	.21947763E+01	.26062339E+01
.2700E+01	.22522224E+01	.27584470E+01
.2800E+01	.23073978E+01	.29101607E+01
.2900E+01	.23603296E+01	.30609976E+01
.3000E+01	.24110501E+01	.32106047E+01
.3100E+01	.24595966E+01	.33586537E+01
.3200E+01	.25060111E+01	.35048417E+01
.3300E+01	.25503391E+01	.36488908E+01
.3400E+01	.25926300E+01	.37905485E+01
.3500E+01	.26329359E+01	.39295872E+01
.3600E+01	.26713113E+01	.40658042E+01
.3700E+01	.27078131E+01	.41990203E+01
.3800E+01	.27424996E+01	.43290799E+01
.3900E+01	.27754305E+01	.44558495E+01
.4000E+01	.28066664E+01	.45792174E+01
.4100E+01	.28362684E+01	.46990922E+01
.4200E+01	.28642979E+01	.48154019E+01
.4300E+01	.28908163E+01	.49280926E+01
.4400E+01	.29158846E+01	.50371279E+01
.4500E+01	.29395634E+01	.51424870E+01
.4600E+01	.29619124E+01	.52441641E+01
.4700E+01	.29829904E+01	.53421669E+01
.4800E+01	.30028554E+01	.54365155E+01
.4900E+01	.30215637E+01	.55272415E+01
.5000E+01	.30391706E+01	.56143866E+01
.5100E+01	.30557297E+01	.56980017E+01
.5200E+01	.30712933E+01	.57781459E+01
.5300E+01	.30859118E+01	.58548854E+01
.5400E+01	.30996341E+01	.59282927E+01
.5500E+01	.31125075E+01	.59984456E+01
.5600E+01	.31245773E+01	.60654265E+01
.5700E+01	.31358873E+01	.61293216E+01
.5800E+01	.31464793E+01	.61902201E+01
.5900E+01	.31563937E+01	.62482135E+01
.6000E+01	.31656688E+01	.63033954E+01

X	J(4,X)	J(5,X)
.2500E+00	.51920936E-02	.97317959E-03
.5000E+00	.41150448E-01	.15410005E-01
.7500E+00	.13674602E+00	.76680865E-01
.1000E+01	.31724405E+00	.23661588E+00
.1250E+01	.60286635E+00	.56032680E+00
.1500E+01	.10079443E+01	.11198757E+01
.1750E+01	.15402273E+01	.19875243E+01
.2000E+01	.22010881E+01	.32292902E+01
.2250E+01	.29858615E+01	.48994303E+01
.2500E+01	.38846509E+01	.70362973E+01
.2750E+01	.48833551E+01	.96598083E+01
.3000E+01	.59648224E+01	.12770558E+02
.3250E+01	.71100250E+01	.16350438E+02
.3500E+01	.82991672E+01	.20364502E+02
.3750E+01	.95126615E+01	.24763728E+02
.4000E+01	.10731932E+02	.29488339E+02
.4250E+01	.11940029E+02	.34471341E+02
.4500E+01	.13122047E+02	.39641965E+02
.4750E+01	.14265374E+02	.44928952E+02
.5000E+01	.15359784E+02	.50263092E+02
.5250E+01	.16397405E+02	.55579646E+02
.5500E+01	.17372588E+02	.60819909E+02
.5750E+01	.18281718E+02	.65932367E+02
.6000E+01	.19122976E+02	.70873334E+02
.6250E+01	.19896078E+02	.75607169E+02
.6500E+01	.20602016E+02	.80106144E+02
.6750E+01	.21242806E+02	.84350046E+02
.7000E+01	.21821249E+02	.88325576E+02
.7250E+01	.22340721E+02	.92025625E+02
.7500E+01	.22804987E+02	.95448480E+02
.7750E+01	.23218042E+02	.98597000E+02
.8000E+01	.23563979E+02	.10147781E+03
.8250E+01	.23906882E+02	.10410055E+03
.8500E+01	.24190745E+02	.10647712E+03
.8750E+01	.24439406E+02	.10862113E+03
.9000E+01	.24656504E+02	.11054725E+03
.9250E+01	.24845447E+02	.11227081E+03
.9500E+01	.25009396E+02	.11380734E+03
.9750E+01	.25151254E+02	.11517229E+03
.1000E+02	.25273668E+02	.11638075E+03
.1025E+02	.25379032E+02	.11744723E+03
.1050E+02	.25469501E+02	.11838555E+03
.1075E+02	.25547000E+02	.11920873E+03
.1100E+02	.25613242E+02	.11992890E+03
.1125E+02	.25669743E+02	.12055728E+03
.1150E+02	.25717838E+02	.12110419E+03
.1175E+02	.25758698E+02	.12157905E+03
.1200E+02	.25793347E+02	.12199040E+03
.1225E+02	.25822678E+02	.12234593E+03
.1250E+02	.25847465E+02	.12265258E+03
.1275E+02	.25868377E+02	.12291652E+03
.1300E+02	.25885993E+02	.12314326E+03
.1325E+02	.25900809E+02	.12333767E+03
.1350E+02	.25913253E+02	.12350407E+03
.1375E+02	.25923690E+02	.12364623E+03
.1400E+02	.25932432E+02	.12376748E+03
.1425E+02	.25939744E+02	.12387074E+03
.1450E+02	.25945853E+02	.12395853E+03
.1475E+02	.25950950E+02	.12403306E+03
.1500E+02	.25955198E+02	.12409624E+03

X	J(6,X)	J(7,X)
.2500E+00	.19458765E-03	.40531555E-04
.5000E+00	.61578910E-02	.25638801E-02
.7500E+00	.45905981E-01	.28643278E-01
.1000E+01	.18854360E+00	.15665329E+00
.1250E+01	.55686735E+00	.57738371E+00
.1500E+01	.13319251E+01	.16538225E+01
.1750E+01	.27489959E+01	.39726983E+01
.2000E+01	.50857202E+01	.83763086E+01
.2250E+01	.86441588E+01	.15966652E+02
.2500E+01	.13729222E+02	.28078571E+02
.2750E+01	.20626157E+02	.46223511E+02
.3000E+01	.29579593E+02	.72009677E+02
.3250E+01	.40776189E+02	.10704727E+03
.3500E+01	.54332237E+02	.15284880E+03
.3750E+01	.70286865E+02	.21073418E+03
.4000E+01	.88600836E+02	.28174906E+03
.4250E+01	.10916037E+03	.36660226E+03
.4500E+01	.13178510E+03	.46562623E+03
.4750E+01	.15623902E+03	.57876092E+03
.5000E+01	.18224324E+03	.70556068E+03
.5250E+01	.20948957E+03	.84522067E+03
.5500E+01	.23765383E+03	.99661928E+03
.5750E+01	.26640826E+03	.11583719E+04
.6000E+01	.29543247E+03	.13288914E+04
.6250E+01	.32442257E+03	.15064521E+04
.6500E+01	.35309841E+03	.16892513E+04
.6750E+01	.38120878E+03	.18754683E+04
.7000E+01	.40853486E+03	.20633167E+04
.7250E+01	.43489193E+03	.22510890E+04
.7500E+01	.46012973E+03	.24371930E+04
.7750E+01	.48413153E+03	.26201801E+04
.8000E+01	.50681244E+03	.27987640E+04
.8250E+01	.52811689E+03	.29718336E+04
.8500E+01	.54801574E+03	.31384570E+04
.8750E+01	.56650310E+03	.32978811E+04
.9000E+01	.58359306E+03	.34495257E+04
.9250E+01	.59931645E+03	.35929736E+04
.9500E+01	.61371770E+03	.37279583E+04
.9750E+01	.62685194E+03	.38543496E+04
.1000E+02	.63878231E+03	.39721376E+04
.1025E+02	.64957762E+03	.40814172E+04
.1050E+02	.65931021E+03	.41823715E+04
.1075E+02	.66805421E+03	.42752567E+04
.1100E+02	.67588399E+03	.43603873E+04
.1125E+02	.68287294E+03	.44381226E+04
.1150E+02	.68909249E+03	.45088546E+04
.1175E+02	.69461132E+03	.45729971E+04
.1200E+02	.69949480E+03	.46309758E+04
.1225E+02	.70380459E+03	.46832208E+04
.1250E+02	.70759841E+03	.47301591E+04
.1275E+02	.71092985E+03	.47722095E+04
.1300E+02	.71384839E+03	.48097776E+04
.1325E+02	.71639943E+03	.48432527E+04
.1350E+02	.71862438E+03	.48730051E+04
.1375E+02	.72056087E+03	.48993841E+04
.1400E+02	.72224290E+03	.49227172E+04
.1425E+02	.72370105E+03	.49433092E+04
.1450E+02	.72496274E+03	.49614423E+04
.1475E+02	.72605248E+03	.49773763E+04
.1500E+02	.72699204E+03	.49913493E+04

X	J(8,X)	J(9,X)
.5000E+00	.10981704E-02	.48022729E-03
.1000E+01	.13396433E+00	.11700243E+00
.1500E+01	.21153368E+01	.27648974E+01
.2000E+01	.14227877E+02	.24716632E+02
.2500E+01	.59312062E+02	.12827120E+03
.3000E+01	.18139615E+03	.46842896E+03
.3500E+01	.44591673E+03	.13356417E+04
.4000E+01	.93148002E+03	.31673967E+04
.4500E+01	.17153187E+04	.65125757E+04
.5000E+01	.28572838E+04	.11952719E+05
.5500E+01	.43872972E+04	.20001613E+05
.6000E+01	.62993229E+04	.31011073E+05
.6500E+01	.85524449E+04	.45106040E+05
.7000E+01	.11077659E+05	.62160852E+05
.7500E+01	.13787984E+05	.81816482E+05
.8000E+01	.16589426E+05	.10352950E+06
.8500E+01	.19390819E+05	.12663921E+06
.9000E+01	.22111375E+05	.15043920E+06
.9500E+01	.24685466E+05	.17424230E+06
.1000E+02	.27064781E+05	.19743173E+06
.1050E+02	.29218291E+05	.21949537E+06
.1100E+02	.31130668E+05	.24004324E+06
.1150E+02	.32799758E+05	.25881047E+06
.1200E+02	.34233655E+05	.27564924E+06
.1250E+02	.35447766E+05	.29051333E+06
.1300E+02	.36462154E+05	.30343891E+06
.1350E+02	.37299298E+05	.31452417E+06
.1400E+02	.37982332E+05	.32390994E+06
.1450E+02	.38533754E+05	.33176268E+06
.1500E+02	.38974556E+05	.33826030E+06
.1550E+02	.39323700E+05	.34356129E+06
.1600E+02	.39597873E+05	.34789671E+06
.1650E+02	.39811443E+05	.35136496E+06
.1700E+02	.39976548E+05	.35412868E+06
.1750E+02	.40103278E+05	.35631337E+06
.1800E+02	.40199901E+05	.35802731E+06
.1850E+02	.40273101E+05	.35936237E+06
.1900E+02	.40328226E+05	.36039529E+06
.1950E+02	.40369501E+05	.36118934E+06
.2000E+02	.40400241E+05	.36179607E+06
.2050E+02	.40423016E+05	.36225699E+06
.2100E+02	.40439809E+05	.36260523E+06
.2150E+02	.40452134E+05	.36286696E+06
.2200E+02	.40461138E+05	.36306270E+06
.2250E+02	.40467690E+05	.36320838E+06
.2300E+02	.40472437E+05	.36331632E+06
.2350E+02	.40475864E+05	.36339594E+06
.2400E+02	.40478328E+05	.36345444E+06
.2450E+02	.40480094E+05	.36349724E+06
.2500E+02	.40481356E+05	.36352844E+06
.2550E+02	.40482253E+05	.36355109E+06
.2600E+02	.40482890E+05	.36356749E+06
.2650E+02	.40483341E+05	.36357931E+06
.2700E+02	.40483659E+05	.36358781E+06
.2750E+02	.40483883E+05	.36359391E+06
.2800E+02	.40484040E+05	.36359826E+06
.2850E+02	.40484149E+05	.36360136E+06
.2900E+02	.40484226E+05	.36360356E+06
.2950E+02	.40484279E+05	.36360512E+06
.3000E+02	.40484317E+05	.36360622E+06

X	J(10,X)	J(11,X)
.5000E+00	.21335358E-03	.95978838E-04
.1000E+01	.10384517E+00	.93343153E-01
.1500E+01	.36740658E+01	.49460294E+01
.2000E+01	.43678137E+02	.78229925E+02
.2500E+01	.28240480E+03	.63051641E+03
.3000E+01	.12326011E+04	.32914401E+04
.3500E+01	.40810516E+04	.12664808E+05
.4000E+01	.11001152E+05	.38845051E+05
.4500E+01	.25293459E+05	.99977469E+05
.5000E+01	.51233040E+05	.22377397E+06
.5500E+01	.93607307E+05	.44702406E+06
.6000E+01	.15703956E+06	.81272411E+06
.6500E+01	.24526095E+06	.13652004E+07
.7000E+01	.36049842E+06	.21442014E+07
.7500E+01	.50309995E+06	.31791837E+07
.8000E+01	.67144841E+06	.44848987E+07
.8500E+01	.86214705E+06	.60590028E+07
.9000E+01	.10704111E+07	.78819315E+07
.9500E+01	.12905764E+07	.99186318E+07
.1000E+02	.15166362E+07	.12123035E+08
.1050E+02	.17427324E+07	.14440408E+08
.1100E+02	.19635524E+07	.16813902E+08
.1150E+02	.21746057E+07	.19187764E+08
.1200E+02	.23723792E+07	.21510989E+08
.1250E+02	.25543822E+07	.23739831E+08
.1300E+02	.27191043E+07	.25839297E+08
.1350E+02	.28659099E+07	.27783722E+08
.1400E+02	.29948968E+07	.29556560E+08
.1450E+02	.31067381E+07	.31149604E+08
.1500E+02	.32025254E+07	.32561825E+08
.1550E+02	.32836250E+07	.33798013E+08
.1600E+02	.33515544E+07	.34867385E+08
.1650E+02	.34078813E+07	.35782246E+08
.1700E+02	.34541470E+07	.36556607E+08
.1750E+02	.34918111E+07	.37206184E+08
.1800E+02	.35222160E+07	.37745596E+08
.1850E+02	.35465668E+07	.38189768E+08
.1900E+02	.35659229E+07	.38552506E+08
.1950E+02	.35811996E+07	.38846431E+08
.2000E+02	.35931755E+07	.39082833E+08
.2050E+02	.36025039E+07	.39271634E+08
.2100E+02	.36097258E+07	.39421409E+08
.2150E+02	.36152844E+07	.39539469E+08
.2200E+02	.36195392E+07	.39631964E+08
.2250E+02	.36227789E+07	.39704009E+08
.2300E+02	.36252331E+07	.39759814E+08
.2350E+02	.36270834E+07	.39802811E+08
.2400E+02	.36284719E+07	.39835771E+08
.2450E+02	.36295092E+07	.39860915E+08
.2500E+02	.36302810E+07	.39880005E+08
.2550E+02	.36308527E+07	.39894435E+08
.2600E+02	.36312747E+07	.39905296E+08
.2650E+02	.36315849E+07	.39913436E+08
.2700E+02	.36318122E+07	.39919512E+08
.2750E+02	.36319781E+07	.39924031E+08
.2800E+02	.36320988E+07	.39927379E+08
.2850E+02	.36321864E+07	.39929850E+08
.2900E+02	.36322496E+07	.39931669E+08
.2950E+02	.36322952E+07	.39933002E+08
.3000E+02	.36323280E+07	.39933977E+08

X	J(12,X)	J(13,X)
.5000E+00	.43615106E-04	.19985666E-04
.1000E+01	.84767182E-01	.77632464E-01
.1500E+01	.67285412E+01	.92328995E+01
.2000E+01	.14163923E+03	.25873944E+03
.2500E+01	.14236788E+04	.32444734E+04
.3000E+01	.88934945E+04	.24263662E+05
.3500E+01	.39794466E+05	.12631587E+06
.4000E+01	.13897886E+06	.50259703E+06
.4500E+01	.40075037E+06	.16247435E+07
.5000E+01	.99209910E+06	.44520028E+07
.5500E+01	.21691704E+07	.10662602E+08
.6000E+01	.42788163E+07	.22840222E+08
.6500E+01	.77404619E+07	.44541223E+08
.7000E+01	.13008869E+08	.80187736E+08
.7500E+01	.20523589E+08	.13477149E+09
.8000E+01	.30654246E+08	.21339937E+09
.8500E+01	.43651508E+08	.32074951E+09
.9000E+01	.59611881E+08	.46052601E+09
.9500E+01	.78461226E+08	.63499902E+09
.1000E+02	.99958095E+08	.84469673E+09
.1050E+02	.12371469E+09	.10882863E+10
.1100E+02	.14923091E+09	.13626474E+10
.1150E+02	.17593576E+09	.16631141E+10
.1200E+02	.20323057E+09	.19838402E+10
.1250E+02	.23052915E+09	.23182363E+10
.1300E+02	.25729135E+09	.26594216E+10
.1350E+02	.28304811E+09	.30006481E+10
.1400E+02	.30741725E+09	.33356593E+10
.1450E+02	.33011057E+09	.36589645E+10
.1500E+02	.35093334E+09	.39660196E+10
.1550E+02	.36977805E+09	.42533177E+10
.1600E+02	.38661394E+09	.45183996E+10
.1650E+02	.40147428E+09	.47597992E+10
.1700E+02	.41444265E+09	.49769428E+10
.1750E+02	.42563950E+09	.51700175E+10
.1800E+02	.43520979E+09	.53398257E+10
.1850E+02	.44331226E+09	.54876380E+10
.1900E+02	.45011048E+09	.56150537E+10
.1950E+02	.45576590E+09	.57238762E+10
.2000E+02	.46043267E+09	.58160067E+10
.2050E+02	.46425409E+09	.58933581E+10
.2100E+02	.46736047E+09	.59577883E+10
.2150E+02	.46986806E+09	.60110518E+10
.2200E+02	.47187886E+09	.60547680E+10
.2250E+02	.47348110E+09	.60904025E+10
.2300E+02	.47475007E+09	.61192591E+10
.2350E+02	.47574928E+09	.61424807E+10
.2400E+02	.47653172E+09	.61610555E+10
.2450E+02	.47714116E+09	.61758280E+10
.2500E+02	.47761344E+09	.61875118E+10
.2550E+02	.47797763E+09	.61967037E+10
.2600E+02	.47825715E+09	.62038963E+10
.2650E+02	.47847073E+09	.62095022E+10
.2700E+02	.47863320E+09	.62138464E+10
.2750E+02	.47875628E+09	.62171989E+10
.2800E+02	.47884914E+09	.62197747E+10
.2850E+02	.47891893E+09	.62217455E+10
.2900E+02	.47897119E+09	.62232472E+10
.2950E+02	.47901017E+09	.62243870E+10
.3000E+02	.47903915E+09	.62252488E+10

X	J(14,X)	J(15,X)
.5000E+00	.92223354E-05	.42810564E-05
.1000E+01	.71604185E-01	.66443708E-01
.1500E+01	.12761470E+02	.17747502E+02
.2000E+01	.47616879E+03	.68195055E+03
.2500E+01	.74512961E+04	.17225162E+05
.3000E+01	.66732795E+05	.18479154E+06
.3500E+01	.40435383E+06	.13036508E+07
.4000E+01	.18338121E+07	.67412843E+07
.4500E+01	.66493772E+07	.27428844E+08
.5000E+01	.20178532E+08	.92225829E+08
.5500E+01	.52971561E+08	.26550417E+09
.6000E+01	.12330827E+09	.67200990E+09
.6500E+01	.25942269E+09	.15262000E+10
.7000E+01	.50071889E+09	.31603006E+10
.7500E+01	.89734766E+09	.60435001E+10
.8000E+01	.15078185E+10	.10784852E+11
.8500E+01	.23947404E+10	.18114784E+11
.9000E+01	.36191957E+10	.28844026E+11
.9500E+01	.52345417E+10	.43803217E+11
.1000E+02	.72805486E+10	.63770329E+11
.1050E+02	.97787019E+10	.89395415E+11
.1100E+02	.12729279E+11	.12113269E+12
.1150E+02	.16110502E+11	.15918865E+12
.1200E+02	.19879746E+11	.20349229E+12
.1250E+02	.23976524E+11	.25369001E+12
.1300E+02	.28326777E+11	.30916462E+12
.1350E+02	.32847895E+11	.36907477E+12
.1400E+02	.37453918E+11	.43240934E+12
.1450E+02	.42060427E+11	.49805041E+12
.1500E+02	.46588731E+11	.56483811E+12
.1550E+02	.50969146E+11	.63163197E+12
.1600E+02	.55143222E+11	.69736401E+12
.1650E+02	.59064961E+11	.76108097E+12
.1700E+02	.62701104E+11	.82197393E+12
.1750E+02	.66030652E+11	.87939557E+12
.1800E+02	.69043802E+11	.93286573E+12
.1850E+02	.71740491E+11	.98206724E+12
.1900E+02	.74128722E+11	.10268340E+13
.1950E+02	.76222819E+11	.10671335E+13
.2000E+02	.78041742E+11	.11030462E+13
.2050E+02	.79607531E+11	.11347433E+13
.2100E+02	.80943955E+11	.11624651E+13
.2150E+02	.82075374E+11	.11864997E+13
.2200E+02	.83025836E+11	.12071652E+13
.2250E+02	.83818395E+11	.12247935E+13
.2300E+02	.84474626E+11	.12397175E+13
.2350E+02	.85014315E+11	.12522608E+13
.2400E+02	.85455292E+11	.12627302E+13
.2450E+02	.85813383E+11	.12714108E+13
.2500E+02	.86102440E+11	.12785624E+13
.2550E+02	.86333442E+11	.12844183E+13
.2600E+02	.86519631E+11	.12891851E+13
.2650E+02	.86666673E+11	.12930435E+13
.2700E+02	.86782835E+11	.12961497E+13
.2750E+02	.86874154E+11	.12986372E+13
.2800E+02	.86945605E+11	.13006193E+13
.2850E+02	.87001257E+11	.13021908E+13
.2900E+02	.87044414E+11	.13034311E+13
.2950E+02	.87077739E+11	.13044055E+13
.3000E+02	.87103367E+11	.13051677E+13

X	J(16,X)	J(17,X)
.5000E+00	.19975208E-05	.93621059E-06
.1000E+01	.61976375E-01	.58071422E-01
.1500E+01	.24612736E+02	.34850794E+02
.2000E+01	.16423715E+04	.30729115E+04
.2500E+01	.40043779E+05	.93545548E+05
.3000E+01	.51470682E+06	.14408958E+07
.3500E+01	.42286981E+07	.13789367E+08
.4000E+01	.24940451E+08	.92780926E+08
.4500E+01	.11390742E+09	.47578083E+09
.5000E+01	.42451621E+09	.19659752E+10
.5500E+01	.13407766E+10	.68144196E+10
.6000E+01	.36915701E+10	.20417065E+11
.6500E+01	.90548399E+10	.54109161E+11
.7000E+01	.20126202E+11	.12915321E+12
.7500E+01	.41093098E+11	.28168552E+12
.8000E+01	.77930411E+11	.56798571E+12
.8500E+01	.13852669E+12	.10690841E+13
.9000E+01	.23256661E+12	.18935492E+13
.9500E+01	.37113228E+12	.31773805E+13
.1000E+02	.56603509E+12	.50802761E+13
.1050E+02	.82893915E+12	.77781100E+13
.1100E+02	.11703759E+13	.11452022E+14
.1150E+02	.15987694E+13	.16275212E+14
.1200E+02	.21195923E+13	.22398800E+14
.1250E+02	.27347490E+13	.29938390E+14
.1300E+02	.34422541E+13	.38962835E+14
.1350E+02	.42362283E+13	.49486424E+14
.1400E+02	.51071987E+13	.61465235E+14
.1450E+02	.60426559E+13	.74797893E+14
.1500E+02	.70277982E+13	.89330461E+14
.1550E+02	.80463817E+13	.10486492E+15
.1600E+02	.90815963E+13	.12116990E+15
.1650E+02	.10116895E+14	.13799317E+15
.1700E+02	.11136720E+14	.15507428E+15
.1750E+02	.12127087E+14	.17215663E+15
.1800E+02	.13076010E+14	.18899806E+15
.1850E+02	.13973755E+14	.20537960E+15
.1900E+02	.14812945E+14	.22111185E+15
.1950E+02	.15588525E+14	.23603903E+15
.2000E+02	.16297621E+14	.25004088E+15
.2050E+02	.16939317E+14	.26303243E+15
.2100E+02	.17514384E+14	.27496232E+15
.2150E+02	.18024972E+14	.28580969E+15
.2200E+02	.18474313E+14	.29558039E+15
.2250E+02	.18866424E+14	.30430256E+15
.2300E+02	.19205839E+14	.31202216E+15
.2350E+02	.19497378E+14	.31879854E+15
.2400E+02	.19745947E+14	.32470037E+15
.2450E+02	.19956381E+14	.32980191E+15
.2500E+02	.20133324E+14	.33417993E+15
.2550E+02	.20281136E+14	.33791106E+15
.2600E+02	.20403840E+14	.34106974E+15
.2650E+02	.20505090E+14	.34372672E+15
.2700E+02	.20588152E+14	.34594793E+15
.2750E+02	.20655913E+14	.34779385E+15
.2800E+02	.20710896E+14	.34931912E+15
.2850E+02	.20755278E+14	.35057251E+15
.2900E+02	.20790924E+14	.35159701E+15
.2950E+02	.20819415E+14	.35243011E+15
.3000E+02	.20842081E+14	.35310422E+15

X	J(18,X)	J(19,X)
.5000E+00	.44051611E-06	.20799673E-06
.1000E+01	.54629013E-01	.51571610E-01
.1500E+01	.49148027E+02	.69556799E+02
.2000E+01	.57733360E+04	.10686604E+05
.2500E+01	.21946420E+06	.51681969E+06
.3000E+01	.40515702E+07	.11436799E+08
.3500E+01	.45170263E+08	.14861520E+09
.4000E+01	.34681047E+09	.13018794E+10
.4500E+01	.19972945E+10	.84215367E+10
.5000E+01	.91527516E+10	.42808354E+11
.5500E+01	.34826632E+11	.17885340E+12
.6000E+01	.11358398E+12	.63511644E+12
.6500E+01	.32534604E+12	.19667609E+13
.7000E+01	.83423526E+12	.54191593E+13
.7500E+01	.19443223E+13	.13501158E+14
.8000E+01	.41702071E+13	.30812487E+14
.8500E+01	.83152653E+13	.65110454E+14
.9000E+01	.15545441E+14	.12853268E+15
.9500E+01	.27443169E+14	.23882007E+15
.1000E+02	.46025812E+14	.42032679E+15
.1050E+02	.73715493E+14	.70458061E+15
.1100E+02	.11325444E+15	.11301782E+16
.1150E+02	.16756659E+15	.17418670E+16
.1200E+02	.23957566E+15	.25887700E+16
.1250E+02	.33199645E+15	.37218270E+16
.1300E+02	.44712073E+15	.51906478E+16
.1350E+02	.58662029E+15	.70400577E+16
.1400E+02	.75136789E+15	.93066722E+16
.1450E+02	.94143185E+15	.12015840E+17
.1500E+02	.11558337E+16	.15179250E+17
.1550E+02	.13927711E+16	.18793435E+17
.1600E+02	.16496014E+16	.22839277E+17
.1650E+02	.19229957E+16	.27282548E+17
.1700E+02	.22091097E+16	.32075402E+17
.1750E+02	.25037750E+16	.37158645E+17
.1800E+02	.28026956E+16	.42464574E+17
.1850E+02	.31016354E+16	.47920141E+17
.1900E+02	.33965845E+16	.53450190E+17
.1950E+02	.36838965E+16	.58980558E+17
.2000E+02	.39603923E+16	.64440840E+17
.2050E+02	.42234279E+16	.69766702E+17
.2100E+02	.44709281E+16	.74901649E+17
.2150E+02	.47013897E+16	.79798224E+17
.2200E+02	.49138579E+16	.84418645E+17
.2250E+02	.51078833E+16	.88734938E+17
.2300E+02	.52634635E+16	.92728624E+17
.2350E+02	.54409765E+16	.96390061E+17
.2400E+02	.55811099E+16	.99717524E+17
.2450E+02	.57047907E+16	.10271612E+18
.2500E+02	.58131182E+16	.10539661E+18
.2550E+02	.59073037E+16	.10777423E+18
.2600E+02	.59886175E+16	.10986755E+18
.2650E+02	.60583437E+16	.11169741E+18
.2700E+02	.61177443E+16	.11328597E+18
.2750E+02	.61680310E+16	.11465593E+18
.2800E+02	.62103451E+16	.11582983E+18
.2850E+02	.62457429E+16	.11682955E+18
.2900E+02	.62751883E+16	.11767568E+18
.2950E+02	.62995494E+16	.11838825E+18
.3000E+02	.63195982E+16	.11898453E+18

X	J(20,X)	J(21,X)
.5000E+00	.98515960E-07	.46790669E-07
.1000E+01	.48838079E-01	.46379574E-01
.1500E+01	.96759981E+02	.14062076E+03
.2000E+01	.20595479E+05	.39076662E+05
.2500E+01	.12211461E+07	.28939649E+07
.3000E+01	.32395605E+08	.92046736E+08
.3500E+01	.49037969E+09	.16265412E+10
.4000E+01	.49050226E+10	.18542811E+11
.4500E+01	.35647097E+11	.15141350E+12
.5000E+01	.20103403E+12	.94750023E+12
.5500E+01	.92242781E+12	.47753634E+13
.6000E+01	.35672313E+13	.20115273E+14
.6500E+01	.11945354E+14	.72853006E+14
.7000E+01	.35377274E+14	.23195763E+15
.7500E+01	.94240786E+14	.66083997E+15
.8000E+01	.22892111E+15	.17089892E+16
.8500E+01	.51280169E+15	.40593364E+16
.9000E+01	.10692821E+16	.89433132E+16
.9500E+01	.20918470E+16	.18426613E+17
.1000E+02	.38651062E+16	.35754489E+17
.1050E+02	.67837413E+16	.65728039E+17
.1100E+02	.11365695E+17	.11506582E+18
.1150E+02	.18255947E+17	.19269241E+18
.1200E+02	.28217916E+17	.30989061E+18
.1250E+02	.42110844E+17	.48026183E+18
.1300E+02	.60853283E+17	.71944948E+18
.1350E+02	.85374660E+17	.10446175E+19
.1400E+02	.11655862E+18	.14736918E+19
.1450E+02	.15518305E+18	.20244142E+19
.1500E+02	.20186233E+18	.27132794E+19
.1550E+02	.25699716E+18	.35544429E+19
.1600E+02	.32073654E+18	.45586962E+19
.1650E+02	.39295535E+18	.57325990E+19
.1700E+02	.47324907E+18	.70778432E+19
.1750E+02	.56094576E+18	.85909022E+19
.1800E+02	.65513379E+18	.10262988E+20
.1850E+02	.75470255E+18	.12080317E+20
.1900E+02	.85839251E+18	.14024646E+20
.1950E+02	.96485060E+18	.16074053E+20
.2000E+02	.10726869E+19	.18203847E+20
.2050E+02	.11805287E+19	.20387617E+20
.2100E+02	.12870699E+19	.22598266E+20
.2150E+02	.13911113E+19	.24809018E+20
.2200E+02	.14915933E+19	.26994333E+20
.2250E+02	.15876177E+19	.29130674E+20
.2300E+02	.16784603E+19	.31197116E+20
.2350E+02	.17635748E+19	.33175780E+20
.2400E+02	.18425882E+19	.35052088E+20
.2450E+02	.19152906E+19	.36814856E+20
.2500E+02	.19816197E+19	.38456237E+20
.2550E+02	.20416424E+19	.39971551E+20
.2600E+02	.20955340E+19	.41359008E+20
.2650E+02	.21435572E+19	.42619379E+20
.2700E+02	.21860416E+19	.43755614E+20
.2750E+02	.22233644E+19	.44772452E+20
.2800E+02	.22559325E+19	.45676029E+20
.2850E+02	.22841678E+19	.46473504E+20
.2900E+02	.23084938E+19	.47172722E+20
.2950E+02	.23293253E+19	.47781905E+20
.3000E+02	.23470603E+19	.48309402E+20

A.2 Rechenprogramme

A.2.1 Programme zur Berechnung der Transportkoeffizienten

Das Hauptprogramm PROGRAM COTRACO (A.2.1.1) dient zur Berechnung der Transportkoeffizienten elektrischer Widerstand, Seebeckkoeffizient und Wärmeleitfähigkeit bei zueinander äquidistant liegenden Temperaturen.

Für jede Temperatur werden die Daten der Spektralfunktionen von den Dateien TAPE 53 - 58 geholt, und zusammen mit den Inputdaten den Programmpaketen AS (A.2.1.2) und TC (A.2.1.3) zur Verfügung gestellt.

Seitenverzeichnis für Anhang A.2

A.2.1 Programme zur Berechnung der Transport-	
koeffizienten	140
A.2.1.1 Das PROGRAM COTRACO	141
A.2.1.2 Das Programmpaket AS	157
A.2.1.3 Das Programmpaket TC	182
A.2.2 Programme zur Berechnung der Spektral-	
funktionen	229
A.2.2.1 Das Programmpaket CMS	229

A.2.1.1 Das PROGRAM COTRACO

Input : $\bar{v}(0)$, $\bar{v}'(0)$, Zahl der Wechselwirkungen (INTACT), Grad der Polynomentwicklung (IDIMEN), Ende der Polynomentwicklung (WENDPOL), Stützstellenabstand für die numerische Integration (DELTA), Anfangstemperatur (TINIT), Temperaturschrittweite (TSTEP), Zahl der Temperaturschritte (NUMSTEP), Dimension des Funktionenraumes -1 (IDIMEN), Outputsteuerung (IPRINT), Tabellenkennzahl (KENNTAB) - für diesen Unter-
raum wird am Ende des Programmlaufes eine Tabelle ausgegeben.

Zweck: Durchführen der Rechnung für die Transportkoeffizienten. Daten der Spektralfunktionen von den Tapes 53-58 lesen und samt Inputdaten den Programmpaketen AS und TC zur Verfügung stellen. Ergebnisse der Transportkoeffizienten auf bereitgestellte Dateien (sequentiell) schreiben.

Lesen von Inputfile:

Mass ($\langle v_{\text{ref}} \rangle N$) / Dichte, Mass ($\langle v_{\text{ref}} \rangle N$)' / Dichte,
Zahl der Wechselwirkungen, Grad der Polynom-
entwicklungen, Ende der Polynomentwicklung,
Abstand der Stützstellen bei numerischer Integration,
Anfangstemperatur, Temperaturschrittweite, Zahl
der Temperaturschritte, Dimension des Fun-
ktionsraumes, Outputsteuerung, Tabellen-
zahl, Textzeile

Is. Zahl der
Wechselwirkungen

Lesen der Wechselwirk-
ungsstärken vom Input File

Ausgabe des Inputs (vom Input File):

(auf TAPE 6)

Datum, Zeit, Text;

Stärken der Streupotentiale;

Konstanten der Bandstruktur;

Variablen zur Temperaturkontrolle;

Dimension des Funktionsraumes;

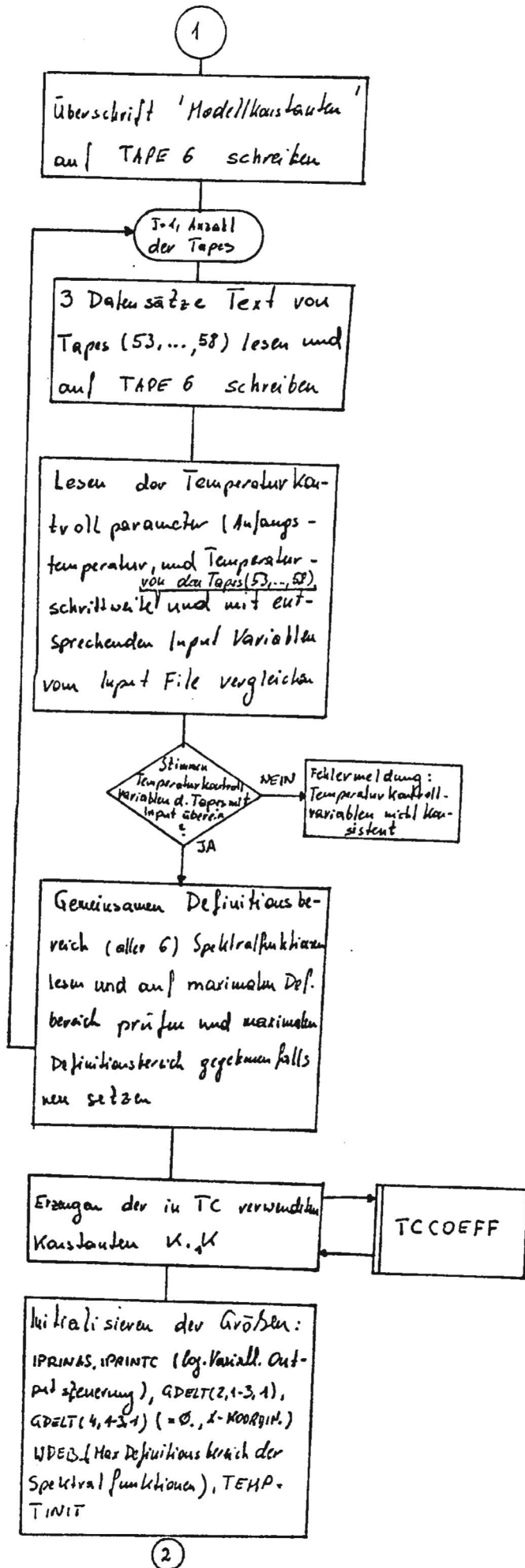
Tabelle Kennzahl;

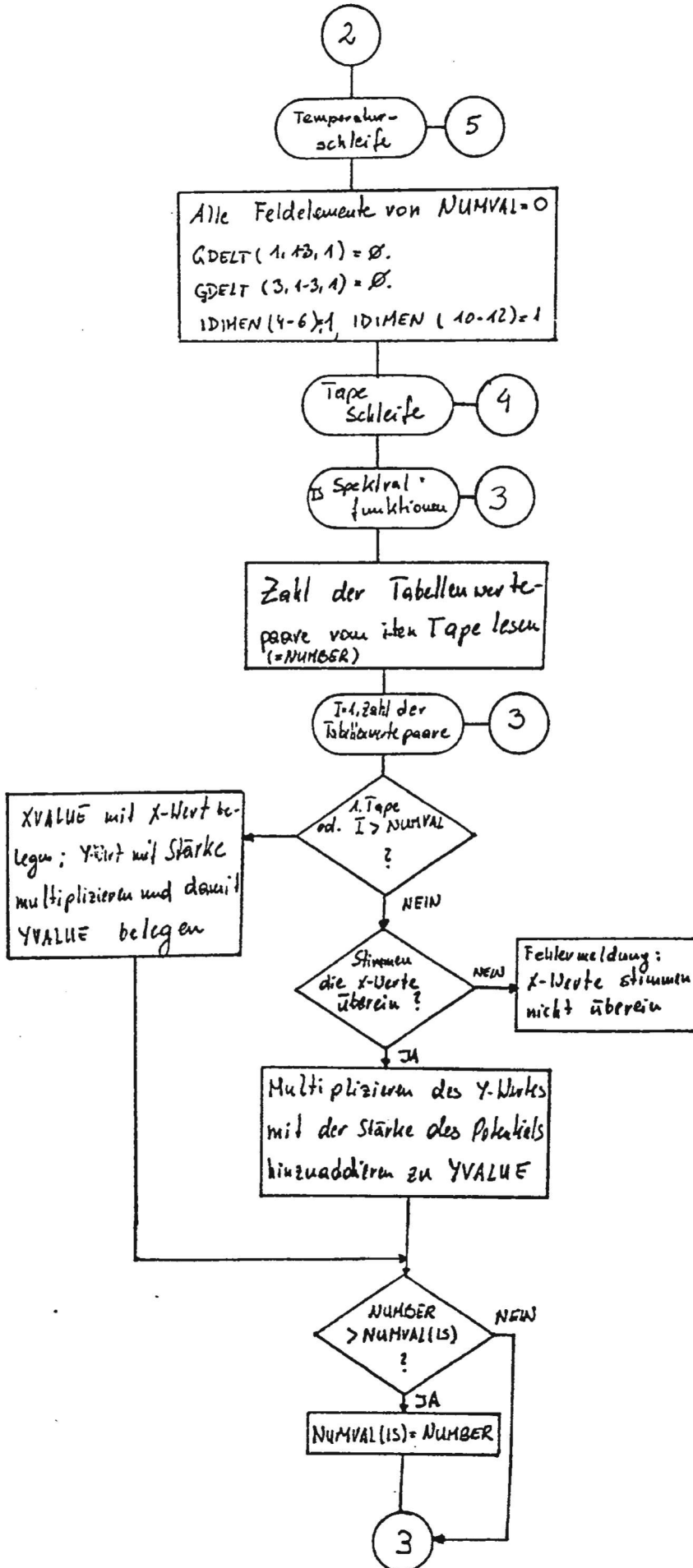
Output Steuerung;

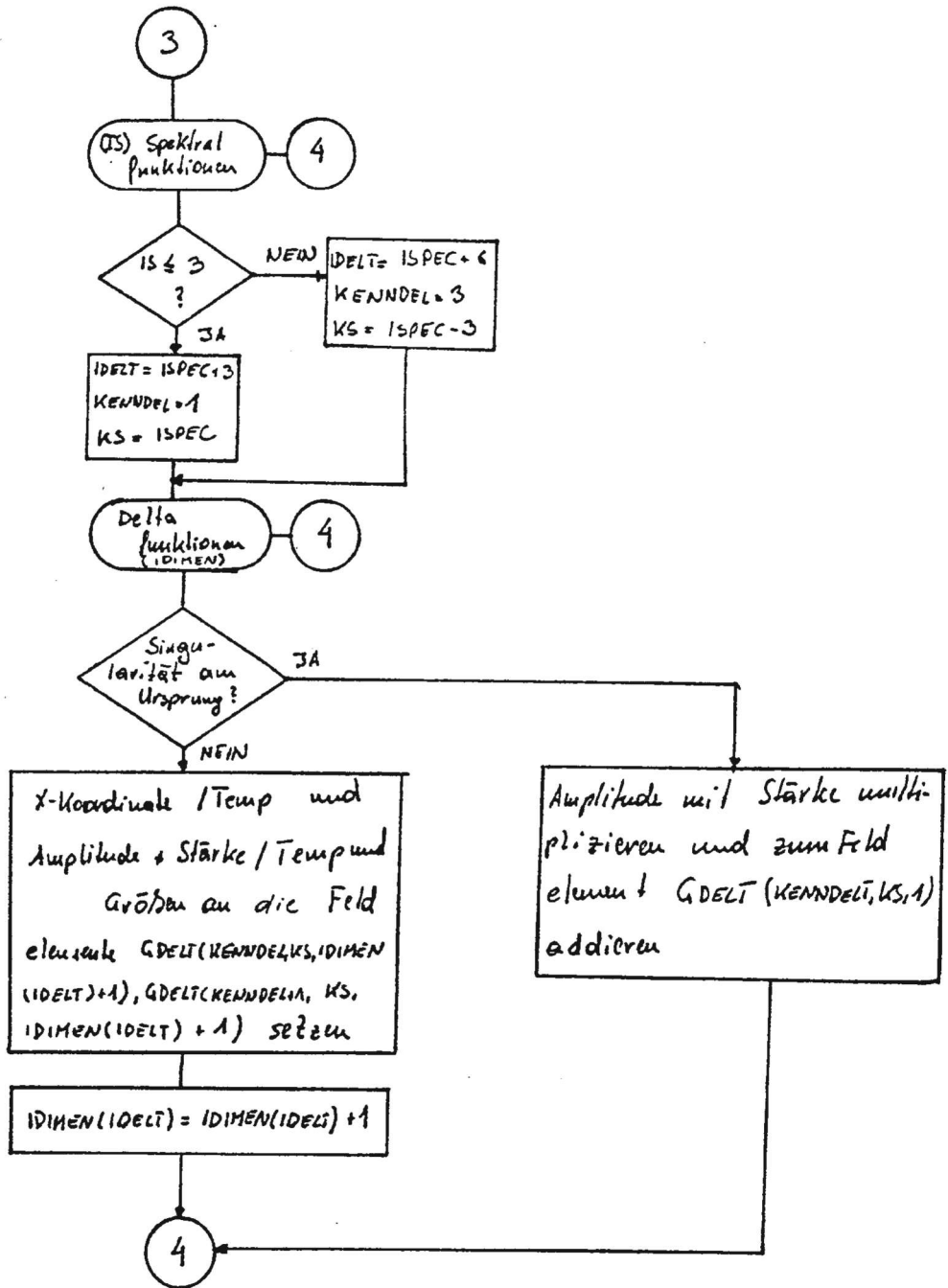
Grad der Polynome, Ende der Polynomentwick-
lung, Abstand der Stützstellen bei numerischer Integra-
tion;

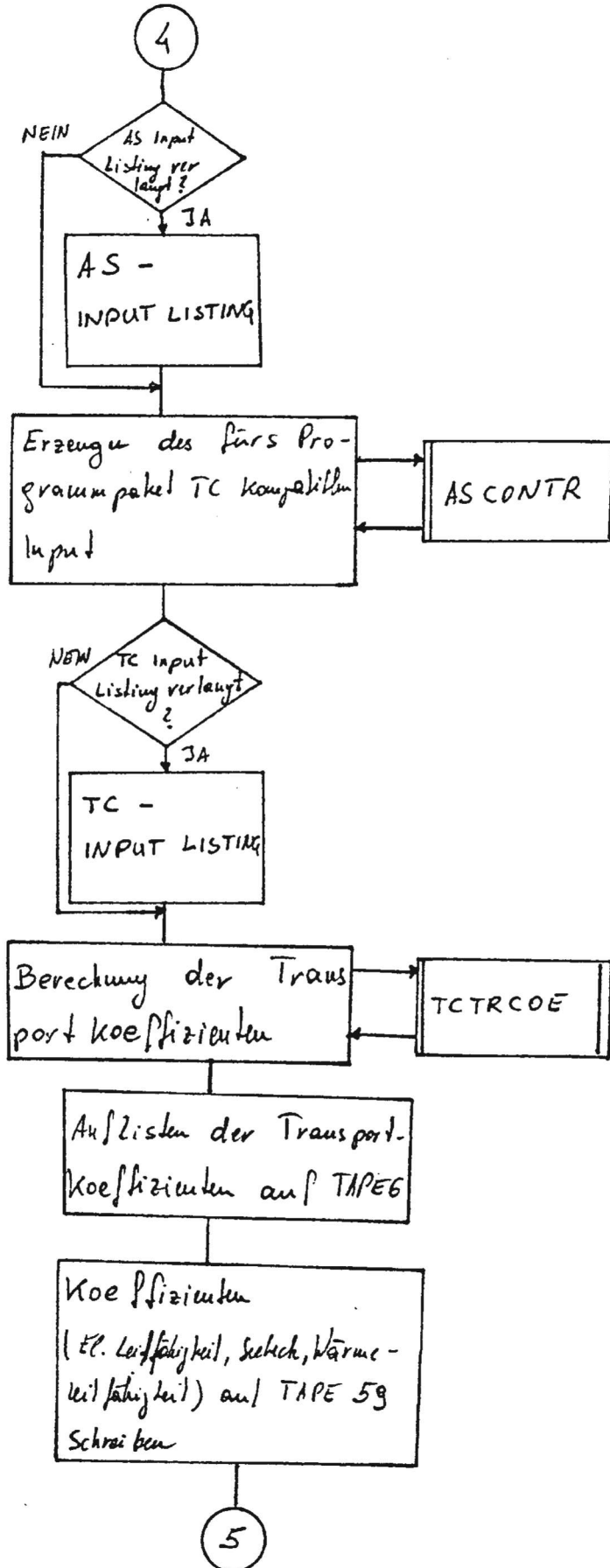
Ausgabe des Inputs (vom Input File) auf TAPE 58

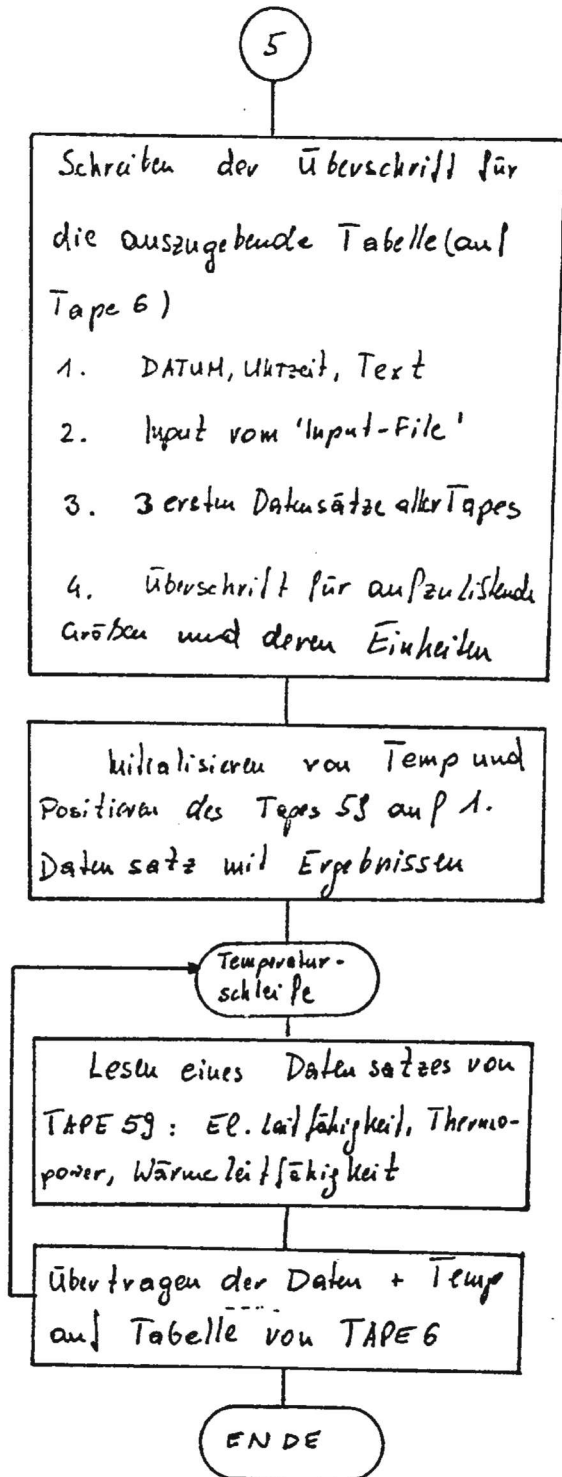
Ausgabe wie auf TAPE 6 nur ohne 'Output -
Steuerung'











PROGRAM COTRACO

PURPOSE OF ROUTINE: COMPUTE TRANSPORTCOEFFICIENTS
INPUT: MODEL-SPECTRALFUNCTIONS ON TAPES 53,...,58
INPUT VARIABLES ON INPUT FILE
OUTPUT: TRANSPORTCOEFFICIENTS ON TAPE6 AND
TAPE 59

6-12-1983

VERSION 1.0

SOURCE FILE NAME = COTRACO

DECLARATIVE SECTION

PARAMETER (KA=6,MAXPOLY=6,MAXDELT=300,MAXDIM=200,
1MAXTAP=3,INTAPE=52)

CHARACTER TEXT*58,DATUM*10,DATE*10,ZEIT*10,TIME*10,TEXT1*40

CHARACTER TEXTAP(MAXTAP,3)*60

LOGICAL IPRINAS,IPRINTC

DIMENSION GPOLY(2,3,0:MAXPOLY),GDELT(4,3,MAXDELT),
1IDIMEN(13),RESEST(0:KA),TERPGW(0:KA),HEATCON(0:KA),
1WDEB(6),DELTA(6),NUMVAL(6),XVALUE(6,MAXDIM),YVALUE
1(6,MAXDIM),AMPOTEN(MAXTAP),NUMBER(6),XHELP(MAXDIM),
1YHELP(MAXDIM)

DATA EPS1,EPS2 /.0001,1.E-14/

STRUCTURE OF TAPES : TAPE53-TAPE58

AS INPUT DATA TAPES ARE AVAILABLE: TAPE53,...,58

1.REC:KIND OF INTERACTION

2.REC:ABSOLUTE STRENGTH

3.REC:MODELLPARAMETER FOR COMPUTATION OF SPECTRALFUNCTIONS
4.REC:INITIAL TEMPERATUR,TEMPERATUR INCREASE P. STEP,NUMBER
OF STEPS

5.REC:INTERVAL OF DEFINITION FOR SPECTRALFUNCTIONS (REALV.:WEND)
GO:(0,WEND), G1:(-WEND,WEND)

FOLLOWING RECORDS RESERVED FOR SPECTRALFUNCTIONS (FORMATTED AS):

TABLES FOR ALL 6 SPECTRALFUNCTIONS (GO--,...,G1++)

([NUMBER OF PAIRS [X,Y]]*6)

([X1,Y1],[X2,Y2],...)*6

DELTAFUNCTIONS

(NUMBER OF DELTAFUNCTIONS*6)

([W1,AMP1],[W2,AMP2],...)*6

...FOR ALL TEMPERATURES ACCORDING REC.4

...PHYSICAL DIMENSIONS: X=[K],Y=[J],AMP=[K],W=[K]

'(.....)' DEFINES ONE RECCRD ON THE TAPES

EXECUTIVE SECTION

```

      READ(*,*) VELDEN0,VELDEN1,INTACT,(IDIMEN(1),I=1,3),
      1(IDIMEN(1),I=7,9),WENDPOL,(DELTA(1),I=1,6),TINIT,TSTEP,
      1NUMSTEP,IDIMEN(13),IPRINT,KENNTAB,TEXT

```

ANNOTATION OF INPUT PARAMETERS

P. NAME	TYPE	EXPLANATION
VELDEN0	REAL	MASS*(<V**2>*N)/DENSITY
VELDEN1	REAL	MASS*(<V**2>*N)'/DENSITY
INTACT	INT	NUMBER OF INTERACTIONS
IDIMEN(1-3)	INT	REQUESTED DIMENSION OF POLYNOM FOR G0--, ..., G0++
IDIMEN(7-9)	INT	REQUESTED DIMENSION OF POLYNOM FOR G1--, ..., G1++
WENDPOL	REAL	DEFINES END OF POLYNOMIAL EXPANSION (PHYSIC. DIMENSION: TEMPERATUR)
DELTA	REAL	STEP LENGTH USED FOR NUMERICAL INTE- GRATION FOR G0--, ..., G1++ (PHYSIC. DIMENSION: TEMPERATUR)
TINIT	REAL	STARTING TEMPERATUR
TSTEP	REAL	TEMPERATUR INCREASE PER STEP
NUMSTEP	INT	NUMBER OF TEMPERATUR STEPS
IDIMEN(13)	INT	DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
IPRINT	INT	=11...AS+TC INPUT LISTING =10...AS INPUT LISTING =1 ...TC INPUT LISTING =0 ...NO INPUT LISTING
KENNTAB	INT	DIMENSION FOR WHICH FINAL TABLE WILL BE CREATED
TEXT	CHAR*58	REMARKS FOR CURRENT RUN
AMPOTEN	REAL	RELATIVE STRENGTHS OF INTERACTIONS

```

      INTACT D.K.?

```

```

      IF (INTACT.GT.MAXTAP) STOP 'MR COTRACO:INTACT.GT.MAXTAP'
      IF (KENNTAB.GT.IDIMEN(13)) STOP 'MR COTRACO:KENNTAB TOO LARGE'

```

```

      READ STRENGTH OF INTERACTIONS

```

```

123 C
124 DO 25 IREAD=1,INTACT
125 READ(*,*) AMPOTEN(IREAD)
126 ITAP=IREAD+INTAPE
127 REWIND(ITAP)
128 25 CONTINUE
129 C
130 C
131 DATUM=DATE()
132 ZEIT=TIME()
133 C
134 C INPUT LISTING
135 C
136 WRITE(6,10) DATUM,ZEIT,TEXT
137 10 FORMAT('1',10X,60('*'),/,11X,'*', ' PROGRAM COTRACE :',
138 1' BERECHNUNG DER TRANSPORTKOEFFIZIENTEN ', '*',/,11X,'*',
139 158X,'*',/,11X,'*',2X,'AUSGEFUEHRT AM :',A10,'AUSGEFUEH',
140 1'RT UM :',A10,4X,'*',/,11X,'*',58X,'*',/,11X,'*',10X,
141 1'BEMERKUNG ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF :',10X,'*',/,11X,
142 1'*,A58,'*',/,11X,'*',58X,'*',/,11X,60('*'),/,/,11X,
143 110('*'),10X,'I N P U T W E R T E :',10X,10('*'),/)
144 C
145 C
146 WRITE(6,15)
147 15 FORMAT('0',10X,10('*'),'STAERKEN DER STREUPOTENTIALE',
148 110('*'),/)
149 DO 35 I=1,INTACT
150 WRITE(6,55) I,AMPOTEN(I)
151 55 FORMAT(11X,'STAERKE DER',I2,'-TEN WECHSELWIRKUNG =',E15.6)
152 35 CONTINUE
153 WRITE(6,65) VELDEN0,VELDEN1
154 65 FORMAT('0',/,11X,10('*'),'KONSTANTEN ABHAENGIG VON ',
155 1'DER BANDSTRUKTUR',10('*'),/,/,
156 111X,'MASS*(<V**2>*N)/DENSITY =',E15.8,/,
157 111X,'D(MASS*(<V**2>*N)/DENSITY)/DE =',E15.6,/)
158 WRITE(6,50) TINIT,TSTEP,NUMSTEP,IDIMEN(13),KENNTAB,IPRINT
159 50 FORMAT('0',10X,10('*'),'INPUT FUER DEN TEMPERATURBER',
160 1'EICH',10('*'),/,/,
161 111X,'ANFANGSTEMPERATUR =',E10.3,/,
162 111X,'TEMPERATURDIFFERENZ PRO SCHRITT =',E10.3,/,
163 111X,'ZAHL DER TEMPERATURSCHRITTE =',I10,/,/,
164 1/,11X,10('*'),'DIMENSION DES ',
165 1'FUNKTIONENRAUMES =',I2,10('*'),/,/,/,11X,10('*'),
166 1'TABELLEN-KENNZAHL =',I3,10('*'),/,/,/,
167 111X,10('*'),'OUTPUT STEUERUNG: IPRINT=',I3,10('*'),/)
168 WRITE(6,40) (IDIMEN(I),I=1,3),(IDIMEN(I),I=7,9),
169 1WENDPOL
170 40 FORMAT('0',10X,10('*'),'INPUT FUER DIE POLYNOM',
171 1'ENTWICKLUNG',10('*'),/,/,
172 111X,'GRAD DES POLYNOMS FUER GO-- =',I10,/,
173 111X,'GRAD DES POLYNOMS FUER GO+- =',I10,/,
174 111X,'GRAD DES POLYNOMS FUER GO++ =',I10,/,
175 111X,'GRAD DES POLYNOMS FUER G1-- =',I10,/,
176 111X,'GRAD DES POLYNOMS FUER G1+- =',I10,/,
177 111X,'GRAD DES POLYNOMS FUER G1++ =',I10,/,
178 111X,'ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG [KELVIN] =',E15.8,
179 1/)
180 WRITE(6,410) (DELTA(I),I=1,6)
181 C
182 C READ MODELLPARAMETERS FROM TAPES 53,54,.....,58
183 C AND WRITE HEADER OF TAPE59

```



```
184 C
185 NUMO=0
186 WEND=0.
187 WRITE(59,60) DATUM,ZEIT,TEXT
188 60 FORMAT(2A10,A58)
189 WRITE(59,*) INTACT,(AMPOTEN(I),I=1,INTACT),VELDEN0,
190 1VELDEN1,(IDIMEN(I),I=1,3),(IDIMEN(I),I=7,9),WENDPOL,
191 1(DELTA(I),I=1,6),TINIT,TSTEP,NUMSTEP,IDIMEN(13),KENNTAB
192 WRITE(6,75)
193 75 FORMAT('0',10X,10('*'),'MODELLPARAMETER DER SPEKTRAL',
194 1'FUNKTIONEN',10('*'),/)
195 C
196 DO 85 ICGUNT=1,INTACT
197 ITAPE=ICGUNT+INTAPE
198 DO 95 I=1,3
199 READ(ITAPE,275) TEXTAP(ICGUNT,I)
200 275 FORMAT(A60)
201 WRITE(6,105) TEXTAP(ICGUNT,I)
202 105 FORMAT(11X,A60)
203 WRITE(59,275) TEXTAP(ICGUNT,I)
204 95 CONTINUE
205 C
206 C
207 C READ TEMPERATUR CONTROL VARIABLES
208 C
209 READ(ITAPE,*) TINIT1,TSTEP1,NUSTEP
210 IF (ABS(TINIT1-TINIT).GT.EPS1.OR.ABS(TSTEP-TSTEP1).GT.
211 1EPS1) STOP 'MR COTRACC: TEMP DATA ERROR'
212 IF (NUSTEP.GT.NUMO) NUMO=NUSTEP
213 C
214 C
215 C DEFINITIONSBEREICH DER SPEKTRALFUNKTIONEN LESEN
216 C
217 READ(ITAPE,*) WENDSF
218 IF (WENDSF.GT.WEND) WEND=WENDSF
219 85 CONTINUE
220 IF (NUMO.LT.NUMSTEP) STOP 'MR COTRACC:TAPES NOT COMPLETE'
221 IF (WENDPOL.GT.WEND) STOP 'MR COTRACC: WENDPOL.GT.WEND'
222 C
223 C
224 C INITIALIZE VARIABLES
225 C
226 DO 205 I=1,6
227 WDEB(1)=WEND
228 205 CONTINUE
229 IPRINAS=.FALSE.
230 IPRINTC=.FALSE.
231 IF (IPRINT/10.EQ.1) IPRINAS=.TRUE.
232 IPRINT=MOD(IPRINT,10)
233 IF (IPRINT.EQ.1) IPRINTC=.TRUE.
234 Y=TCCDEFF(-IDIMEN(13),KA,0,0)
235 DO 80 I=1,3
236 GDELT(2,I,1)=0.
237 GDELT(4,I,1)=0.
238 80 CONTINUE
239 TEMP=TINIT
240 IDIM=IDIMEN(13)
241 C
242 C
243 C START TEMPERATUR LOOP
244 C
245 DO 120 ISTEP=1,NUMSTEP
246 C
247 C
248 C RESET VARIABLES NUMVAL IDIMEN GDELT
```

C

```

DC 215 I=1,3
NUMVAL(I)=0
NUMVAL(I+3)=0
IDIMEN(I+3)=1
IDIMEN(I+9)=1
GDELT(1,1,1)=0.
GDELT(3,1,1)=0.
215 CONTINUE

```

215

C

C

C

READ SPECTRALFUNCTIONS FROM TAPES

```

DO 225 ICOUNT=1,INTACT
ITAPE=ICOUNT+INTAPE
READ(ITAPE,*) (NUMBER(I),I=1,6)
DO 235 ISPEC=1,6
IF (NUMBER(ISPEC).LE.0) GOTO 235
NUM=NUMBER(ISPEC)
READ(ITAPE,*) (XHELP(I),YHELP(I),I=1,NUM)
DO 425 IVAL=1,NUM
IF (I.GT.NUMVAL(ISPEC)) THEN
XVALUE(ISPEC,IVAL)=XHELP(IVAL)
YVALUE(ISPEC,IVAL)=YHELP(IVAL)*AMPOTEN(ICOUNT)
ELSE
IF (ABS(XVALUE(ISPEC,IVAL)-XHELP(IVAL)).GT.EPS1) THEN
STOP 'MR COTRACC:XVALUES NOT CONSISTENT'
ELSE
YVALUE(ISPEC,IVAL)=YVALUE(ISPEC,IVAL)+YHELP(IVAL)*
1AMPOTEN(ICOUNT)
ENDIF
ENDIF
425 CONTINUE
IF (NUM.GT.NUMVAL(ISPEC)) NUMVAL(ISPEC)=NUM
235 CONTINUE

```

425

235

C

C

C

READ DELTA FUNKTIONS FROM TAPES

```

READ(ITAPE,*) (NUMBER(I),I=1,6)
DO 225 ISPEC=1,6
IF (NUMBER(ISPEC).LE.0) GOTO 225
IF (ISPEC.LE.3) THEN
IDELT=ISPEC+3
KENNDEL=1
KS=ISPEC
ELSE
IDELT=ISPEC+6
KENNDEL=3
KS=ISPEC-3
ENDIF
NUM=NUMBER(ISPEC)
READ(ITAPE,*) (XHELP(I),YHELP(I),I=1,NUM)
DO 435 I=1,NUM
IF (ABS(XHELP(I)).LT.EPS2) THEN
GDELT(KENNDEL,KS,1)=GDELT(KENNDEL,KS,1)+YHELP(I)*AMPCTEN
1(ICOUNT)/TEMP
ELSE
GDELT(KENNDEL,KS,IDIMEN(IDELT)+1)=YHELP(I)*AMPCTEN(ICOUNT)
1/TEMP
GDELT(KENNDEL+1,KS,IDIMEN(IDELT)+1)=XHELP(I)/TEMP
IDIMEN(IDELT)=IDIMEN(IDELT)+1
ENDIF

```



```

435  CONTINUE
225  CONTINUE
C
C      A S - INPUT LISTING
C
      IF (IPRINAS) THEN
      WRITE(6,180) TEMP
180  FORMAT('1',10X,'A S - I N P U T',10X,'TEMP=',E10.3,/,/,/)
      DO 165 ISPEC=1,6
      MAX=NUMVAL(ISPEC)
      WRITE(6,150) ISPEC
150  FORMAT('0',10X,I2,'-TE SPEKTRALFUNKTION - TABELLE',
1' X1 Y1 , X2 Y2 . . .',/)
      DO 155 IDIS=1,MAX,2
      WRITE(6,195) XVALUE(ISPEC,IDIS),YVALUE(ISPEC,IDIS),
1XVALUE(ISPEC,IDIS+1),YVALUE(ISPEC,IDIS+1)
155  CONTINUE
      IF (ISPEC.LE.3) THEN
      IDELT=ISPEC+3
      KENDEL=1
      KS=ISPEC
      ELSE
      IDELT=ISPEC+6
      KENDEL=3
      KS=ISPEC-3
      ENDIF
      MAXD=IDIMEN(IDELT)
      WRITE(6,175)
175  FORMAT(11X,'DELTA FUNKTIONEN ', ' X-KORDINATE1 ',
1' AMPLITU1 , X-KORDINATE2 AMPLITU2...',/)
      IF (MOD(MAXD,2).EQ.0) THEN
      MAXL=MAXD
      ELSE
      MAXL=MAXD-1
      ENDIF
      DO 185 I=1,MAXL,2
      WRITE(6,195) GDELT(KENDEL+1,KS,I)*TEMP,GDELT(KENDEL,KS,I)*
1TEMP,
1 GDELT(KENDEL+1,KS,I+1)*TEMP,GDELT(KENDEL,KS,I+1)*TEMP
195  FORMAT(11X,2(E13.6,3X),', ',3X,2(E13.6,3X))
185  CONTINUE
      IF (MAXL.NE.MAXD) THEN
      WRITE(6,195) GDELT(KENDEL+1,KS,MAXD)*TEMP,GDELT
1(KENDEL,KS,MAXD)*TEMP
      ENDIF
165  CONTINUE
      ENDIF
C
C
C
C      CALL ASCONTR(XVALUE,YVALUE,MAXDIM,NUMVAL,IDIMEN,
1WENDPOL,DELTA,WDEB,TEMP,GPOLY,GDELT,MAXPOLY,MAXDELT)
C
C
C      T C - INPUT LISTING
C
C
C
C      IF (IPRINTC) THEN
      WRITE(6,200) TEMP

```

- 154 -

```

200  FFORMAT('1',10X,'T C - I N P U T',10X,'TEMP=',E10.3,/,
    1/,/)
    DD 210 IPRINT=1,3
    MAXP=IDIMEN(IPRINT)
    MAXD=IDIMEN(IPRINT+3)
    WRITE(6,220) IPRINT,(GPOLY(1,IPRINT,1),I=0,MAXP)
220  FORMAT(11X,12,'-TE SPEKTRALFUNKTION',/,/,11X,'POLYNOM',
    1'-KOEFFIZIENTEN (0-6)',/,/(11X,5(E10.3,3X),/))
    WRITE(6,175)
    DD 210 IDELT=1,MAXD,2
    WRITE(6,195) GDELT(2,IPRINT,IDELT),GDELT(1,IPRINT,IDELT),
    1GDELT(2,IPRINT,IDELT+1),GDELT(1,IPRINT,IDELT+1)
250  FORMAT(11X,2(E10.3,4X))
210  CONTINUE
    DD 260 IPRINT=1,3
    MAXP=IDIMEN(IPRINT+6)
    MAXD=IDIMEN(IPRINT+9)
    WRITE(6,220) IPRINT+3,(GPOLY(2,IPRINT,1),I=0,MAXP)
    WRITE(6,175)
    DD 260 IDELT=1,MAXD,2
    WRITE(6,195) GDELT(4,IPRINT,IDELT),GDELT(3,IPRINT,IDELT),
    1GDELT(4,IPRINT,IDELT+1),GDELT(3,IPRINT,IDELT+1)
260  CONTINUE
    ENDIF

C
C
C
C
    CALL TCTRCOE(GPOLY,GDELT,IDIMEN,KA,MAXPOLY,MAXDELT,
    1WENDPOL,VELDEN0,VELDEN1,TEMP,RESEST,TERPOW,HEATCON)

C
C
C
    WRITE(6,300) TEMP
300  FORMAT('1',10X,10('*'),'ERGEBNISSE',10('*'),10X,
    1'TEMP=',E10.3,/,/,/,
    11X,'ELECTRICAL RESISTIVITY [MIKROOHM*CM]:',/)
    WRITE(6,310) (RESEST(I),I=0,KA)
310  FORMAT((11X,4(E15.8,3X),/))
    WRITE(6,320)
320  FORMAT('0',10X,'THERMOPOWER [MIKROVOLT/KELVIN] :',/)
    WRITE(6,310) (TERPOW(I),I=0,KA)
    WRITE(6,330)
330  FORMAT('0',10X,'HEAT CONDUCTIVITY [MILIWATT/(CM*',
    1'K)] :',/)
    WRITE(6,310) (HEATCON(I),I=0,KA)
    WRITE(59,*) (RESEST(I),I=0,IDIM),(TERPOW(I),I=0,IDIM),
    1(HEATCON(I),I=0,IDIM)
    TEMP=TEMP+TSTEP
120  CONTINUE

C
C
C
C
C-----
C
C      STRUCTUR OF TAPE59
C-----
C
C 1.REC:DATE,TIME,TEXT*58(REMARKS TO CURRENT RUN)
C 2.REC:NUMBER OF INTERACTIONS,STRENGTHS OF INTERACTIONS,
C      MASS*(<V**2>*N)/DENSITY,MASS*(<V**2>*N)'/DENSITY,
C      DIMENSION OF POLYNOMS(GO--,.,.,G1++),END OF POLY

```

```

C      NOMIAL EXPANSION(LKJ),STEP LENGTH FOR NUMERICAL
C      INTEGRATION OF GO--,...,G1++ (LKJ),STARTING TEMPERATUR,
C      TEMPERATUR INCREASE PER STEP,NUMBER OF STEPS,DIMENSION
C      OF MATRIX OF COLLISION OPERATER (G-DIM)
C
C ...NEXT (3*NUMBER OF INTERACTIONS)-REC :TEXT OF TAPES 53...,58
C
C ...TRANSPORTCOEFFICIENTS (FORMATTED AS):
C (EL.RESESTIVITY*[IDIM+1],THERMOPWER*[IDIM+1],
C      HEATCONDUCTIVITY*[IDIM+1])
C PHYSIC. DIMENSION:(MIKROOHM*CM,MIKROVOLT/K,MILIWATT/(K*CM))
C
C
C (.....)  DEFINES ONE REC. ON TAPE59
C
C-----
C      WRITE(6,240) DATUM,ZEIT,TEXT
240  FORMAT('1',10X,10('*'),'PROGRAM COTRACC',10('*'),/,
111X,'AUSGEFUEHRT AM:',A10,2X,'AUSGEFUEHRT UM:',A10,/,
111X,'BEMERKUNGEN ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF:',/,
111X,A58,/)
C      WRITE(6,245) (AMPOTEN(I),I=1,INTACT)
245  FORMAT('0',10X,'STAERKEN DER WECHSELWIRKUNGEN: STAER',
1'KE1,STAERKE2...',/, (11X,4(E15.8,' ',',',2X),/))
C      WRITE(6,255) VELDENC,VELDEN1
255  FORMAT(11X,'KONSTANTEN ABHAENGIG VON DER BAND',
1'STRUKTUR',/,11X,'MASS*<V**2>*N/DENSITY =',E15.8,2X,/,
111X,'D(MASS*<V**2>*N/DENSITY)/DE =',E15.8)
C      WRITE(6,405)
405  FORMAT(11X,'MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN')
C      DO 315 I=1,INTACT
C      DO 315 J=1,3
C      WRITE(6,325) TEXTAP(I,J)
325  FORMAT(11X,A60)
315  CONTINUE
C      WRITE(6,265) (IDIMEN(I),I=1,3),(IDIMEN(I),I=7,9)
265  FORMAT(11X,'INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG',
1' UND INTEGRATION',/,11X,'GRAD DER POLYNOME (GO--,...,
1',G1++):',/,11X,6(I2,' ',',',3X))
C      WRITE(6,285) WENDPOL
C      WRITE(6,410) (DELTA(I),I=1,6)
410  FORMAT(11X,'STUETZSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTE',
1'GRATION',/,11X,'GO--,...,G1++ :',/,
1(11X,3(E15.8,' ',',',3X),/))
285  FORMAT(11X,'ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG      =',E15.8)
C      WRITE(6,295) TINIT,TSTEP,NUMSTEP
295  FORMAT(11X,'INPUT ZUR TEMPERATURSTELERUNG',/,
111X,'ANFANGSTEMPERATUR=',E15.8,3X,'TEMP.SCHRITTWEITE=',
1E15.8,/,11X,'ZAHL DER SCHRITTE=',15)
C      WRITE(6,305) IDIMEN(13),KENNTAB
305  FORMAT(11X,'GROESSE DES FUNKTIONENRAUMES: 0-',11,/,
111X,'TABELLE WIRD FUER',12,'-TE DIMENSION ANGELEGT')
C
C      GET DATA FROM TAPE 59
C
C      REWIND(59)
C      READ(59,*) DUMMY
C      READ(59,*) X
C      TEMP=TINIT
C      DO 415 ITAP=1,3*INTACT
C      READ(59,275) DUMMY

```



```
9      415      CONTINUE
10      WRITE(6,335)
11      335      FORMAT('O',10X,10('*'),'ERGEBNISSE IN TABELLENFORM',
12      110('*'),/,11X,'EL.RESESTIVITY',4X,'THERMPOWER',7X,
13      1'HEAT CONDUCT.',4X,'TEMP',/,11X,'[MIKROOHM*CM]',5X,
14      1'[MIKROVOLT/K]',5X,'[MILLIWATT/(CM*K)]',1X,'[K]',/)
15      DO 340 ITAB=1,NUMSTEP
16      READ(59,*) (RESEST(I),I=0,IDIM),(TERPOW(I),I=0,IDIM),
17      1(HEATCON(I),I=0,IDIM)
18      WRITE(6,345) RESEST(KENNTAB),TERPOW(KENNTAB),HEATCON
19      1(KENNTAB),TEMP
20      345      FORMAT(11X,4(E15.8,2X))
21      TEMP=TEMP+TSTEP
22      340      CONTINUE
23      STOP
24      END
```


A.2.1.2 Das Programmpaket AS

Das Programmpaket AS dient dazu, 6 Spektralfunktionen, $G_{--}^0 \dots$
 G_{++}^1 , gegeben in der Form

$$G(\Omega) = \begin{array}{|c|c|} \hline \Omega & G(\Omega) \\ \hline \vdots & \vdots \\ \hline \end{array} + \sum_j b_j \delta(\Omega - \Omega_j)$$

in die Form

$$G(\Omega) = \sum_i a_i \omega^i + \sum_k \bar{b}_k \delta(\omega - \omega_k) \quad (\omega = \Omega)$$

überzuführen.

Seitenverzeichnis für die Programmeinheiten

SUBROUTINE	ASCONTR	158
SUBROUTINE	ASPOLCO	166
SUBROUTINE	ASDELTA	174
SUBROUTINE	ASINPO1	178
SUBROUTINE	ASLIEQS	179

SUBROUTINE ASCONTR
=====

Zweck: Überführen der Spektralfunktionen von der Form

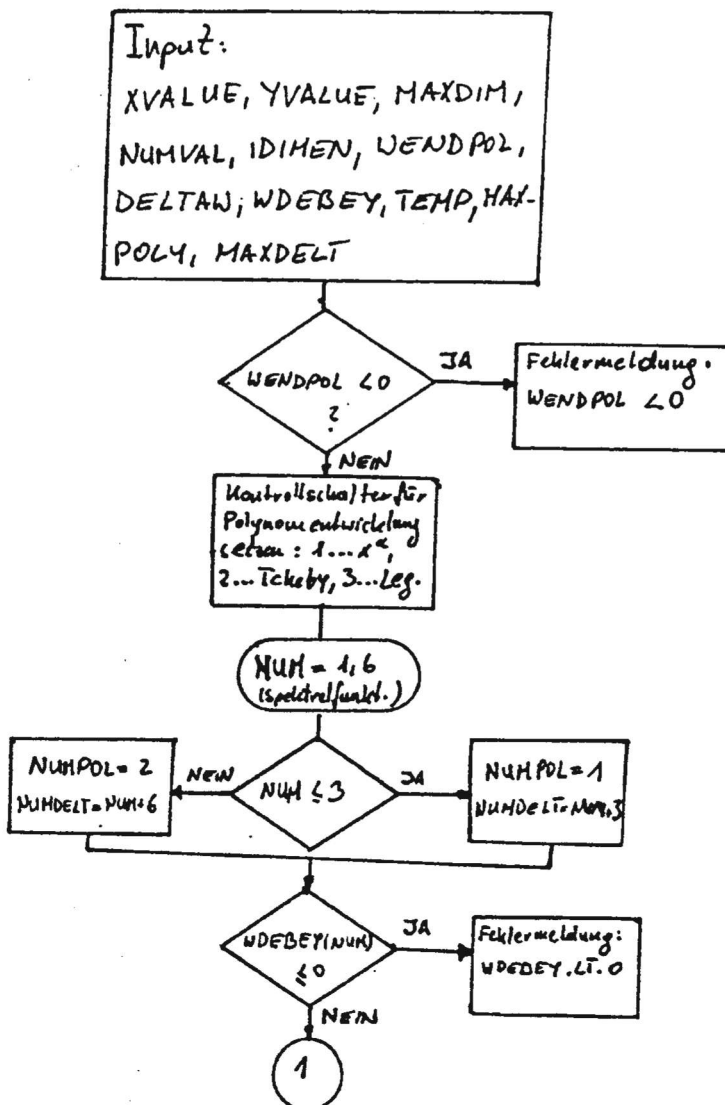
$$G(x) = \frac{a}{x} + \sum_j b_j \delta(x-x_j)$$

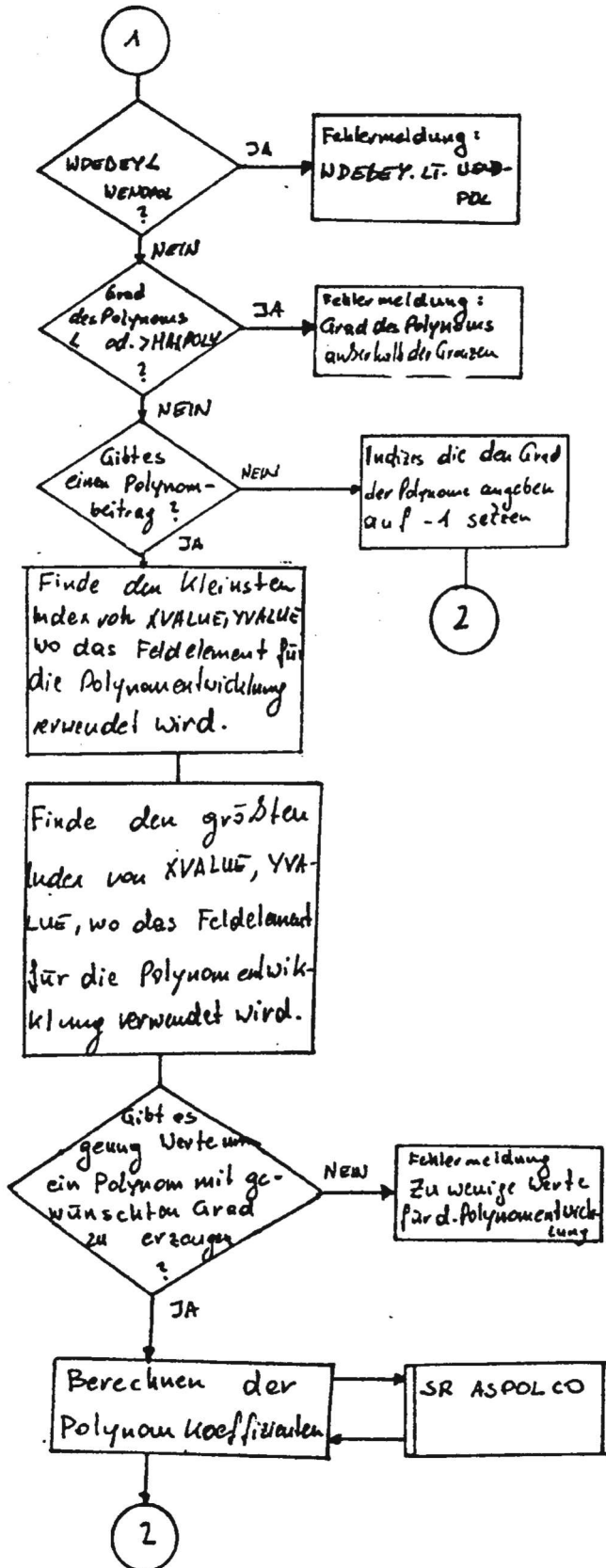
in die Form

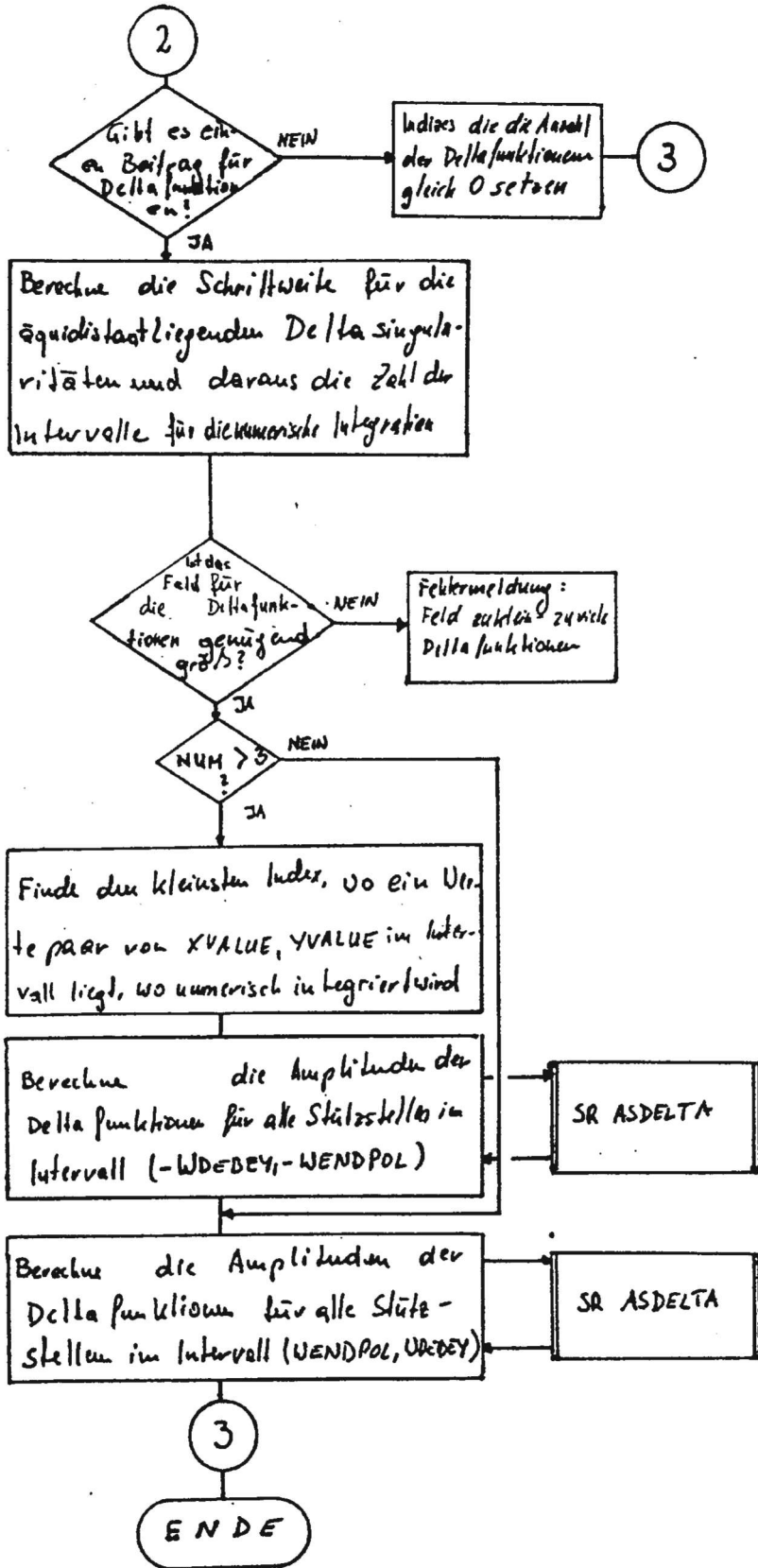
$$G(x) = \sum_i a_i \omega_i + \sum_k b_k \delta(\omega-\omega_k)$$

Input: Tabellierte Funktionen (XVALUE,YVALUE), Max. Dimension dieser Felder (MAXDIM), Verwendete Indizes für GPOLY und GDELT (IDIMEN), Ende der Polynomentwicklung (WENDPOL), Schrittweite bei der numerischen Integration (DELTAW), obere Grenze des Definitionsbereiches der Spektralfunktionen (WDEBEY), Temperatur (TEMP), Max. Dimension von GPOLY und GDELT (MAXPOLY,MAXDELT)

Output: Koeffizienten der Polynome (GPOLY), Deltafunktionen X-Koordinaten der Singularitäten, Amplituden (GDELT)








```

SUBROUTINE ASCNTR(XVALUE,YVALUE,MAXDIM,NUMVAL,IDIMEN,
1WENDPOL,DELTAW,WDEBEY,TEMP,GPOLY,GDELT,MAXPOLY,
1MAXDELT)

```

```

      GENERAL PURPOSE: ADAPT SPECTRAL-FUNCTIONS TO
                        TC INPUT CONDITIONS

```

```

      HOST              = CYBER 720
      COMPILER          = FOR5 R2-TU VERSION 23-9-83
      PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE POLYNOM COEFFICIENTS AND
                        DELTA-AMPLITUDES FOR ALL SPECTRAL
                        FUNCTIONS
      VERSION           = 1.0
      DATE              = 25-10-1983
      SOURCE FILENAME   = ASCNTR
      AUTHOR            = O. EIBL

```

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

```

      *****

```

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
XVALUE	REAL	I	X-DATA OF SPECTRAL FUNCTIONS (PHYSIC. DIMENSION: TEMPERATUR)
YVALUE	REAL	I	Y-DATA OF SPECTRAL FUNCTIONS (PHYSIC. DIMENSION: 0 FOR G0 [1/K] FOR G1)
MAXDIM	INT	I	MAX. INDEX AVAILABLE FOR XVALUE AND YVALUE
NUMVAL	INT	I	NUMBER OF INITIALIZED DATA IN XVALUE AND YVALUE
IDIMEN	INT	I/O	IDIMEN(1-3)...INDICES FOR GPOLY(1,,) IDIMEN(4-6)... GDELT(1,,) IDIMEN(7-9)... GPOLY(2,,) IDIMEN(10-12)... GDELT(3,,)
WENDPOL	REAL	I	CUT OFF FOR POLYNOMIAL PART OF G0 AND G1 (PHYSIC. DIMENSION:TEMPERATUR)
DELTAW	REAL	I	STEP WIDTH FOR NUMERICAL INTEGRATION (PHYSIC. DIMENSION:TEMPERATUR)
WDEBEY	REAL	I	DEBEY TEMPERATUR (PHYSIC. DIMENSION:TEMPERATUR)
TEMP	REAL	I	TEMPERATUR
GPOLY	REAL	O	POLYNOM COEFFICIENTS FOR G0 AND G1 (PHYSIC. DIMENSION: 0 FOR G0 [1/K] FOR G1)
GPOLY(I1,I2,J)			I1=1...G0 I2=1...G0-- I2=2...G0+- I2=3...G0++ I1=2...G1

- 162 -

```
C      GDELT      REAL      I/O      DELTA AMPLITUDES AND X-COORDINATES
C                                         OF DELTA-SINGULARITIES
C      GDELT(11,I2,J)      I1=1...60 DELTA-AMPLITUDES
C                                         (PHYSIC. DIMENSION: 0)
C                                         2...60 X-COORDINATES OF DELTA-
C                                         SINGULARITIES
C                                         (PHYSIC. DIMENSION: 0)
C                                         3...G1 DELTA-AMPLITUDES
C                                         (PHYSIC. DIMENSION: [1/K])
C                                         4...G2 X-COORDINATES OF DELTA-
C                                         SINGULARITIES
C                                         (PHYSIC. DIMENSION: 0)
C                                         (FOR I2 SEE GPOLY)
C
C      MAXPOLY      INT      I      MAX. NUMBER OF POLYNOM COEFFICIENTS
C                                         AVAILABLE
C
C      MAXDELT      INT      I      MAX. NUMBER OF DELTA FUNCTIONS
C                                         AVAILABLE
C
C-----
C      DECLARATIVE SECTION
C-----
C
C      DIMENSION XVALUE(6,MAXDIM),YVALUE(6,MAXDIM),NUMVAL(6),
C      1IDIMEN(13),DELTAW(6),GPOLY(2,3,0:MAXPOLY),GDELT(4,3,
C      1MAXDELT),WDEBEY(6)
C
C      DATA HALWERO,QQFUNPA,EPS /1.3,10.6,1.E-12/
C
C-----
C      EXECUTIVE SECTION
C-----
C
C      IF (WENDPOL.LT.0.) STOP 'SR ASCNTR: WENDPOL.LT.0'
C
C      SET ISWITCH
C
C      ISWITCH=2
C      HALBTEM=HALWERO*TEMP
C
C      START LOOP FOR SPECTRAL FUNCTIONS
C
C      DO 50 NUM=1,6
C      IF (NUM.LE.3) THEN
C        NUMPOL=NUM
C        NUMDELT=NUM+3
C      ELSE
C        NUMPOL=NUM+3
C        NUMDELT=NUM+6
C      ENDIF
C
C      ARE INPUT DATA O.K.?
C
C      IF (WDEBEY(NUM).LE.0.) STOP 'SR ASCNTR:WDEBEY.LE.0'
C      IF (WDEBEY(NUM).LT.WENDPOL) STOP
C      1'SR ASCNTR: WDEBEY.LT.WENDPOL'
C
C      IS THERE A POLYNOMIAL CONTRIBUTION ?
C
C      IF (WENDPOL.GT.EPS) THEN
```

```

C
  IF (IDIMEN(NUMPOL).GT.MAXPOLY.OR.IDIMEN(NUMPOL).LT.0)
1STOP 'SR ASCONTR:IDIMEN(NUMPOL) OUT OF RANGE'
C
C
C      COMPUTE LOWER INDEX BOUNDARY
C
  IF (NUM.LE.3) THEN
    ILOWER=1
  ELSE
    DO 100 I=1,NUMVAL(NUM)
      IF (XVALUE(NUM,I).GE.-WENDPOL) GOTO 150
100  CONTINUE
      STOP 'SR ASCONTR:REQUESTED NEGATIVE X-VALUE NOT FOUND'
150  ILOWER=1
    ENDIF
C
C      COMPUTE UPPER INDEX BOUNDARY
C
    DO 200 I=ILOWER,NUMVAL(NUM)
      IF (XVALUE(NUM,I).GT.WENDPOL) GOTO 250
200  CONTINUE
      IUPPER=NUMVAL(NUM)
      GOTO 300
250  IUPPER=I-1
C
C      CHECK IF THERE ARE ENOUGH DATA FOR REQUESTED
      POLYNOM DIMENSION
C
300  IF (IUPPER-ILOWER.LT.IDIMEN(NUMPOL)) STOP
      'SR ASCONTR:TOO FEW DATA TO COMPUTE REQUESTED COEFF.S'
C
C      COMPUTE POLYNOM-COEFFICIENTS
C
    CGRENZE=WENDPOL
    IF (NUM.LE.3) THEN
      UGRENZE=0.
    ELSE
      UGRENZE=-WENDPOL
    ENDIF
    CALL ASPOLCO(XVALUE,YVALUE,MAXDIM,ILOWER,IUPPER,NUM,
1CGRENZE,UGRENZE,GPOLY,IDIMEN(NUMPOL),MAXPOLY,TEMP,ISWITCH)
    ELSE
      DO 210 I=1,3
        IDIMEN(I)=-1
        IDIMEN(I+6)=-1
210  CONTINUE
      ENDIF
C
C      COMPUTE DELTA - AMPLITUDES
C
C
C      COMPUTE STEP LENGTH
C
    IF (WDEBEY(NUM)-WENDPOL.GT.0.) THEN
      IF ((DELTAW(NUM).GT.HALBTEM.AND.WENDPOL.LT.DELTAW(NUM)*
1COFUNPA).OR.DELTAW(NUM).LE.0.) THEN
        DELTW=MAX(HALBTEM,WENDPOL/QCFUNPA)
        WRITE(6,80) DELTAW(NUM),DELTW
80  FORMAT('0',10X,5(' '), 'WARNING MESSAGE FROM SR ASCONTR:',/,
111X,5(' '), 'REQUESTED STEP LENGTH FOR NUMERICAL INTEGRATION',

```


- 164 -

```

1 ' TOO BIG OR.LE.0',/,11X,5(' '), 'REQUESTED STEP LENGTH=',
1E15.8,2X, 'USED STEP LENGTH=',E15.8,/)

```

```

ELSE

```

```

    DELTW=DELTAW(NUM)

```

```

ENDIF

```

```

    NUMINT=INT((WDEBEY(NUM)-WENDPOL)/DELTW)+1

```

```

    DELTW=(WDEBEY(NUM)-WENDPOL)/FLOAT(NUMINT)

```

```

C

```

```

C

```

```

C

```

```

    ARE THERE ENOUGH ARRAY ELEMENTS AVAILABLE ?

```

```

    IF (NUM.LE.3) THEN

```

```

        IF (IDIMEN(NUMDELT)+NUMINT+1.GT.MAXDELT) STOP

```

```

1 'SR ASCONTR:TOO FEW DELTA FUNCTIONS AVAILABLE FOR G0'

```

```

    ELSE

```

```

        IF (IDIMEN(NUMDELT)+2*(NUMINT+1).GT.MAXDELT) STOP

```

```

1 'SR ASCONTR:TOO FEW DELTA FUNCTIONS AVAILABLE FOR G1'

```

```

    ENDIF

```

```

C

```

```

C

```

```

C

```

```

C

```

```

    COMPUTE DELTAAMPLITUDES AND X-COORDINATES OF
    SINGULARITIES

```

```

    IF (NUM.LE.3.AND.WENDPOL.LE.0.) IHHELP=1

```

```

    IF (NUM.GT.3) THEN

```

```

        IF (WENDPOL.LE.0.) THEN

```

```

            DO 160 I=1,NUMVAL(NUM)

```

```

            IF (XVALUE(NUM,I).GE.-WDEBEY(NUM).AND.XVALUE(NUM,I).

```

```

1 LE.0.) GOTO 90

```

```

160

```

```

            CONTINUE

```

```

            STOP 'SR ASCONTR:NO DATA IN LOWER INTERVAL'

```

```

90

```

```

            IHHELP=I

```

```

            I=I-1

```

```

        ELSE

```

```

            DO 60 I=ILOWER,1,-1

```

```

            IF (XVALUE(NUM,I).LT.-WDEBEY(NUM)) GOTO 70

```

```

60

```

```

            CONTINUE

```

```

            I=0

```

```

        ENDIF

```

```

C

```

```

C

```

```

C

```

```

    COMPUTE DELTA CONTRIBUTION FOR W<0

```

```

70

```

```

    CALL ASDELTA(XVALUE,YVALUE,MAXDIM,NUMVAL(NUM),I+1,

```

```

1-WDEBEY(NUM),DELTW,NUMINT,GDELT,MAXDELT,NUM,IDIMEN

```

```

1(NUMDELT),TEMP)

```

```

    ENDIF

```

```

C

```

```

C

```

```

C

```

```

    COMPUTE DELTA CONTRIBUTION FOR W>0

```

```

    IF (WENDPOL.LE.0.) THEN

```

```

        DO 180 I=IHHELP,NUMVAL(NUM)

```

```

        IF (XVALUE(NUM,I).GE.0..AND.XVALUE(NUM,I).LE.

```

```

1 WDEBEY(NUM)) GOTO 110

```

```

180

```

```

        CONTINUE

```

```

        STOP 'SR ASCONTR: NO DATA IN UPPER INTERVAL'

```

```

110

```

```

        IUPPER=I-1

```

```

    ENDIF

```

```

    CALL ASDELTA(XVALUE,YVALUE,MAXDIM,NUMVAL(NUM),IUPPER+1,

```

```

1 WENDPOL,DELTW,NUMINT,GDELT,MAXDELT,NUM,IDIMEN

```

```

1 (NUMDELT),TEMP)

```

```

    ENDIF

```

```

50

```

```

    CONTINUE

```

```

C

```


C

RETURN
END

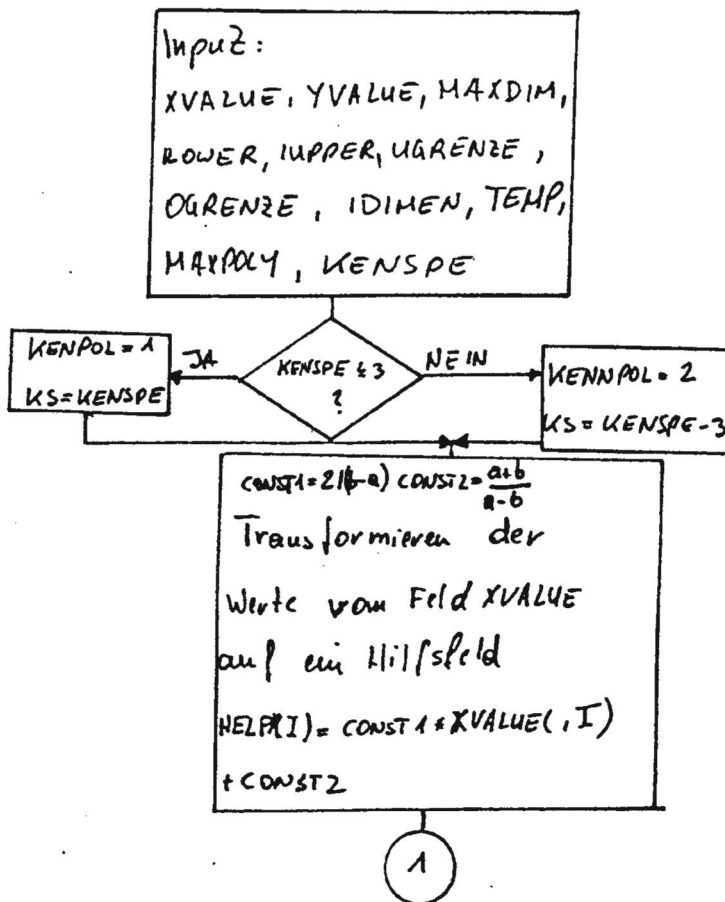
SUBROUTINE ASPOLCO

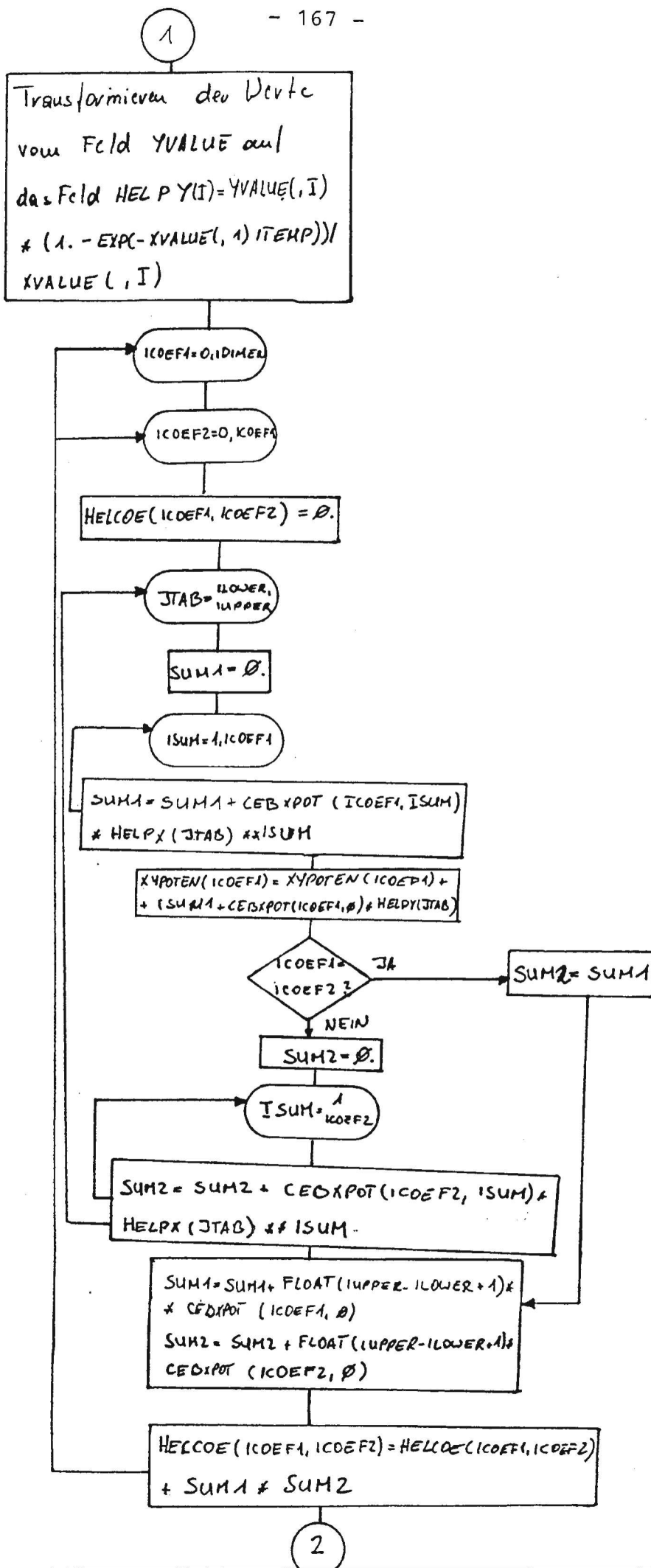
=====

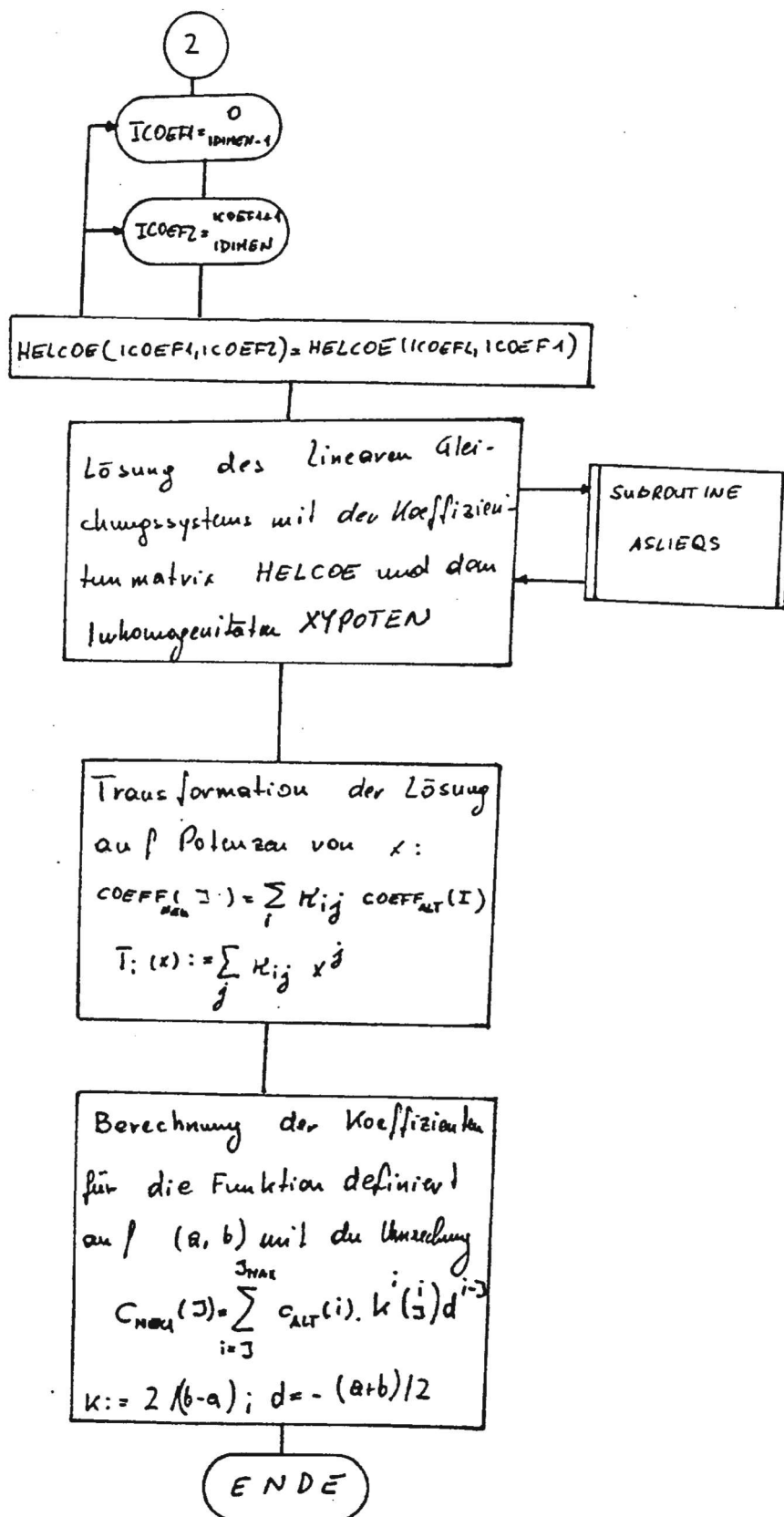
Zweck: Aproximieren einer Funktion gegeben durch Wertepaare durch das bestpassendste Polynom

Input: Tabellierte Funktionen (XVALUE,YVALUE), Dimension der Felder (MAXDIM), kleinster und größter Index der Felder XVALUE und YVALUE, die in dieser Routine verwendet werden (ILOWER,IUPPER), Kennnummer der Spektralfunktion (KENSPE), untere und obere Intervallgrenze für die Aproximation (UGRENZE,OGRENZE), Grad des Polynoms (IDIMEN), Dimension des Koeffizientenfeldes (MAXPOLY), Temperatur (TEMP), Schalter für Tschebyscheff-, Legendrepolynom oder Potenzen von x Aproximation (ISWITCH)

Output: Koeffizienten des aproximierten Polynoms







- 169 -

SUBROUTINE ASPOLCO(XVALUE,YVALUE,MAXDIM,ILOWER,IUPPER,
IKENSPE,OGRENZE,UGRENZE,GPOLY,IDIMEN,MAXPOLY,TEMP,ISWITCH)

GENERAL PURPOSE: ADAPT SPECTRAL-FUNCTIONS TO
TC INPUT CONDITIONS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = CONTROL COMPUTATION FOR POLY-
 NOMIAL COEFFICIENTS FOR SPECTRAL
 FUNCTIONS
 VERSION = 2.0
 DATE = 14-11-1983
 SOURCE FILENAME = ASPOLAP
 AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
XVALUE	REAL	I	X-DATA OF SPECTRAL FUNCTIONS
YVALUE	REAL	I	Y-DATA OF SPECTRAL FUNCTIONS
MAXDIM	INT	I	MAX. NUMBER OF DATA AVAILABLE FOR XVALUE AND YVALUE
ILOWER	INT	I	SMALLEST INDEX OF XVALUE,YVALUE USED IN THIS ROUTINE
IUPPER	INT	I	LARGEST INDEX OF XVALUE,YVALUE USED IN THIS ROUTINE
KENSPE	INT	I	INDEX FOR SPECTRAL FUNCTION KENSPE=1...G0-- 2...G0+- 3...G0++ 4...G1-- 5...G1+- 6...G1++
OGRENZE	REAL	I	UPPER INTERVAL BOUNDARY
UGRENZE	REAL	I	LOWER INTERVAL BOUNDARY
GPOLY	REAL	O	POLYNOMIAL COEFFICIENTS FOR G0,G1
IDIMEN	INT	I	LARGEST POWER OF X IN POLYNOMIAL EXPANSION
MAXPOLY	INT	I	MAX. NUMBER OF POLYNOMIAL COEFFICIENTS AVAILABLE
TEMP	REAL	I	TEMPERATUR
ISWITCH	INT	I	ISWITCH=1...POWERS OF X 2...TCHEBYSHEV POLYNOMS 3...LEGENDRE POLYNOMS

```

C      DECLARATIVE SECTION
C-----
C
C      PARAMETER (KA=6,MAXIND=1000)
C
C      DIMENSION XVALUE(6,MAXDIM),YVALUE(6,MAXDIM),HELPHX(MAXIND),
1CEBXPOT(0:KA,0:KA),FAKT(0:KA),ACTXPOT
1(0:KA,0:KA),HELCOE(0:KA),COEMAT(0:KA,0:KA),XCDEFF(0:KA),
1HELFUN(0:2*KA),GPOLY(2,3,0:MAXPOLY)
C
C      REAL LEGXPOT(0:KA,0:KA)
C      LOGICAL LHELCOE
C
C      DATA ((CEBXPOT(I,J),J=0,KA),I=0,KA) /1.,7*0.,1.,5*0.,-1.,
10.,2.,5*0.,-3.,0.,4.,3*0.,1.,0.,-8.,0.,8.,3*0.,5.,0.,-20.,
10.,16.,0.,-1.,0.,18.,0.,-48.,0.,32./
C
C      DATA ((LEGXPOT(I,J),J=0,KA),I=0,KA) /1.,7*0.,1.,5*0.,-.5
1,0.,1.5,5*0.,-1.5,0.,2.5,3*0.,.375,0.,-3.75,0.,4.375,
13*0.,1.875,0.,-8.75,0.,7.875,0.,-.3125,0.,6.5625,0.,
1-19.6875,0.,14.4375/
C
C      DATA (FAKT(I),I=0,KA) /1.,1.,2.,6.,24.,120.,720./
C-----
C      EXECUTIVE SECTION
C-----
C
C      IS INPUT CONSISTENT WITH PARAMETER STATEMENT
C
C      IF (MAXIND.LT.IUPPER) STOP 'SR ASPOLCO:MAXIND.LT.IUPPER'
C      IF (KA.LT.IDIMEN) STOP 'SR ASPOLCO:KA.LT.IDIMEN'
C
C      INITIALIZE VARIABLES KENNPOL,KS,IDIMEM1
C
C      IF (KENSPE.LE.3) THEN
C        KENNPOL=1
C        KS=KENSPE
C      ELSE
C        KENNPOL=2
C        KS=KENSPE-3
C      ENDIF
C
C      IF (ISWITCH.EQ.1) THEN
C
C        EXPANSION IN POWERS OF X
C
C        DO 30 ICLEAR=0,2*IDIMEN
C          HELFUN(ICLEAR)=0.
C          IF (ICLEAR.LE.IDIMEN) HELCOE(ICLEAR)=0.
30      CONTINUE
C        DO 20 JTAB=ILOWER,IUPPER
C          XPOTMAX=XVALUE(KENSPE,JTAB)**(2*IDIMEN)
C          IF (XVALUE(KENSPE,JTAB).NE.0.) THEN
C            DO 40 IPOT=2*IDIMEN,1,-1
C              HELFUN(IPOT)=HELFUN(IPOT)+XPOTMAX
C              IF (IPOT.LE.IDIMEN) HELCOE(IPOT)=
1      HELCOE(IPOT)+XPOTMAX*YVALUE(KENSPE,JTAB)

```

```
      XPOTMAX=XPOTMAX/XVALUE(KENSPE,JTAB)
40      CONTINUE
      ENDIF
      HELCOE(0)=HELCOE(0)+YVALUE(KENSPE,JTAB)
20      CONTINUE
      HELFUN(0)=FLOAT(IUPPER-ILOWER+1)
C
C      INITIALIZE COEMAT
C
      DO 50 IDIS1=0,IDIMEN
      DO 50 IDIS2=0,IDIMEN
      COEMAT(IDIS1,IDIS2)=HELFUN(IDIS1+IDIS2)
50      CONTINUE
C
C      SOLVE LINEAR EQUATION SYSTEM FOR COEFFICIENTS
C      OF POWERS OF X
C
      CALL ASLIEQS(COEMAT,HELCOE,KA,IDIMEN,XCOEFF)
      ELSE
C
C      EXPANSION IN TCHEBYSHEV OR LEGENDRE POLYNOMS
C
      CONSTK=2./(UGRENZE-UGRENZE)
      CONSTD=(UGRENZE+UGRENZE)/(UGRENZE-UGRENZE)
      DO 110 IDIS=ILOWER,IUPPER
      HELPX(IDIS)=CONSTK*XVALUE(KENSPE,IDIS)+CONSTD
110     CONTINUE
C
C      TCHEBYSHEV OR LEGENDRE POLYNOMS ?
C
      IF (ISWITCH.EQ.2) THEN
      DO 120 IDIS1=0,IDIMEN
      DO 120 IDIS2=0,IDIMEN
      ACTXPOT(IDIS1,IDIS2)=CEBXPOT(IDIS1,IDIS2)
120     CONTINUE
      ELSE
      DO 130 IDIS1=0,IDIMEN
      DO 130 IDIS2=0,IDIMEN
      ACTXPOT(IDIS1,IDIS2)=LEGXPOT(IDIS1,IDIS2)
130     CONTINUE
      ENDIF
C
C
C
      DO 140 ICOEF1=0,IDIMEN
      LHELCOE=.TRUE.
      HELCOE(ICOEF1)=0.
      DO 140 ICOEF2=0,ICOEF1
      COEMAT(ICOEF1,ICOEF2)=0.
C
C      SUM OVER ALL POINTS AVAILABLE
C
      DO 150 JTAB=ILOWER,IUPPER
      SUM1=0.
      XMINPOT=HELPX(JTAB)
C
C      COMPUTE CHEBY. OR LEGEN. POLYNOM FOR X=HELPX(JTAB)
C
      DO 160 ISUM=1,ICOEF1
      SUM1=SUM1+ACTXPOT(ICOEF1,ISUM)*XMINPOT
      XMINPOT=XMINPOT*HELPX(JTAB)
```


- 172 -

```
160  CONTINUE
     IF (LHELCOE) HELCOE(ICDEF1)=HELCOE(ICDEF1)+(SUM1+
1  ACTXPOT(ICDEF1,0))*YVALUE(KENSPE,JTAB)
C
C
     IF (ICDEF1.EQ.ICDEF2) THEN
       SUM2=SUM1
     ELSE
       SUM2=0.
       XMINPOT=HELPM(JTAB)
       DO 170 ISUM=1,ICDEF2
         SUM2=SUM2+ACTXPOT(ICDEF2,ISUM)*XMINPOT
         XMINPOT=XMINPOT*HELPM(JTAB)
170  CONTINUE
     ENDIF
     SUM1=SUM1+ACTXPOT(ICDEF1,0)
     SUM2=SUM2+ACTXPOT(ICDEF2,0)
     COEMAT(ICDEF1,ICDEF2)=COEMAT(ICDEF1,ICDEF2)+SUM1*SUM2
150  CONTINUE
     LHELCOE=.FALSE.
140  CONTINUE
C
C       INITIALIZE MISSING MATRIX ELEMENTS OF COEMAT
C
     DO 180 ICDEF1=0,IDIMEN-1
       DO 180 ICDEF2=ICDEF1,IDIMEN
         COEMAT(ICDEF1,ICDEF2)=COEMAT(ICDEF2,ICDEF1)
180  CONTINUE
C
C       COMPUTE COEFFICIENTS IN CHEBY. OR LEGEN. EXPANSION
C
     CALL ASLIEQS(COEMAT,HELCOE,KA,IDIMEN,XCOEFF)
C
C       COMPUTE COEFFICIENTS IN POWERS OF X EXPANSION
C
     DO 190 IDIS=0,IDIMEN
       HELCOE(IDIS)=0.
       DO 190 ISUM=0,IDIMEN
         HELCOE(IDIS)=HELCOE(IDIS)+ACTXPOT(ISUM,IDIS)*XCOEFF(ISUM)
190  CONTINUE
C
C       COMPUTE COEFFICIENTS IN POWERS OF X EXPANSION
C       FOR FUNCTION DEFINED ON INTERVAL (UGRENZE,OGRENZE)
C
     CONST1=2./(OGRENZE-UGRENZE)
     CONST2=- (OGRENZE+UGRENZE)*.5
     DO 200 IDIS=0,IDIMEN
       XCOEFF(IDIS)=CONST1**IDIS*HELCOE(IDIS)
       DO 200 ISUM=IDIS+1,IDIMEN
         XCOEFF(IDIS)=XCOEFF(IDIS)+CONST1**ISUM*CONST2**(ISUM-
1  IDIS)*HELCOE(ISUM)*FAKT(ISUM)/FAKT(IDIS)/
1  FAKT(ISUM-IDIS)
200  CONTINUE
     ENDIF
C
C       INITIALIZE GPOLY
C
     DO 210 IDIS=0,IDIMEN
       GPOLY(KENNPOL,KS,IDIS)=XCOEFF(IDIS)*TEMP**IDIS
210  CONTINUE
C
```


C

RETURN
END

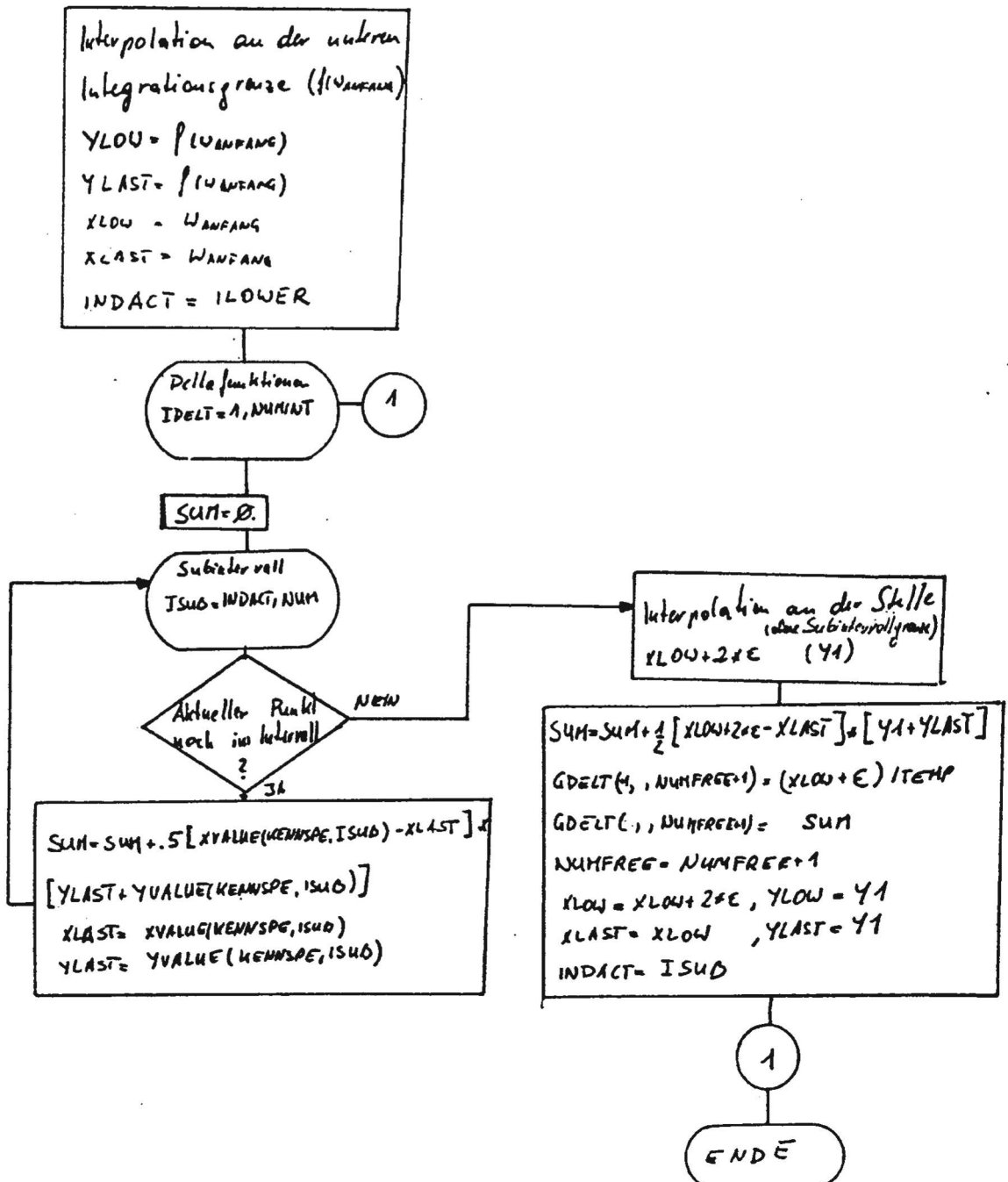
SUBROUTINE ASDELTA

=====

Zweck: Numerische Integration der Spektralfunktionen

Input: Tabelle der Spektralfunktionen (XVALUE,YVALUE), Stützstellenabstand für die numerische Integration der Spektralfunktionen (DELTAW), Zahl der Stützstellen (NUMINT), untere Integrationsgrenze (WSTART), kleinster Index von XVALUE, YVALUE, der in dieser Routine verwendet wird (ILOWER), Kennnummer der Spektralfunktion (KENSPE), erstes freies Feldelement von GDELTA (NUMFREE + 1), Temperatur (TEMP)

Output: X-Koordinaten und Amplituden der Deltasingularitäten (GDELTA), sowie deren Anzahl (IDIMEN)



SUBROUTINE ASDELTA(XVALUE,YVALUE,MAXDIM,NUM,ILOWER,
KSTART,DELTAW,NUMINT,GDELT,MAXDELT,KENSPE,NUMFREE,TEMP)

GENERAL PURPOSE: ADAPT SPECTRAL-FUNCTIONS TO
TC INPUT CONDITIONS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = INTEGRATION OF TABULATED FUNCTION
 ACCORDING TO THE TRAPEZODIAL RULE
 VERSION = 1.0
 DATE = 25-10-1983
 SOURCE FILENAME = ASDELTA
 AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
XVALUE	REAL	I	X-DATA OF SPECTRAL FUNCTIONS
YVALUE	REAL	I	Y-DATA OF SPECTRAL FUNCTIONS
MAXDIM	INT	I	MAX. INDEX AVAILABLE FOR XVALUE AND YVALUE
NUM	INT	I	NUMBER OF DATA USED IN XVALUE AND YVALUE
ILOWER	INT	I	SMALLEST INDEX OF XVALUE,YVALUE USED IN THIS ROUTINE
KSTART	REAL	I	LOWER INTEGRATION BOUNDARY (PHYSIC. DIMENSION: TEMPERATUR)
DELTAW	REAL	I	STEP WIDTH FOR NUMERICAL INTEGRATION (PHYSIC. DIMENSION: TEMPERATUR)
NUMINT	INT	I	NUMBER OF STEPS FOR NUMERICAL INTEGRATION
GDELT	REAL	I/O	DELTA-AMPLITUDES AND X-COORDINATES FOR SPECTRAL FUNCTIONS G0 AND G1
MAXDELT	INT	I	MAX. NUMBER OF DELTA-AMPLITUDES AND X-COORDINATES AVAILABLE
KENSPE	INT	I	INDEX FOR SPECTRAL FUNCTION KENSPE=1...G0-- 2...G0+- 3...G0++ 4...G1-- 5...G1+- 6...G1--
NUMFREE	INT	I/O	NUMFREE+1:= FIRST FREE ARRAY ELEMENT OF GDELT(KENSPE)
TEMP	REAL	I	TEMPERATUR

```
C
C-----
C      DECLARATIVE SECTION
C-----
C
      DIMENSION XVALUE(6,MAXDIM),YVALUE(6,MAXDIM),
      1GDELT(4,3,MAXDELT)
C
      DATA EPS / .0001/
C
C-----
C      EXECUTIVE SECTION
C-----
C
      INITIALIZE VARAIBLES WITH STARTING VALUES
C
      DELTAW2=DELTAW*.5
      IF (KENSPE.LE.3) THEN
        KENN=1
        KS=KENSPE
      ELSE
        KENN=3
        KS=KENSPE-3
      ENDIF
      IF (ILOWER.NE.1) THEN
        CALL ASINPO1(XVALUE(KENSPE,ILOWER-1),XVALUE(KENSPE,ILOWER),
1 YVALUE(KENSPE,ILOWER-1),YVALUE(KENSPE,ILOWER),
1 WSTART,Y1)
      ELSE
        IF (ABS(XVALUE(KENSPE,1)-WSTART).GT.EPS.AND.XVALUE
1 (KENSPE,1).GT.WSTART) STOP
        1'SR ASDDELTA: NO DATA ON OR BELOW LOWER INTEG. BOUND.'
        CALL ASINPO1(XVALUE(KENSPE,1),XVALUE(KENSPE,2),
1 YVALUE(KENSPE,1),YVALUE(KENSPE,2),
1 WSTART,Y1)
      ENDIF
      YLOW=Y1
      YLAST=Y1
      XLOW=WSTART
      XLAST=XLOW
      IF (XVALUE(KENSPE,ILOWER).LE.XLOW) THEN
        INDACT=ILOWER+1
      ELSE
        INDACT=ILOWER
      ENDIF
C
      LOOP TO COMPUTE DELTA AMPLITUDES AND
      X-COORDINATES OF SINGULARITIES
C
      DO 10 IDELT=1,NUMINT
        SUM=0.
        XUPP=XLOW+DELTAW
C
        LOOP FOR NUMERICAL INTEGRATION
C
        DO 20 ISUB=INDACT,NUM
          IF (XVALUE(KENSPE,ISUB).LT.XUPP.AND.ISUB.NE.NUM) THEN
            SUM=SUM+.5*(XVALUE(KENSPE,ISUB)-XLAST)*(YLAST+YVALUE
1 (KENSPE,ISUB))
            XLAST=XVALUE(KENSPE,ISUB)
```



```
      YLAST=YVALUE(KENSPE,ISUB)
    ELSE
      IF (ISUB.EQ.NUM) THEN
        IF (IDELT.NE.NUMINT.OR.ABS(XVALUE(KENSPE,NUM)-XUPP).GT.
1      EPS) STOP
1      'SR ASDelta:NO DATA ON OR BEYOND UPPER INTEG. BOUND.'
      ENDIF
      CALL ASINPOL(XVALUE(KENSPE,ISUB-1),XVALUE(KENSPE,ISUB),
1YVALUE(KENSPE,ISUB-1),YVALUE(KENSPE,ISUB),XUPP,Y1)
      SUM=SUM+.5*(XUPP-XLAST)*(Y1+YLAST)
      GDELT(KENN+1,KS,NUMFREE+1)=(XLOW+DELTAW2)/TEMP
      GDELT(KENN,KS,NUMFREE+1)=SUM/TEMP
      NUMFREE=NUMFREE+1
      XLOW=XLOW+DELTAW
      XLAST=XLOW
      YLOW=Y1
      YLAST=Y1
      INDUCT=ISUB
      GOTO 10
    ENDIF
20  CONTINUE
10  STOP 'SR ASDelta:ILLEGAL POINT OF PROGRAM REACHED'
    CONTINUE
C
C
RETURN
END
```

SUBROUTINE ASINP01(XTAB1,XTAB2,YTAB1,YTAB2,X1,Y1)

GENERAL PURPOSE: ADAPT SPECTRAL-FUNCTIONS TO
TC INPUT CONDITIONS

HOST = CYBER 720
COMPILER = FOR5 R2-TL VERSION 23-9-83
PURPOSE OF ROUTINE = LINEAR INTERPOLATION OF FUNCTION
DETERMINED BY XTAB1,XTAB2,YTAB1 AND
YTAB2
VERSION = 1.0
DATE = 25-10-1983
SOURCE FILENAME = ASINP01
AUTHOR = D. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
XTAB1	REAL	I	FIRST X-VALUE TO SPECIFY FUNCTION
XTAB2	REAL	I	SECOND X-VALUE TO SPECIFY FUNCTION
YTAB1	REAL	I	VALUE OF FUNCTION FOR X=XTAB1
YTAB2	REAL	I	VALUE OF FUNCTION FOR X=XTAB2
X1	REAL	I	X-VALUE FOR REQUESTED Y1
Y1	REAL	O	INTERPOLATED VALUE OF F(X1)

EXECUTIVE SECTION

ANSTIEG=(YTAB2-YTAB1)/(XTAB2-XTAB1)
Y1=ANSTIEG*(X1-XTAB1)+YTAB1

RETURN
END

Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar
The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

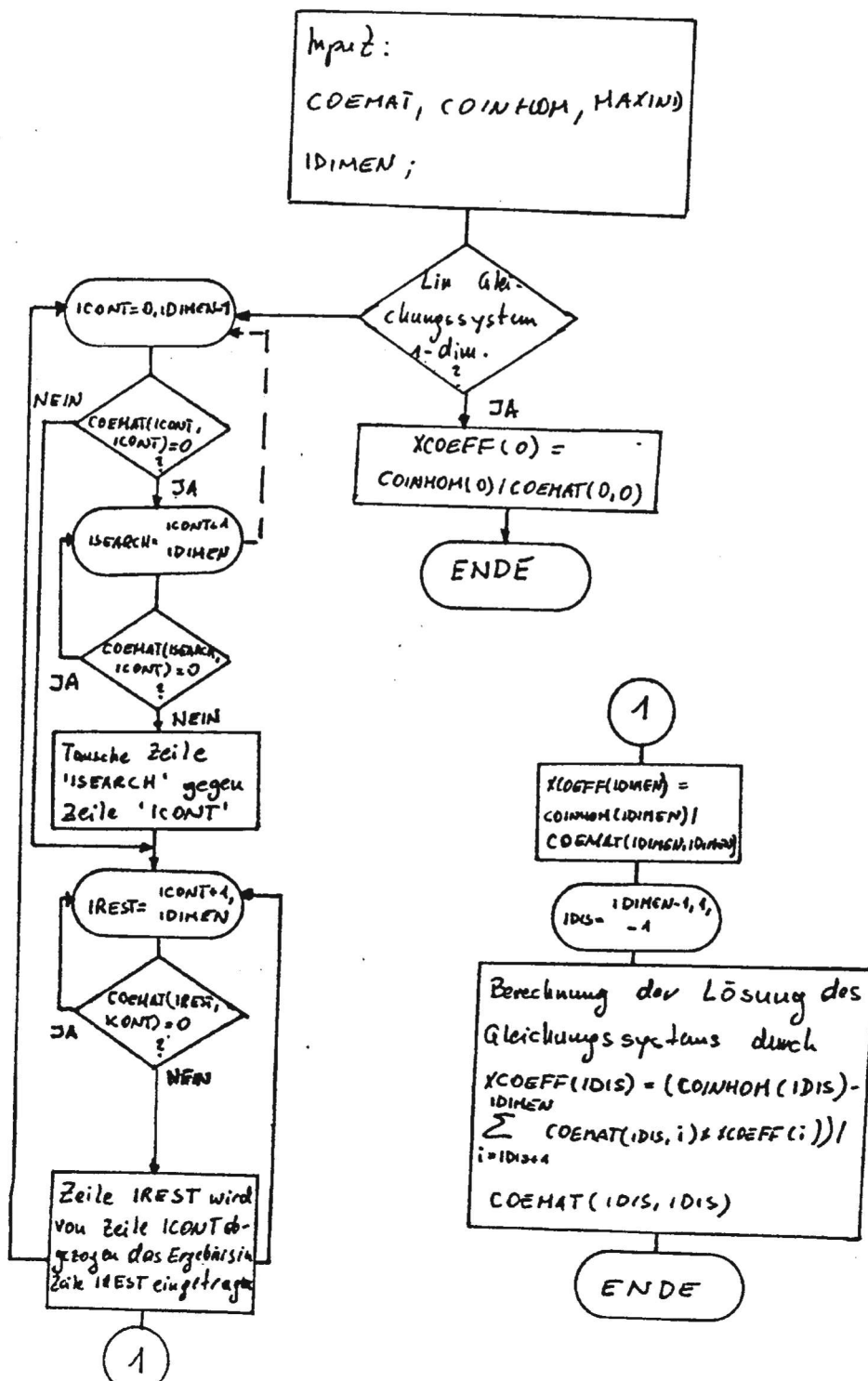
SUBROUTINE ASLIEQS

=====

Zweck: Auflösen eines inhomogenen $n \times n$ Gleichungssystems

Input: Koeffizientenmatrix (COEMAT), Inhomogenitätenvektor des linearen Gleichungssystems (COINHOM), Dimensionierung von COEMAT und COINHOM (MAXIND), angeforderte Dimension von COEMAT und COINHOM (IDIMEN)

Output: Lösungsvektor des linearen inhomogenen Gleichungssystems (XCOEFF)



SUBROUTINE ASLIEQS(COEFMAT,COIHOMO,MAXIND,IDIMEN,XCOEFF)

GENERAL PURPOSE: ADAPT SPECTRAL-FUNCTIONS TO
TC INPUT CONDITIONS

HOST = CYBER 720
COMPILER = FOR5 R2-TL VERSION 23-9-83
PURPOSE OF ROUTINE = SOLVE SYSTEM OF LINEAR EQUATIONS
VERSION = 1.0
DATE = 11-11-1983
SOURCE FILENAME = ASLIEQS
AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
COEFMAT	REAL	I	MATRIX OF COEFFICIENTS OF LINEAR EQUATION SYSTEM
COIHOMO	REAL	I	INHOMOGENE PART SYSTEM OF LINEAR EQUATION
MAXIND	INT	I	MAX. DIMENSION AVAILABLE FOR COEMAT
IDIMEN	INT	I	REQUESTED DIMENSION FOR COEMAT
XCOEFF	REAL	O	SOLUTION OF LINEAR EQUATION SYSTEM

DECLARATIVE SECTION

PARAMETER (KA=6)

DIMENSION COEFMAT(0:MAXIND,0:MAXIND),COIHOMO(0:MAXIND),
1XCOEFF(0:MAXIND),COEMAT(0:KA,0:KA),COINHOM(0:KA)

EXECUTIVE SECTION

IF (KA.LT.IDIMEN) STOP 'SR ASLIEQS:KA.LT.IDIMEN'
IF (IDIMEN.GT.MAXIND) STOP 'SR ASLIEQS:IDIMEN.GT.MAXDIM'

INITIALIZE VARIABLES

DO 110 IDIS1=0,IDIMEN
COINHOM(IDIS1)=COIHOMO(IDIS1)
DO 110 IDIS2=0,IDIMEN
COEMAT(IDIS1,IDIS2)=COEFMAT(IDIS1,IDIS2)
110 CONTINUE
IF (IDIMEN.EQ.0) THEN
XCOEFF(0)=COINHOM(0)/COEMAT(0,0)
GOTO 999
ENDIF

START THE GAUSSIAN ELIMINATION PROCESS


```

DO 10 ICONT=0, IDIMEN-1
IF (COEMAT(ICONT, ICONT).EQ.0.) THEN
DO 20 ISEARCH=ICONT+1, IDIMEN
IF (COEMAT(ISEARCH, ICONT).NE.0.) GOTO 30
CONTINUE
GOTO 10

C
C
C      REARRANGE COEMAT:COEMAT(ICONT, ICONT).NE.0

30      DO 40 IDIS=ICONT, IDIMEN
HELP=COEMAT(ICONT, IDIS)
COEMAT(ICONT, IDIS)=COEMAT(ISEARCH, IDIS)
COEMAT(ISEARCH, IDIS)=HELP
CONTINUE

40      C
C
C      REARRANGE COINHOM

HELP=COINHOM(ICONT)
COINHOM(ICONT)=COINHOM(ISEARCH)
COINHOM(ISEARCH)=HELP
ENDIF
CONST1=COEMAT(ICONT, ICONT)

C
C
C      ELIMINATE FIRST COEFFICIENT

DO 50 IREST=ICONT+1, IDIMEN
IF (COEMAT(IREST, ICONT).EQ.0.) GOTO 50
CONST=COEMAT(IREST, ICONT)
DO 60 JREST=ICONT+1, IDIMEN
COEMAT(IREST, JREST)=COEMAT(ICONT, JREST)/CONST1-COEMAT
1(IREST, JREST)/CONST
CONTINUE
COINHOM(IREST)=COINHOM(ICONT)/CONST1-COINHOM(IREST)/
1CONST
COEMAT(IREST, ICONT)=0.
CONTINUE
CONTINUE

50
10
C
C
C      COMPUTE XCOEFF-SOLUTION OF LIN.EQ.SYSTEM

XCOEFF(IDIMEN)=COINHOM(IDIMEN)/COEMAT(IDIMEN, IDIMEN)
DO 70 IDIS=IDIMEN-1, 0, -1
IF (COEMAT(IDIS, IDIS).EQ.0.) STOP
1'SR ASLIEQS:FAILED SOLVING LIN.EQ.SYSTEM'
SUM=0.
DO 80 ISUM=IDIS+1, IDIMEN
SUM=SUM+COEMAT(IDIS, ISUM)*XCOEFF(ISUM)
CONTINUE
XCOEFF(IDIS)=(COINHOM(IDIS)-SUM)/COEMAT(IDIS, IDIS)
CONTINUE

C
C
C
999      RETURN
END

```

A.2.1.3 Das Programmpaket TC

Das Programmpaket TC dient dazu, ausgehend von den Spektralfunktionen $G_{--}^0, \dots, G_{++}^1$, gegeben in der Form

$$\begin{aligned} G_{SS'}^0(\omega) &= \sum_{i=0}^{j_{SS'}} ss'_{a_i} \omega^i + \sum_{i=1}^{l_{SS'}} ss'_{\hat{a}_i} \delta(\omega - \omega_i) \\ G_{SS'}^1(\omega) &= \sum_{i=0}^{k_{SS'}} ss'_{b_i} \omega^i + \sum_{i=1}^{q_{SS'}} ss'_{\hat{b}_i} \delta(\omega - \omega_i), \quad (\omega = j\omega) \end{aligned}$$

die Transportkoeffizienzen elektrischer Widerstand, Seebeckkoeffizient und Wärmeleitfähigkeit zu berechnen.

Seitenverzeichnis für die Programmeinheiten

SUBROUTINE	TCTRCOE	183
SUBROUTINE	TCCOLIS	187
SUBROUTINE	TCFESUR	192
FUNCTION	TCSPEC0	195
FUNCTION	TCDELTO	198
FUNCTION	TCPOLY0	201
FUNCTION	TCSPEC1	204
FUNCTION	TCDELT1	207
FUNCTION	TCPOLY1	210
FUNCTION	TCCOEFF	213
SUBROUTINE	TCCOCOE	216
FUNCTION	TCINTEG	221
SUBROUTINE	TCMAINV	226

SUBROUTINE TCTRCOE

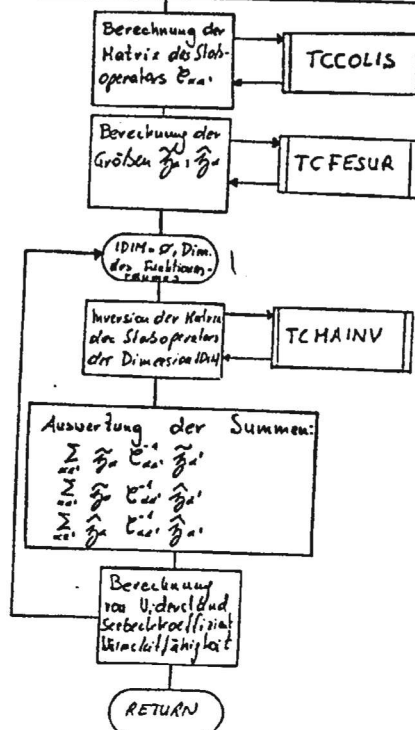
=====

Zweck: Berechnen der Transportkoeffizienten Elektrischer Widerstand, Seebeckkoeffizient, Wärmeleitfähigkeit

Input: Polynomkoeffizienten für die Spektralfunktionen G_{ss}^0 und G_{ss}^1 (GPOLY), Delta-Amplituden und X-Koordinaten der Delta-Singularitäten für G_{ss}^0 und G_{ss}^1 (GDELT), Anzahl der Polynomkoeffizienten und Deltafunktionen für jede Spektralfunktion (IDIMEN), Max. Anzahl der Polynomkoeffizienten (MAXPOLY), Max. Anzahl der Deltafunktionen (MAXDELTA), Ende der Polynomentwicklung (DEBTEMP), $\bar{v}(0)$ (VELDEN0), $\bar{v}'(0)$ (VELDEN1), Temperatur (TEMP), Max. Dimension der Matrix des Stoßoperators (MAXDIM)

Output: El. Widerstand (RESEST), Seebeckkoeffizient (TERPOW), Wärmeleitfähigkeit (HEATCON)

Start: Input $\rightarrow$ Polynomkoeffizienten für 3 S.F. G_{ss}^0 und 3 S.F. G_{ss}^1 (GPOLY); Delta-Amplituden und x-Koordinaten der Delta-Singularitäten für G_{ss}^0 und G_{ss}^1 (GDELT) Relevante Indizes für GPOLY, GDELT und Dimension des Funktionsraumes (IDIMEN); Max. Anzahl an Polynom Koeffizienten (MAXPOLY); Max. Dimension der Matrix des Stoßoperators (MAXDIM); Max. Anzahl an Deltafunktionen (MAXDELTA); Debye-Temperatur (DEBTEMP); (VELDEN0); (VELDEN1); Temperatur (TEMP)



SUBROUTINE TCTRCOE(GPOLY,GDELT,IDIMEN,MAXDIM,MAXPOLY,
1MAXDELT,DEBTEMP,VELDEN0,VELDEN1,TEMP,RESEST,TERPOW,
1HEATCON)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS

HOST = CYBER 720
COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-63
PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE TRANSPORT COEFFICIENTS
VERSION = 1.0
DATE = 12-10-1983
SOURCE FILENAME = TCTRCOE
AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
GPOLY	REAL	I	POLYNOM COEFFICIENTS OF G0 AND G1
GPOLY(I1,I2,J)			I1=1...G0 POLYNOM COEFFICIENTS (PHYSIC. DIMENSION: 0) I2=1...G0-- I2=2...G0+- = G0-+ I2=3...G0++ I1=2...G1 POLYNOM COEFFICIENTS (PHYSIC. DIMENSION: [1/K]) FOR I2 SEE I1=1
GDELT	REAL	I	DELTA-AMPLITUDES AND X-COORDINATES OF DELTA SINGULARITIES OF G0 AND G1
GDELT(I1,I2,J)			I1=1...G0 DELTA AMPLITUDES (PHYSIC. DIMENSION: 0) I1=2...G0 X-COORDINATES OF DELTA SINGULARITIES (PHYSIC. DIMENSION: 0) I1=3...G1 DELTA AMPLITUDES (PHYSIC. DIMENSION: [1/K]) I1=4...G1 X-COORDINATES OF DELTA SINGULARITIES (PHYSIC. DIMENSION: 0) FOR I2 SEE GPOLY
IDIMEN	INT	I	IDIMEN(1-3)...REQ. INDICES FOR SPEPOLO IDIMEN(4-6)... FOR SPEDELO IDIMEN(7-9)... FOR SPEPOL1 IDIMEN(10-12)... FOR SPEDEL1 IDIMEN(13)...REQUESTED DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
MAXDIM	INT	I	MAX. DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
MAXPOLY	INT	I	MAX. NUMBER OF POLYNOM COEFFICIENTS
MAXDELT	INT	I	MAX. NUMBER OF DELTA FUNCTIONS
DEBTEMP	REAL	I	DEBEY TEMPERATUR


```

C
C      VELDEN0    REAL    I      (<V**2>*N)(E=0):AVERAGED SQUARE LF
C                                     VELOCITY TIMES DENSITY OF STATES
C                                     ON THE FERMI SURFACE
C
C      VELDEN1    REAL    I      (<V**2>*N)'(E=0)
C
C      TEMP       REAL    I      TEMPERATUR
C
C      RESEST     REAL    O      ELECTRICAL RESESTIVITY
C
C      TERPOW     REAL    O      THERMOPOWER
C
C      HEATCON    REAL    O      HEAT CONDUCTIVITY

```

DECLARATIVE SECTION

```

C      PARAMETER (CONRES=3.22956E54,CONTERP=-86.17080,
C1CONHEAT=2.29920E-54,VOLMASS=9.10956E-61,MADIM=6)

```

```

C      DIMENSION GPOLY(2,3,0:MAXPOLY),GDELT(4,3,MAXDELT),
C1QELEKTR(0:MADIM),QELTEMP(0:MADIM),COLIMAT(0:MADIM,
C10:MADIM),IDIMEN(13),
C1COLIINV(0:MADIM,0:MADIM),RESEST(0:MAXDIM),
C1TERPOW(0:MAXDIM),HEATCON(0:MAXDIM)

```

EXECUTIVE SECTION

```

C      IS INPUT O.K.?

```

```

C      IF (MAXDIM.NE.MADIM) STOP 'SR TCTRCE:MAXDIM.NE.MADIM'

```

```

C      COMPUTE MATRIX OF COLLISION OPERATOR

```

```

C      WRITE(6,12)

```

```

12  FORMAT('1',10X,'C O L I M A T :',/,/,/,/)

```

```

C      CALL TCCOLIS(GPOLY,GDELT,IDIMEN,MAXDIM,MAXPOLY,
C1      MAXDELT,DEBTEMP,TEMP,COLIMAT)

```

```

13  WRITE(6,13) ((COLIMAT(I,J),J=0,MADIM),I=0,MADIM)
C      FORMAT((11X,7(E10.3,3X),/))

```

```

C      COMPUTE QELEKTR AND QELTEMP

```

```

C      CALL TCFESUR(VELDEN0,VELDEN1,TEMP,MAXDIM,QELEKTR,
C1      QELTEMP)

```

```

C      START LOOP FOR VARYING DIMENSION OF MATRIX OF
C      COLLISION OPERATOR

```

```

C      DO 50 IDIM=0,IDIMEN(13)

```

```

C      CALL TCMAINV(COLIMAT,COLIINV,MAXDIM,IDIM)

```

```

C      SUM1=0.

```

```

C      SUM2=0.

```

```

C      SUM3=0.

```

```

C      DO 100 KA1=0,IDIM

```

```
DO 100 KA2=0, IDIM  
SUM1=SUM1+QELEKTR(KA1)*COLIINV(KA1,KA2)*QELEKTR(KA2)  
SUM2=SUM2+QELEKTR(KA1)*COLIINV(KA1,KA2)*QELTEMP(KA2)  
SUM3=SUM3+QELTEMP(KA1)*COLIINV(KA1,KA2)*QELTEMP(KA2)  
100 CONTINUE
```

C

C

```
RESEST(IDIM)=CONRES*TEMP*VCLMASS/SUM1  
TERPOW(IDIM)=CONTERP*SUM2/SUM1  
HEATCON(IDIM)=CONHEAT/VCLMASS*SUM3  
50 CONTINUE
```

C

C

C

```
RETURN  
END
```

SUBROUTINE TCCOLIS

=====

Zweck: Berechnen der Matrix des Stoßoperators

Input: Polynomkoeffizienten für G_{ss}^0 und G_{ss}^1 (GPOLY), Delta-Amplituden und X-Koordinaten der Deltasingularitäten für G_{ss}^0 und G_{ss}^1 (GDELTA), Indexfelder für Polynomkoeffizienten und Deltafunktionen von G_{ss}^0 und G_{ss}^1 (IDIMEN), Max. Anzahl der Polynomkoeffizienten (MAXPOLY), Max. Anzahl der Deltafunktionen (MAXDELTA), Ende der Polynomentwicklung (DEBTEMP), Temperatur (TEMP), Dimension der Matrix des Stoßoperators (IDIMEN), Max. Dimension der Matrix des Stoßoperators (MAXDIM)

Output: Matrix des Stoßoperators (COLIMAT)

Start → Input: Polynomkoeffizienten für 3 S.F. G_{ss}^0 und 3 S.F. G_{ss}^1 (GPOLY); Delta-Amplituden und X-Koordinaten der Delta-Singularitäten für G_{ss}^0 und G_{ss}^1 (GDELTA); Relevante Indizes für GPOLY, GDELTA und Dimension des Funktionsraumes (IDIMEN); MAX. Dimension der Matrix des Stoßoperators (MAXDIM); Max. Anzahl an Polynomkoeffizienten (MAXPOLY); Max. Anzahl an Deltafunktionen (MAXDELTA); Debey-Temperatur (DEBTEMP); Temperatur (TEMP);

Übertragung der Input Daten von GPOLY auf SPEPOL0, SPEPOL1, von GDELTA auf SPEDEL0, VALDEL0, SPEDEL1 und VALDEL1; von IDIMEN auf IDIMEN0, IDIMEN1, IDIMEN2, IDIMEN3 und von DEBTEMP/TEMP auf DBREME

KA1, KA2 = 0,
Dimension des Funktionsraumes

Berechnung und Summation der Beiträge von G und G^1 zum Matrixelement $C_{\alpha\beta}$

TCSPEC0

TCSPEC1

RETURN

1 SUBROUTINE TCCCLIS(GPOLY,GDELT,IDIMEN,MAXDIM,MAXPOLY,
MAXDELT,DEBTEMP,TEMP,COLIMAT)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE MATRICELEMENT OF COLLISION
 OPERATOR
 VERSION = 1.0
 DATE = 11-10-1983
 SOURCE FILENAME = TCCCLIS
 AUTHOR = G. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
GPOLY	REAL	I	POLYNOM COEFFICIENTS FOR G0 AND G1
GPOLY(I1,I2,J)			I1=1...G0 POLYNOM COEFFICIENTS I2=1...G0-- I2=2...G0+- = G0-+ I2=3...G0++ I1=2...G1 POLYNOM COEFFICIENTS FOR I2 SEE I1=1
GDELT	REAL	I	DELTA-AMPLITUDES AND X-COORDINATES OF DELTA-SINGULARITIES OF G0 AND G1
GDELT(I1,I2,J)			I1=1...G0 DELTA AMPLITUDES I1=2...G0 X-COORDINATES OF DELTA SINGULARITIES I1=3...G1 DELTA AMPLITUDES I1=4...G1 X-COORDINATES OF DELTA SINGULARITIES FOR I2 SEE GPOLY
IDMEN	INT	I	IDIMEN(1-3)...REQ. INDICES FOR SPEPOLO IDIMEN(4-6)... FOR SPEDELO IDIMEN(7-9)... FOR SPEPOL1 IDIMEN(10-12)... FOR SPEDEL1 IDIMEN(13)...REQUESTED DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
MAXDIM	INT	I	MAX. DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
MAXPOLY	INT	I	MAX. INDEX AVAILABLE FOR SPEPOLO AND SPEPOL1
MAXDELT	INT	I	MAX. INDEX ALLOWED FOR SPEDELO,VALDELO, SPEDEL1 AND VALDEL1
DEBTEMP	REAL	I	DEBEY TEMPERATUR (PHYSIC. DIMENSION: TEMPERATUR)
TEMP	REAL	I	TEMPERATUR

- 189 -

C COLIMAT REAL D MATRIX OF COLLISION OPERATOR

C
C-----
C DECLARATIVE SECTION
C-----

C
C PARAMETER (MAPOL=6,MADELT=300)

C
C DIMENSION GPOLY(2,3,0:MAXPOLY),GDELT(4,3,MAXDELT),
C 1SPEPOL0(4,0:MAPOL),SPEDELO(4,MADELT),
C 1VALDELO(4,MADELT),
C 1SPEPOL1(4,0:MAPOL),SPEDEL1(4,MADELT),
C 1VALDEL1(4,MADELT),
C 1IDIMENO(4),IDIMEN1(4),IDIMEN2(4),IDIMEN3(4),IDIMEN(13),
C 1COLIMAT(0:MAXDIM,0:MAXDIM),FAKT(0:20)

C
C DATA (FAKT(I),I=0,20) /.10000000000000E+01,
C 1.10000000000000E+01,
C 1.20000000000000E+01,
C 1.60000000000000E+01,
C 1.24000000000000E+02,
C 1.12000000000000E+03,
C 1.72000000000000E+03,
C 1.50400000000000E+04,
C 1.40320000000000E+05,
C 1.36288000000000E+06,
C 1.36288000000000E+07,
C 1.39916800000000E+08,
C 1.47900160000000E+09,
C 1.62270208000000E+10,
C 1.87178291200000E+11,
C 1.13076743680000E+13,
C 1.20922789888000E+14,
C 1.35568742809600E+15,
C 1.6402373705728E+16,
C 1.1216451004088E+18,.2432902008177E+19/

C
C-----
C EXECUTIVE SECTION
C-----

C
C IS INPUT COSISTENT WITH PARAMETER VALUES?

C
C IF (MAPOL.NE.MAXPOLY) STOP 'SR TCCCLIS:MAPOL.NE.MAXPOLY'
C IF (MADELT.NE.MAXDELT) STOP 'SR TCCCLIS:MADELT.NE.MAXDELT'

C
C INITIALIZE IDIMENX() X=0,3

C
C IDIMENO(1)=IDIMEN(1)
C IDIMENO(2)=IDIMEN(2)
C IDIMENO(3)=IDIMEN(2)
C IDIMENO(4)=IDIMEN(3)

C
C IDIMEN1(1)=IDIMEN(4)
C IDIMEN1(2)=IDIMEN(5)
C IDIMEN1(3)=IDIMEN(5)
C IDIMEN1(4)=IDIMEN(6)

C
C

- 190 -

```

IDIMEN2(1)=IDIMEN(7)
IDIMEN2(2)=IDIMEN(8)
IDIMEN2(3)=IDIMEN(8)
IDIMEN2(4)=IDIMEN(9)

```

C
C

```

IDIMEN3(1)=IDIMEN(10)
IDIMEN3(2)=IDIMEN(11)
IDIMEN3(3)=IDIMEN(11)
IDIMEN3(4)=IDIMEN(12)

```

C
C
C
C
C

```

      INITIALIZE SPEPOL,SPEDEL AND VALDEL

```

```

DO 50 I=0,IDIMEN0(1)
SPEPOL0(1,I)=GPOLY(1,1,1)
50  CONTINUE
DO 100 I=0,IDIMEN0(2)
SPEPOL0(2,I)=GPOLY(1,2,1)
SPEPOL0(3,I)=SPEPOL0(2,I)
100 CONTINUE
DO 150 I=0,IDIMEN0(4)
SPEPOL0(4,I)=GPOLY(1,3,1)
150 CONTINUE

```

C
C

```

DO 200 I=1,IDIMEN1(1)
SPEDEL0(1,I)=GDELT(1,1,I)
VALDEL0(1,I)=GDELT(2,1,1)
200 CONTINUE
DO 250 I=1,IDIMEN1(2)
SPEDEL0(2,I)=GDELT(1,2,I)
SPEDEL0(3,I)=SPEDEL0(2,I)
VALDEL0(2,I)=GDELT(2,2,I)
VALDEL0(3,I)=VALDEL0(2,1)
250 CONTINUE
DO 300 I=1,IDIMEN1(4)
SPEDEL0(4,I)=GDELT(1,3,1)
VALDEL0(4,I)=GDELT(2,3,1)
300 CONTINUE

```

C
C

```

DO 350 I=0,IDIMEN2(1)
SPEPOL1(1,I)=GPOLY(2,1,1)
350 CONTINUE
DO 400 I=0,IDIMEN2(2)
SPEPOL1(2,I)=GPOLY(2,2,1)
SPEPOL1(3,I)=SPEPOL1(2,I)
400 CONTINUE
DO 450 I=0,IDIMEN2(4)
SPEPOL1(4,I)=GPOLY(2,3,1)
450 CONTINUE

```

C
C

```

DO 500 I=1,IDIMEN3(1)
SPEDEL1(1,I)=GDELT(3,1,I)
VALDEL1(1,I)=GDELT(4,1,1)
500 CONTINUE
DO 550 I=1,IDIMEN3(2)
SPEDEL1(2,I)=GDELT(3,2,I)

```

- 191 -

```
      SPEDEL1(3,I)=SPEDEL1(2,1)
      VALDEL1(2,I)=GDELT(4,2,I)
      VALDEL1(3,I)=VALDEL1(2,I)
550    CONTINUE
      DO 600 I=1,IDIMEN3(4)
      SPEDEL1(4,I)=GDELT(3,3,1)
      VALDEL1(4,I)=GDELT(4,3,1)
600    CONTINUE
      C
      C
      C      START COMPUTATION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
      C
      DGRENZE=DEBTEMP/TEMP
      DO 650 KA1=0,IDIMEN(13)
      DO 650 KA2=0,IDIMEN(13)
      COLIMAT(KA1,KA2)=(TCSPECO(KA1,KA2,SPEP0LO,IDIMEN0,
1MAXPOLY,DGRENZE,SPEDELO,VALDELO,IDIMEN1,MAXDELT)+
1TCSPEC1(KA1,KA2,SPEPOL1,IDIMEN2,MAXPOLY,DGRENZE,
1SPEDEL1,VALDEL1,IDIMEN3,MAXDELT)*TEMP)/FAKT(KA1)/FAKT(KA2)
650    CONTINUE
      C
      C
      RETURN
      END
```

SUBROUTINE TCFESUR

=====

Zweck: Berechnen der Größen $\tilde{z}_n, \hat{z}_n$

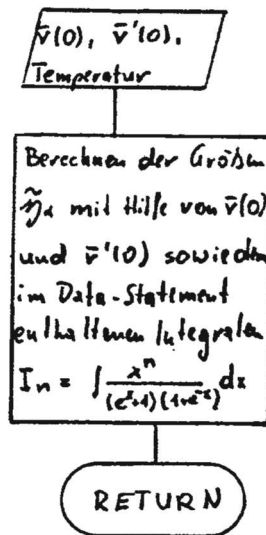
Input: $\bar{v}(0)$ (VELDEN0), $\bar{v}'(0)$ (VELDEN1), Temperatur (TEMP),
Max. Anzahl der $\tilde{z}$ (MAXDIM)

Output: $\tilde{z}$ (QELEKTR), $\hat{z}$ (QELTEMP)

Gleichungen:

$$\hat{z}_n = \tilde{z}_{n+1}$$

$$\tilde{z}_n = - \left[\bar{v}(0) \int dE \frac{\partial f^0}{\partial E} (\beta E)^\alpha + \frac{\bar{v}'(0)}{\beta} \int dE \frac{\partial f^0}{\partial E} (\beta E)^{\alpha+1} \right]$$



- 193 -

1 SUBROUTINE TCFESUR(VELDEN0,VELDEN1,TEMP,MAXDIM,CELEKTR,
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99
100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117
118
119
120
121
122
123
124
125
126
127
128
129
130
131
132
133
134
135
136
137
138
139
140
141
142
143
144
145
146
147
148
149
150
151
152
153
154
155
156
157
158
159
160
161
162
163
164
165
166
167
168
169
170
171
172
173
174
175
176
177
178
179
180
181
182
183
184
185
186
187
188
189
190
191
192
193
194
195
196
197
198
199
200
201
202
203
204
205
206
207
208
209
210
211
212
213
214
215
216
217
218
219
220
221
222
223
224
225
226
227
228
229
230
231
232
233
234
235
236
237
238
239
240
241
242
243
244
245
246
247
248
249
250
251
252
253
254
255
256
257
258
259
260
261
262
263
264
265
266
267
268
269
270
271
272
273
274
275
276
277
278
279
280
281
282
283
284
285
286
287
288
289
290
291
292
293
294
295
296
297
298
299
300
301
302
303
304
305
306
307
308
309
310
311
312
313
314
315
316
317
318
319
320
321
322
323
324
325
326
327
328
329
330
331
332
333
334
335
336
337
338
339
340
341
342
343
344
345
346
347
348
349
350
351
352
353
354
355
356
357
358
359
360
361
362
363
364
365
366
367
368
369
370
371
372
373
374
375
376
377
378
379
380
381
382
383
384
385
386
387
388
389
390
391
392
393
394
395
396
397
398
399
400
401
402
403
404
405
406
407
408
409
410
411
412
413
414
415
416
417
418
419
420
421
422
423
424
425
426
427
428
429
430
431
432
433
434
435
436
437
438
439
440
441
442
443
444
445
446
447
448
449
450
451
452
453
454
455
456
457
458
459
460
461
462
463
464
465
466
467
468
469
470
471
472
473
474
475
476
477
478
479
480
481
482
483
484
485
486
487
488
489
490
491
492
493
494
495
496
497
498
499
500
501
502
503
504
505
506
507
508
509
510
511
512
513
514
515
516
517
518
519
520
521
522
523
524
525
526
527
528
529
530
531
532
533
534
535
536
537
538
539
540
541
542
543
544
545
546
547
548
549
550
551
552
553
554
555
556
557
558
559
560
561
562
563
564
565
566
567
568
569
570
571
572
573
574
575
576
577
578
579
580
581
582
583
584
585
586
587
588
589
590
591
592
593
594
595
596
597
598
599
600
601
602
603
604
605
606
607
608
609
610
611
612
613
614
615
616
617
618
619
620
621
622
623
624
625
626
627
628
629
630
631
632
633
634
635
636
637
638
639
640
641
642
643
644
645
646
647
648
649
650
651
652
653
654
655
656
657
658
659
660
661
662
663
664
665
666
667
668
669
670
671
672
673
674
675
676
677
678
679
680
681
682
683
684
685
686
687
688
689
690
691
692
693
694
695
696
697
698
699
700
701
702
703
704
705
706
707
708
709
710
711
712
713
714
715
716
717
718
719
720
721
722
723
724
725
726
727
728
729
730
731
732
733
734
735
736
737
738
739
740
741
742
743
744
745
746
747
748
749
750
751
752
753
754
755
756
757
758
759
760
761
762
763
764
765
766
767
768
769
770
771
772
773
774
775
776
777
778
779
780
781
782
783
784
785
786
787
788
789
790
791
792
793
794
795
796
797
798
799
800
801
802
803
804
805
806
807
808
809
810
811
812
813
814
815
816
817
818
819
820
821
822
823
824
825
826
827
828
829
830
831
832
833
834
835
836
837
838
839
840
841
842
843
844
845
846
847
848
849
850
851
852
853
854
855
856
857
858
859
860
861
862
863
864
865
866
867
868
869
870
871
872
873
874
875
876
877
878
879
880
881
882
883
884
885
886
887
888
889
890
891
892
893
894
895
896
897
898
899
900
901
902
903
904
905
906
907
908
909
910
911
912
913
914
915
916
917
918
919
920
921
922
923
924
925
926
927
928
929
930
931
932
933
934
935
936
937
938
939
940
941
942
943
944
945
946
947
948
949
950
951
952
953
954
955
956
957
958
959
960
961
962
963
964
965
966
967
968
969
970
971
972
973
974
975
976
977
978
979
980
981
982
983
984
985
986
987
988
989
990
991
992
993
994
995
996
997
998
999
1000
1001
1002
1003
1004
1005
1006
1007
1008
1009
1010
1011
1012
1013
1014
1015
1016
1017
1018
1019
1020
1021
1022
1023
1024
1025
1026
1027
1028
1029
1030
1031
1032
1033
1034
1035
1036
1037
1038
1039
1040
1041
1042
1043
1044
1045
1046
1047
1048
1049
1050
1051
1052
1053
1054
1055
1056
1057
1058
1059
1060
1061
1062
1063
1064
1065
1066
1067
1068
1069
1070
1071
1072
1073
1074
1075
1076
1077
1078
1079
1080
1081
1082
1083
1084
1085
1086
1087
1088
1089
1090
1091
1092
1093
1094
1095
1096
1097
1098
1099
1100
1101
1102
1103
1104
1105
1106
1107
1108
1109
1110
1111
1112
1113
1114
1115
1116
1117
1118
1119
1120
1121
1122
1123
1124
1125
1126
1127
1128
1129
1130
1131
1132
1133
1134
1135
1136
1137
1138
1139
1140
1141
1142
1143
1144
1145
1146
1147
1148
1149
1150
1151
1152
1153
1154
1155
1156
1157
1158
1159
1160
1161
1162
1163
1164
1165
1166
1167
1168
1169
1170
1171
1172
1173
1174
1175
1176
1177
1178
1179
1180
1181
1182
1183
1184
1185
1186
1187
1188
1189
1190
1191
1192
1193
1194
1195
1196
1197
1198
1199
1200
1201
1202
1203
1204
1205
1206
1207
1208
1209
1210
1211
1212
1213
1214
1215
1216
1217
1218
1219
1220
1221
1222
1223
1224
1225
1226
1227
1228
1229
1230
1231
1232
1233
1234
1235
1236
1237
1238
1239
1240
1241
1242
1243
1244
1245
1246
1247
1248
1249
1250
1251
1252
1253
1254
1255
1256
1257
1258
1259
1260
1261
1262
1263
1264
1265
1266
1267
1268
1269
1270
1271
1272
1273
1274
1275
1276
1277
1278
1279
1280
1281
1282
1283
1284
1285
1286
1287
1288
1289
1290
1291
1292
1293
1294
1295
1296
1297
1298
1299
1300
1301
1302
1303
1304
1305
1306
1307
1308
1309
1310
1311
1312
1313
1314
1315
1316
1317
1318
1319
1320
1321
1322
1323
1324
1325
1326
1327
1328
1329
1330
1331
1332
1333
1334
1335
1336
1337
1338
1339
1340
1341
1342
1343
1344
1345
1346
1347
1348
1349
1350
1351
1352
1353
1354
1355
1356
1357
1358
1359
1360
1361
1362
1363
1364
1365
1366
1367
1368
1369
1370
1371
1372
1373
1374
1375
1376
1377
1378
1379
1380
1381
1382
1383
1384
1385
1386
1387
1388
1389
1390
1391
1392
1393
1394
1395
1396
1397
1398
1399
1400
1401
1402
1403
1404
1405
1406
1407
1408
1409
1410
1411
1412
1413
1414
1415
1416
1417
1418
1419
1420
1421
1422
1423
1424
1425
1426
1427
1428
1429
1430
1431
1432
1433
1434
1435
1436
1437
1438
1439
1440
1441
1442
1443
1444
1445
1446
1447
1448
1449
1450
1451
1452
1453
1454
1455
1456
1457
1458
1459
1460
1461
1462
1463
1464
1465
1466
1467
1468
1469
1470
1471
1472
1473
1474
1475
1476
1477
1478
1479
1480
1481
1482
1483
1484
1485
1486
1487
1488
1489
1490
1491
1492
1493
1494
1495
1496
1497
1498
1499
1500
1501
1502
1503
1504
1505
1506
1507
1508
1509
1510
1511
1512
1513
1514
1515
1516
1517
1518
1519
1520
1521
1522
1523
1524
1525
1526
1527
1528
1529
1530
1531
1532
1533
1534
1535
1536
1537
1538
1539
1540
1541
1542
1543
1544
1545
1546
1547
1548
1549
1550
1551
1552
1553
1554
1555
1556
1557
1558
1559
1560
1561
1562
1563
1564
1565
1566
1567
1568
1569
1570
1571
1572
1573
1574
1575
1576
1577
1578
1579
1580
1581
1582
1583
1584
1585
1586
1587
1588
1589
1590
1591
1592
1593
1594
1595
1596
1597
1598
1599
1600
1601
1602
1603
1604
1605
1606
1607
1608
1609
1610
1611
1612
1613
1614
1615
1616
1617
1618
1619
1620
1621
1622
1623
1624
1625
1626
1627
1628
1629
1630
1631
1632
1633
1634
1635
1636
1637
1638
1639
1640
1641
1642
1643
1644
1645
1646
1647
1648
1649
1650
1651
1652
1653
1654
1655
1656
1657
1658
1659
1660
1661
1662
1663
1664
1665
1666
1667
1668
1669
1670
1671
1672
1673
1674
1675
1676
1677
1678
1679
1680
1681
1682
1683
1684
1685
1686
1687
1688
1689
1690
1691
1692
1693
1694
1695
1696
1697
1698
1699
1700
1701
1702
1703
1704
1705
1706
1707
1708
1709
1710
1711
1712
1713
1714
1715
1716
1717
1718
1719
1720
1721
1722
1723
1724
1725
1726
1727
1728
1729
1730
1731
1732
1733
1734
1735
1736
1737
1738
1739
1740
1741
1742
1743
1744
1745
1746
1747
1748
1749
1750
1751
1752
1753
1754
1755
1756
1757
1758
1759
1760
1761
1762
1763
1764
1765
1766
1767
1768
1769
1770
1771
1772
1773
1774
1775
1776
1777
1778
1779
1780
1781
1782
1783
1784
1785
1786
1787
1788
1789
1790
1791
1792
1793
1794
1795
1796
1797
1798
1799
1800
1801
1802
1803
1804
1805
1806
1807
1808
1809
1810
1811
1812
1813
1814
1815
1816
1817
1818
1819
1820
1821
1822
1823
1824
1825
1826
1827
1828
1829
1830
1831
1832
1833
1834
1835
1836
1837
1838
1839
1840
1841
1842
1843
1844
1845
1846
1847
1848
1849
1850
1851
1852
1853
1854
1855
1856
1857
1858
1859
1860
1861
1862
1863
1864
1865
1866
1867
1868
1869
1870
1871
1872
1873
1874
1875
1876
1877
1878
1879
1880
1881
1882
1883
1884
1885
1886
1887
1888
1889
1890
1891
1892
1893
1894
1895
1896
1897
1898
1899
1900
1901
1902
1903
1904
1905
1906
1907
1908
1909
1910
1911
1912
1913
1914
1915
1916
1917
1918
1919
1920
1921
1922
1923
1924
1925
1926
1927
1928
1929
1930
1931
1932
1933
1934
1935
1936
1937
1938
1939
1940
1941
1942
1943
1944
1945
1946
1947
1948
1949
1950
1951
1952
1953
1954
1955
1956
1957
1958
1959
1960
1961
1962
1963
1964
1965
1966
1967
1968
1969
1970
1971
1972
1973
1974
1975
1976
1977
1978
1979
1980
1981
1982
1983
1984
1985
1986
1987
1988
1989
1990
1991
1992
1993
1994
1995
1996
1997
1998
1999
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
2010
2011
2012
2013
2014
2015
2016
2017
2018
2019
2020
2021
2022
2023
2024
2025
2026
2027
2028
2029
2030
2031
2032
2033
2034
2035
2036
2037
2038
2039
2040
2041
2042
2043
2044
2045
2046
2047
2048
2049
2050
2051
2052
2053
2054
2055
2056
2057
2058
2059
2060
2061
2062
2063
2064
2065
2066
2067
2068
2069
2070
2071
2072
2073
2074
2075
2076
2077
2078
2079
2080
2081
2082
2083
2084
2085
2086
2087
2088
2089
2090
2091
2092
2093
2094
2095
2096
2097
2098
2099
2100
2101
2102
2103
2104
2105
2106
2107
2108
2109
2110
2111
2112
2113
2114
2115
2116
2117
2118
2119
2120
2121
2122
2123
2124
2125
2126
2127
2128
2129
2130
2131
2132
2133
2134
2135
2136
2137
2138
2139
2140
2141
2142
2143
2144
2145
2146
2147
2148
2149
2150
2151
2152
2153
2154
2155
2156
2157
2158
2159
2160
2161
2162
2163
2164
2165
2166
2167
2168
2169
2170
2171
2172
2173
2174
2175
2176
2177
2178
2179
2180
2181
2182
2183
2184
2185
2186
2187
2188
2189
2190
2191
2192
2193
2194
2195
2196
2197
2198
2199
2200
2201
2202
2203
2204
2205
2206
2207
2208
2209
2210
2211
2212
2213
2214
2215
2216
2217
2218
2219
2220

CCCCCCCC

CCC

C
C
C
C

C
C
C

50

CC

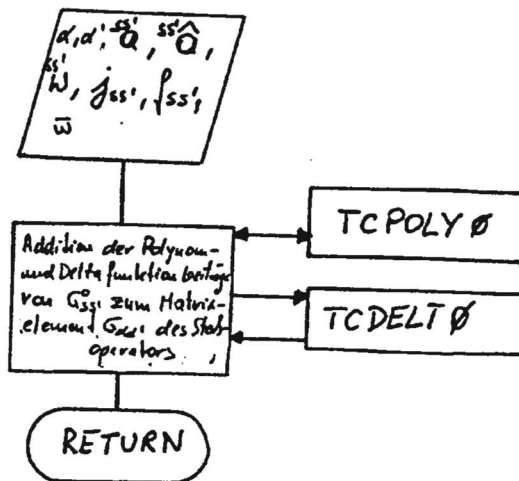
FUNCTION TCSPEC0

Zweck: Berechnen des Beitrages von G_{ss}^0 zum Matrixelement C_{ad} des Stoßoperators

Input: Indizes des Matrixelementes (KA1,KA2), Polynomkoeffizienten von G_{ss}^0 (SPEPOL0), Anzahl der Polynomkoeffizienten für jede Spektralfunktion (IDIMEN0), Max. Anzahl der Polynomkoeffizienten (MAXDIM0), Ende der Polynomentwicklung (OGRENZE, dimensionslos), Amplituden der Deltafunktionen (SPEDEL0), X-Koordinaten der Delta-Singularitäten (VALDEL0), Anzahl der Deltafunktionen für jede Spektralfunktion (IDIMEN1), Max. Anzahl der Deltafunktionen (MAXDIM1)

Output: Beitrag von G_{ss}^0 zum Matrixelement C_{ad} des Stoßoperators

$$TCSPEC0 = (-1)^{a+d} \left\{ \sum_{ss'} s s' \sum_{i=2}^{j_{ss'}} \left(\sum_{l=\max(0, \langle -\frac{i}{2} \rangle)}^{\min(\lfloor \frac{a+d}{2} \rfloor, \lfloor \frac{1}{2}(j_{ss'}-i) \rfloor)} s' K_{2l}^{ad} s s' \hat{a}_{i+2l} \right) \int_0^{\bar{\omega}} d\omega \frac{\omega^{a+d+2+i}}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} + \right. \\ \left. \sum_{ss'} s \cdot s' \sum_{l=0}^{\lfloor \frac{a+d}{2} \rfloor} s' K_{2l}^{ad} \sum_{i=1}^{j_{ss'}} s' \hat{a}_i \frac{s' \omega_i^{a+d+2-2l}}{(e^{\omega_i}-1)(1-e^{-\omega_i})} \right\}$$



C

TCSPECO=TCPOLYO(KA1,KA2,SPEPULO,1DIMENO,MAXDIMC,DGRENZE)
1+TCDELTO(KA1,KA2,SPEDELO,VALDELO,1DIMEN1,MAXDIM1)

C

C

RETURN
END

FUNCTION TCDELTO

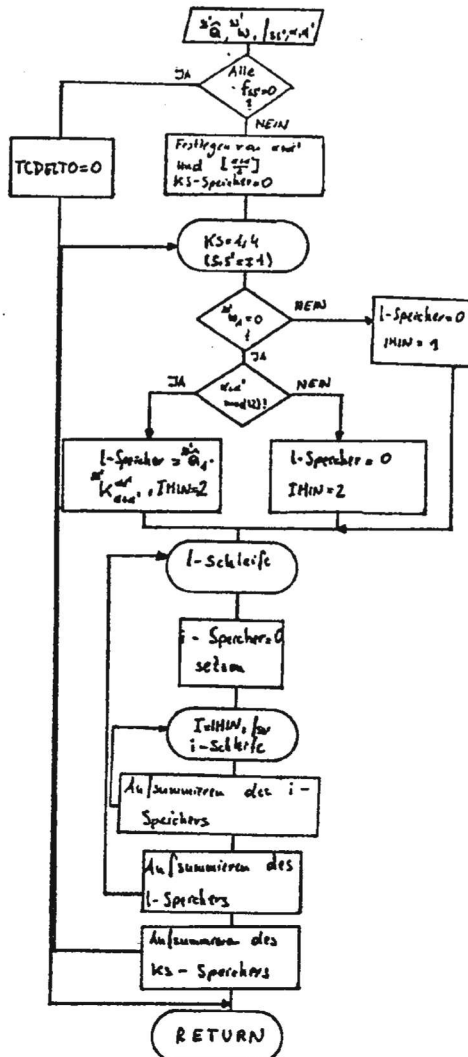
=====

Zweck: Berechnung des Beitrages der Deltafunktionen von G_{ss}^o zum Matrixelement $C_{aa'}$ des Stoßoperators

Input: Indizes des Matrixelementes (KA1,KA2), Amplituden der Deltafunktionen (SPEDEL0), X-Koordinaten der Delta-Singularitäten (VALDEL0), Anzahl der Deltafunktionen für jede Spektralfunktion (IDIMEN), Max. Anzahl der Deltafunktionen (MAXDIM)

Output: Beitrag der Deltafunktionen von G_{ss}^o zum Matrixelement $C_{aa'}$ des Stoßoperators

$$TCDELTO = (-1)^{aa'} \sum_{ss'} ss' \sum_{l=0}^{[K_{ss}]} ss' K_{ll}^{aa'} \sum_{i=1}^{ss'} ss' Q_i \frac{ss' w_i^{aa'+2-2l}}{(e^{w_i} - 1) (1 - e^{w_i})}$$



```
FUNCTION TCDELTO(KA1,KA2,SPDELO,VALDELO,ILIMEN,MAXLIF)
```

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS

```

HOST                ■ CYBER 720
COMPILER            ■ FOR5 RZ-TL VERSION 23-4-63
PURPOSE OF ROUTINE ■ COMPUTE MATRIX ELEMENT OF COLLISION
                    ■ OPERATOR, CONTRIBUTION OF GC DELTA
                    ■ FUNCTION PART
VERSION             ■ 1.0
DATE                ■ 6-10-1983
SOURCE FILENAME     ■ TCOELTG
AUTHOR              ■ D. EIBL

```

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

[illegible]

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
KA1	INT	I	INDEX OF MATRIXELEMENT OF COLLISION OPERATOR
KA2	INT	I	INDEX OF MATRIXELEMENT OF COLLISION OPERATOR
SPEDELO SPEDELO(I1,J)	REAL	I	AMPLITUDE OF DELTA FUNCTIONS I1=1...60-- I1=2...60+- I1=3...60-+ I1=4...60++
VALDELO	REAL	I	X-COORDINATE OF DELTA-SINGULARITIES
IDIMEN	INT	I	UPPER INDEX BOUNDARY FOR SPEDELO AND VALDELO
MAXDIM	INT	I	MAX. INDEX AVAILABLE FOR SPEDELO AND VALDELO

DECLARATIVE SECTION

```

DIMENSION SPEDELO(4,MAXDIM),VALDELO(4,MAXDIM),IDIMEN(4)

```

EXECUTIVE SECTION

```

      IF (IDIMEN(1).EQ.0.AND.IDIMEN(2).EQ.0.AND.IDIMEN(3).EQ.
10.AND.IDIMEN(4).EQ.0) THEN
        TCDELTO=0.
        GOTO 999
      ENDIF
      KSUM=KA1+KA2

```

COMPUTE S-SUM

SUMS=0.
DO 50 I1=-1,1,2

- 200 -

```

      DO 50 I2=-1,1,2
      KS=(I1+1+(I2+1)*(I2+1))/2+1
      IF (IDIMEN(KS).EQ.0) GOTO 50
      SIGN=FLOAT(I1*I2)
      IF (ABS(VALDELO(KS,1)).LT.1.E-12) THEN
        IF (MOD(KSUM,2).EQ.0) THEN
          SUML=SIGN*TCCDEFF(KA1,KA2,-KS,KSUM/2)*SPEDELO(KS,1)
          MINI=2
        ELSE
          SUML=0.
          MINI=2
        ENDIF
      ELSE
        SUML=0.
        MINI=1
      ENDIF

C
C      COMPUTE L-SUM
C
      DO 100 INDEXL=C,KSUM/2
      LKSUM=KSUM+2-2*INDEXL

C
C      COMPUTE I-SUM
C
      SUMI=0.
      DO 150 INDEXI=MINI,IDIMEN(KS)
      SUMI=SUMI+SPEDELO(KS,INDEXI)*VALDELO(KS,INDEXI)**LKSUM/
1 (EXP(VALDELO(KS,INDEXI))-1.)/(1.-EXP(-VALDELO(KS,INDEXI)))
150  CONTINUE

C
C
      SUML=SUML+TCCDEFF(KA1,KA2,-KS,INDEXL)*SUMI
100  CONTINUE

C
C
      SUMS=SUMS+SIGN*SUML
50   CONTINUE

C
C
      TCDELTO=FLOAT((-1)**KSUM)*SUMS

C
C
999  RETURN
      END

```


FUNCTION TCPOLY0

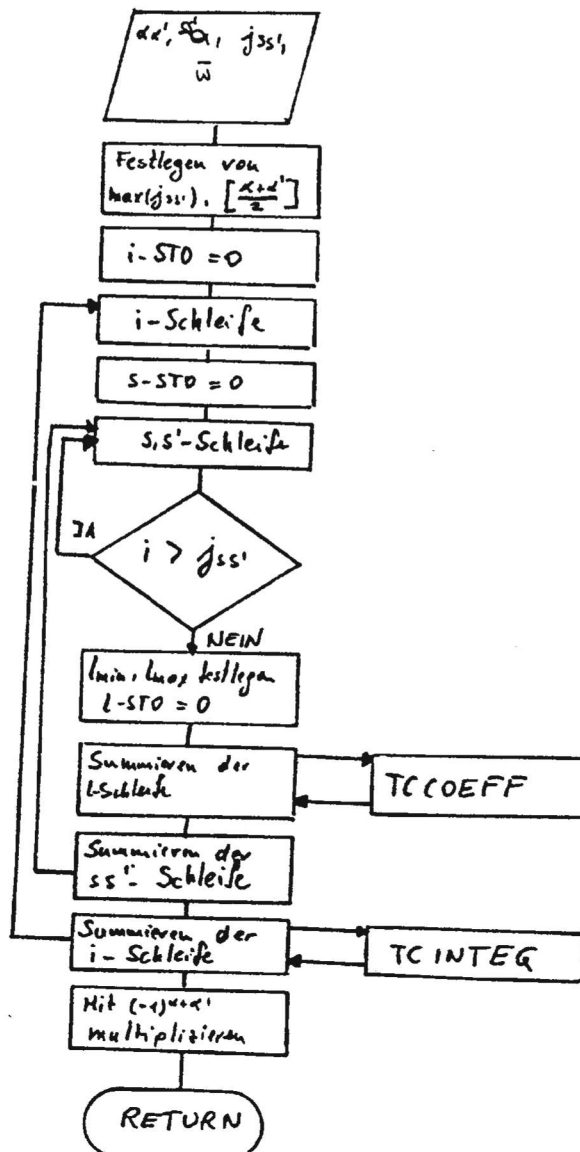
=====

Zweck: Berechnen des Beitrages der Polynome von G_{ss}^* zum Matrixelement C_{ad} des Stoßoperators

Input: Indizes des Matrixelementes (KA1,KA2), Polynomkoeffizienten der Spektralfunktionen G_{ss}^* (SPEPOL0), Anzahl der Polynomkoeffizienten für jede Spektralfunktion (IDIMEN), Max. Anzahl der Polynomkoeffizienten (MAXDIM), Ende der Polynomentwicklung (OGRENZE,dimensionslos)

Output: Beitrag der Polynome von G_{ss}^* zum Matrixelement C_{ad} des Stoßoperators

$$TCPOLY0 = (-1)^{ka_1} \sum_{ss'} \sum_{i=2}^{j_{ss'}} \left(\sum_{l=\max(0, \lfloor -\frac{i}{2} \rfloor)}^{\min(\lfloor \frac{ka_1}{2} \rfloor, \lfloor \frac{1}{2}(j_{ss'}-i) \rfloor)} s' k_{zc}^{ka_1} s' a_{i+2l} \right) \int_0^{\bar{\omega}} d\omega \frac{\omega^{ka_1+2+i}}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})}$$



FUNCTION TCPOLYO(KA1,KA2,SPEPCLO,IDIMEN,MAXDIM,DGRENZE)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE MATRICELEMENT OF COLLISION
 OPERATOR, CONTRIBUTION OF GO POLY-
 NOMIAL PART
 VERSION = 1.0
 DATE = 1-10-1983
 SOURCE FILENAME = TCPOLYO
 AUTHOR = D. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

=====

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
KA1	INT	I	INDEX OF MATRICELEMENT OF COLLISION OPERATOR
KA2	INT	I	INDEX OF MATRICELEMENT OF COLLISION OPERATOR
SPEPCLO	REAL	I	POLYNOM-COEFFICIENTS OF SPECTRAL FUNCTION GO
SPEPCLO(I1,J)			I1=1...GO-- I1=2...GO+- I1=3...GO-+ I1=4...GO++
IDIMEN	INT	I	UPPER INDEX BOUNDARY FOR POLYNOMIAL COEFFICIENTS
MAXDIM	INT	I	MAX. INDEX AVAILABLE FOR SPEPCLO
DGRENZE	REAL	I	CUTOFF FOR POLYNOMIAL CONTRIBUTION TO GO

DECLARATIVE SECTION

DIMENSION SPEPCLO(4,0:MAXDIM),IDIMEN(4)

EXECUTIVE SECTION

```

IF (IDIMEN(1).EQ.-1.AND.IDIMEN(2).EQ.-1.AND.IDIMEN(3).
1EQ.-1.AND.IDIMEN(4).EQ.-1) THEN
  TCPOLYO=0.
  GOTO 999
ENDIF
KSUM=KA1+KA2
KSUMP1=KSUM+1
KSUMP2=KSUMP1+1
MAXI=IDIMEN(1)
DO 50 I=2,4

```

```

2      DO 50 J=1,I-1
3      IF (IDIMEN(1).GT.IDIMEN(J)) MAXI=IDIMEN(1)
4      CONTINUE
5      KSUMD2=KSUM/2
6      MINI=-KSUMD2*2
7
8      C
9      C      COMPUTE I-SUM
10     C
11     SUMI=0.
12     DO 100 INDEXI=MINI,MAXI
13
14     C
15     C      COMPUTE S-SUM
16     C
17     SUMS=0.
18     DO 150 I1=-1,1,2
19     DO 150 I2=-1,1,2
20     SIGN=FLOAT(I1*I2)
21     KS=(I1+1+(I2+1)*(I2+1))/2+1
22     IF (INDEXI.GT.IDIMEN(KS)) GOTO 150
23     IF (INDEXI.LT.0) THEN
24         NDEXI=-INDEXI
25         IF (MOD(NDEXI,2).EQ.1) THEN
26             MINL=NDEXI/2+1
27         ELSE
28             MINL=NDEXI/2
29         ENDIF
30     ELSE
31         MINL=0
32     ENDIF
33     MAXL=MINO(KSUM/2,(IDIMEN(KS)-INDEXI)/2)
34
35     C
36     C      COMPUTE L-SUM
37     C
38     SUML=0.
39     DO 200 INDEXL=MINL,MAXL
40     SUML=SUML+TCCOEFF(KA1,KA2,-KS,INDEXL)*SPEPOLO(KS,INDEXI+
41     12*INDEXL)
42     200 CONTINUE
43
44     C
45     C      SUMS=SUMS+SIGN*SUML
46     150 CONTINUE
47
48     C
49     C      SUMI=SUMI+SUMS*TCINTEG(KSUM/2+INDEXI,OGRENZE)
50     100 CONTINUE
51
52     C
53     C      TCPOLYO=SUMI*FLOAT((-1)**KSUM)
54
55     C
56     C
57     999 RETURN
58     END

```

FUNCTION TCSPEC1

=====

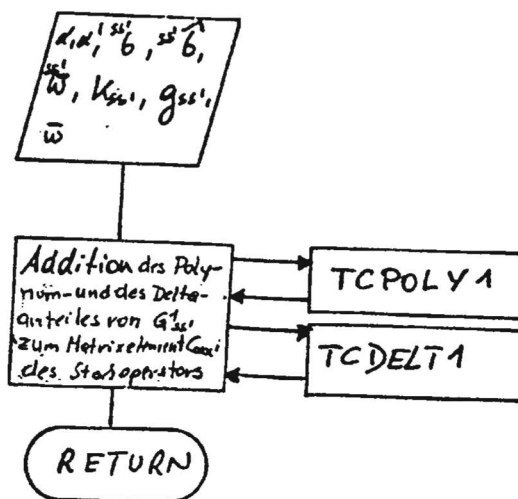
Zweck: Berechnen des Beitrages von $G_{ss'}^4$ zum Matrixelement $C_{ss'}$ des Stoßoperators

Input: Indizes des Matrixelementes (KA1,KA2), Polynomkoeffizienten von $G_{ss'}^4$ (SPEPOL1), Zahl der Polynomkoeffizienten für jede Spektralfunktion (IDIMEN0), Max. Anzahl der Polynomkoeffizienten (MAXDIM0), Ende der Polynomentwicklung (OGRENZE,dimensionslos), Amplituden der Deltafunktionen (SPEDEL1), X-Koordinaten der Deltasingularitäten (VALDEL1), Zahl der Deltafunktionen für jede Spektralfunktion (IDIMEN1), Max. Anzahl der Deltafunktionen (MAXDIM1)

Output: Beitrag von $G_{ss'}^4$ zum Matrixelement $C_{ss'}$ des Stoßoperators

$$TCSPEC1 = \sum_{ss'} \sum_{i=-2}^{K_{ss'}} \frac{(1+(-1)^{ss'+1+i})}{2} \left(\sum_{l=\max(0,(-\frac{1}{2}))}^{\min([\frac{ss'+1}{2}],[\frac{1}{2}(K_{ss'}-i))]} s_i' K_{2l}^{ss'} s_{i+2l}' b_{i+2l}' \right) \int_0^{\bar{\omega}} d\omega \frac{\omega^{ss'+3+i}}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})} +$$

$$+ \sum_{ss'} \sum_{l=0}^{[\frac{ss'+1}{2}]} s_i' K_{2l}^{ss'} \sum_{i=1}^{g_{ss'}} s_i' b_i \frac{s_i' \bar{\omega}_i^{ss'+3-2l}}{(e^{\bar{\omega}_i}-1)(1-e^{-\bar{\omega}_i})}$$



FUNCTION TCSPEC1(KA1,KA2,SPEPOL1,IDIMENO,MAXDIM0,OGRENZE,
1 SPEDEL1,VALDEL1,IDIMEN1,MAXDIM1)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 R2-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE CONTRIBUTION OF G1 TO
 MATRIXELEMENT OF COLLISION OPERATOR
 VERSION = 1.0
 DATE = 11-10-1983
 SOURCE FILENAME = TCSPECO
 AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

=====

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
KA1	INT	I	INDEX OF MATRIXELEMENT OF COLLISION OPERATOR
KA2	INT	I	INDEX OF MATRIXELEMENT OF COLLISION OPERATOR
SPEPOL1 SPEPOL1(I1,J)	REAL	I	POLYNOM COEFFICIENTS OF G1 I1=1...G1-- I1=2...G1+- I1=3...G1-+ I1=4...G1++
IDIMENO	INT	I	REQUESTED INDICES FOR SPEPOL1
MAXDIM0	INT	I	MAX. INDEX AVAILABLE FOR SPEPOL1
OGRENZE	REAL	I	CUT OFF OF POLYNOMIAL CONTRIBUTION
SPEDEL1 SPEDEL1(I1,J)	REAL	I	DELTA-AMPLITUDES OF G1 FOR I1 SEE SPEPOL1
VALDEL1 VALDEL1(I1,J)	REAL	I	X-COORDINATES OF DELTA-SINGULARITIES OF G1 FOR I1 SEE SPEPOL1
IDIMEN1	INT	I	REQUESTED INDICES FOR SPEDEL1 AND VALDEL1
MAXDIM1	INT	I	MAX. INDEX AVAILABLE FOR SPEDEL1 AND VALDEL1

DECLARATIVE SECTION

DIMENSION SPEPOL1(4,0:MAXDIM0),IDIMENO(4),
1 SPEDEL1(4,MAXDIM1),VALDEL1(4,MAXDIM1),IDIMEN1(4)

EXECUTIVE SECTION

- 206 -

```
TCSPEC1=TCPOLY1(KA1,KA2,SPEPOL1,1DIMEN0,MAXDIM0,UGRENZE)  
1+TCDELT1(KA1,KA2,SPEDEL1,VALDEL1,1DIMEN1,MAXDIM1)
```

C
C

```
RETURN  
END
```

FUNCTION TCDELTA1

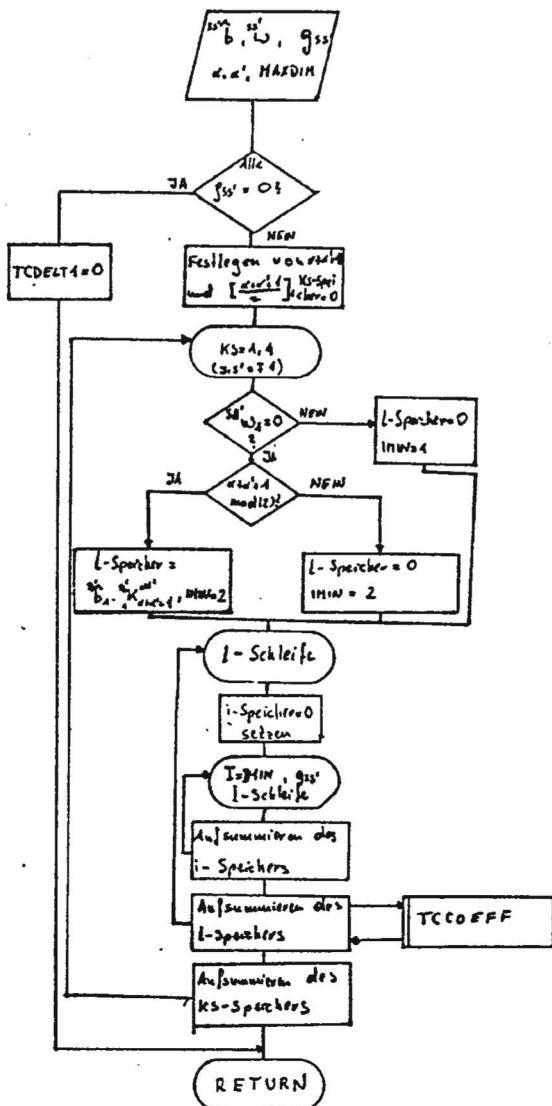
=====

Zweck: Berechnung des Anteiles der Deltafunktionen von G_{ss}^A , zum Matricelement $C_{aa'}$ des Stoßoperators

Input: Indizes des Matricelementes (KA1,KA2), Amplituden der Deltafunktionen (SPEDEL1), X-Koordinaten der Delta-Singularitäten (VALDEL1), Anzahl der Deltafunktionen für jede Spektralfunktion (IDIMEN), Max. Anzahl an Deltafunktionen (MAXDIM)

Output: Beitrag der Deltafunktionen von G_{ss}^A , zum Matricelement $C_{aa'}$ des Stoßoperators

$$TCDELTA1 = \sum_{ss'} \sum_{l=0}^{\left\lfloor \frac{K_{ss'}-1}{2} \right\rfloor} K_{ss'}^{(l)} \sum_{i=1}^{g_{ss'}} \hat{b}_i^{ss'} \frac{\hat{w}_i^{ss'} \omega_i^{ss'} \alpha_i^{ss'} + 3 - 2\epsilon}{(\epsilon - 1)(1 - e^{-\hat{w}_i^{ss'}})}$$



FUNCTION TCDELTA(KA1,KA2,SPEDEL1,VALDEL1,IDIMEN,MAXDIM)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE MATRIXELEMENT OF COLLISION
 OPERATOR, CONTRIBUTION OF G1 DELTA
 PART
 VERSION = 1.0
 DATE = 6-10-1983
 SOURCE FILENAME = TCDELTA
 AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

=====

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
KA1	INT	I	INDEX OF MATRIX ELEMENT OF COLLISION OPERATOR
KA2	INT	I	INDEX OF MATRIX ELEMENT OF COLLISION OPERATOR
SPEDEL1 SPEDEL1(I1,J)	REAL	I	AMPLITUDE OF DELTA FUNCTIONS I1=1...G1-- I1=2...G1+- I1=3...G1-+ I1=4...G1++
VALDEL1	REAL	I	X-COORDINATE OF DELTA-SINGULARITIES
IDIMEN	INT	I	UPPER INDEX BOUNDARY FOR SPEDEL1 AND VALDEL1
MAXDIM	INT	I	MAX. INDEX AVAILABLE FOR SPEDEL1 AND VALDEL1

DECLARATIVE SECTION

DIMENSION SPEDEL1(4,MAXDIM),VALDEL1(4,MAXDIM),IDIMEN(4)

EXECUTIVE SECTION

IF (IDIMEN(1).EQ.0.AND.IDIMEN(2).EQ.0.AND.IDIMEN(3).EQ.
 10.AND.IDIMEN(4).EQ.0) THEN
 TCDELTA=0.
 GOTO 999
 ENDIF.
 KSUM=KA1+KA2+1

COMPUTE S-SUM

SUMS=0.
 DO 50 I1=-1,1,2

- 209 -

```

      DO 50 I2=-1,1,2
      KS=(I1+1+(I2+1)*(I2+1))/2+1
      IF (IDIMEN(KS).EQ.0) GOTO 50
      IF (ABS(VALDEL1(KS,1)).LT.1.E-12) THEN
        IF (MOD(KSUM,2).EQ.0) THEN
          SUML=TCCDEFF(KA1,KA2,KS,KSUM/2)*SPEDEL1(KS,1)
          MINI=2
        ELSE
          SUML=0.
          MINI=2
        ENDIF
      ELSE
        SUML=0.
        MINI=1
      ENDIF

C
C      COMPUTE L-SUM
C
      DO 100 INDEXL=0,KSUM/2
      LKSUM=KSUM+2-2*INDEXL

C
C      COMPUTE I-SUM
C
      SUMI=0.
      DO 150 INDEXI=MINI,IDIMEN(KS)
      SUMI=SUMI+SPEDEL1(KS,INDEXI)*VALDEL1(KS,INDEXI)**LKSUM/
1 (EXP(VALDEL1(KS,INDEXI))-1.)/(1.-EXP(-VALDEL1(KS,INDEXI)))
150 CONTINUE
C
C
      SUML=SUML+TCCDEFF(KA1,KA2,KS,INDEXL)*SUMI
100 CONTINUE
C
C
      SUMS=SUMS+SUML
50 CONTINUE
C
C
      TCDELTI=SUMS
C
C
999 RETURN
      END

```

FUNCTION TCPOLY1

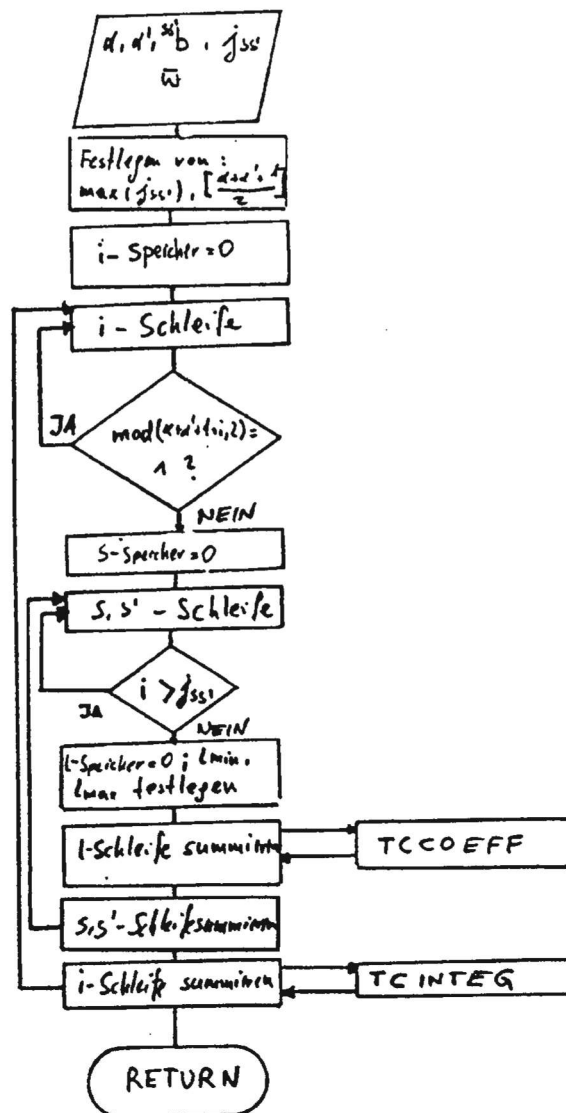
=====

Zweck: Berechnung des Beitrages der Polynome von G_{ss}^i zum Matricelement C_{ss} des Stoßoperators

Input: Indizes des Matricelementes (KA1,KA2), Polynomkoeffizienten von G_{ss}^i (SPEPOL1), Anzahl der Polynomkoeffizienten für jede Spektralfunktion (IDIMEN), Max. Zahl der Polynomkoeffizienten (MAXDIM), Ende der Polynomentwicklung (dimensionslos) (OGRENZE)

Output: Beitrag der Polynome von G_{ss}^i zum Matricelement C_{ss} des Stoßoperators

$$TCPOLY1 = \sum_{ss'} \sum_{i=-2}^{j_{ss'}} (1 + (-1)^{ss'+4i}) \left(\sum_{l=0}^{\min(\lfloor \frac{ss'+1}{2} \rfloor, \lfloor \frac{1}{2}(j_{ss'}-i) \rfloor)} s_l' K_{2l}^{ss'} b_{i+2l} \right) \int_0^{\bar{\omega}} d\omega \frac{\omega^{ss'+3+i}}{(e^{\omega}-1)(1-e^{-\omega})}$$



- 211 -

FUNCTION TCPOLY1(KA1,KA2,SPEPOL1,IDIMEN,MAXDIM,GGRENZE)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE POLYNOMIAL CONTRIBUTION
 OF G1 TO THE MATRIXELEMENT OF
 THE COLLISION OPERATOR
 VERSION = 1.0
 DATE = 4-10-1983
 SOURCE FILENAME = TCPOLY0
 AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
KA1	INT	I	INDEX OF MATRIXELEMENT OF THE COLLISION OPERATOR
KA2	INT	I	INDEX OF MATRIXELEMENT OF THE COLLISION OPERATOR
SPEPOL1 SPEPOL1(I1,J)	REAL	I	POLYNOM COEFFICIENTS OF G1 I1=1...G1-- I1=2...G1+- I1=3...G1-+ I1=4...G1++
IDIMEN	INT	I	UPPER INDEX BOUNDARY OF POLYNOM COEFFICIENTS OF G1
MAXDIM	INT	I	MAXIMUM NUMBER OF POLYNOMIAL COEFFICIENTS OF G1
GGRENZE	REAL	I	CUT OFF FOR POLYNOMIAL PART OF G1

DECLARATIVE SECTION

DIMENSION SPEPOL1(4,0:MAXDIM),IDIMEN(4)

EXECUTIVE SECTION

```

IF (IDIMEN(1).EQ.-1.AND.IDIMEN(2).EQ.-1.AND.IDIMEN(3).
1EQ.-1.AND.IDIMEN(4).EQ.-1) THEN
  TCPOLY1=0.
  GOTD 999
ENDIF
KSUM=KA1+KA2+1
KSUMP1=KSUM+1
KSUMP2=KSUMP1+1
MINI=-KSUM/2*2
MAXI=IDIMEN(1)
DO 50 I=2,4

```

- 212 -

```
      DO 50 J=1,I-1
      IF (IDIMEN(1).GT.IDIMEN(J)) MAXI=IDIMEN(1)
50    CONTINUE
      C
      C      COMPUTE I-SUM
      C
      SUMI=0.
      DO 100 INDEXI=MINI,MAXI
      IF (MOD(KSUM+INDEXI,2).EQ.1) GOTO 100
      C
      C      COMPUTE S-SUM
      C
      SUMS=0.
      DO 150 I1=-1,1,2
      DO 150 I2=-1,1,2
      KS=(I1+1+(I2+1)*(I2+1))/2+1
      IF (INDEXI.GT.IDIMEN(KS)) GOTO 150
      IF (INDEXI.LT.0) THEN
        NDEXI=-INDEXI
        IF(MOD(NDEXI,2).EQ.1) THEN
          MINL=NDEXI/2+1
        ELSE
          MINL=NDEXI/2
        ENDIF
      ELSE
        MINL=0
      ENDIF
      MAXL=MINO(KSUM/2,(IDIMEN(KS)-INDEXI)/2)
      C
      C      COMPUTE L-SUM
      C
      SUML=0.
      DO 200 INDEXL=MINL,MAXL
      SUML=SUML+TCCDEFF(KA1,KA2,KS,INDEXL)*SPEPOL1(KS,INDEXI+
12*INDEXL)
200    CONTINUE
      C
      C      SUMS=SUMS+SUML
150    CONTINUE
      C
      C      SUMI=SUMI+SUMS*TCINTEG(KSUMP2+INDEXI,OGRENZE)
100    CONTINUE
      C
      C      TCPOLY1=2.*SUMI
      C
      C
999    RETURN
      END
```

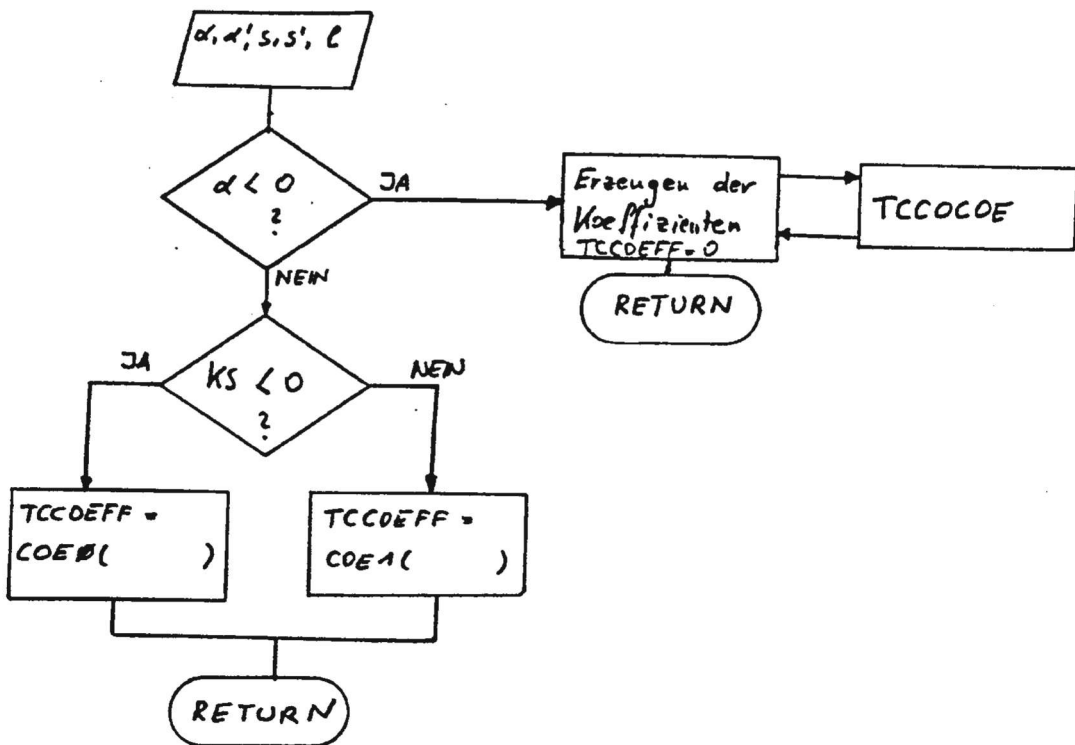

FUNCTION TCCOEFF =====

Zweck: Bereitstellung der Koeffizienten $K_{2c}^{s,s'}$ und $K_c^{s,s'}$

Input: Indizes s, s' (KS), α, α' (KA1, KA2), 1 (INDEXL) für $K_p^{s,s'}$
od. $K_c^{s,s'}$

Output: a) Koeffizienten $K_c^{s,s'}$ od. $K_{2c}^{s,s'}$
b) TCCOEFF=0 und Aufruf der SR TCCOCOE (für $\alpha < 0$)

$$KS = \frac{1}{2} (s+1 + (s'+1)^2) \quad , \quad s, s' = 1$$



- 214 -

FUNCTION TCCOEFF(KA1,KA2,KS,INDEXL)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 R2-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = CONTROL ROUTINE FOR SR TCCCOE
 VERSION = 1.0
 DATE = 1-10-83
 SOURCE FILENAME = TCCOEFF
 AUTHOR = G. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
KA1	INT	I	KA1 < 0: COMPUTE COE0,COE1 -KA1:= DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
KA2	INT	I	MAX. DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR ALLOWED

KA1	INT	I	KA1 >= 0: OUTPUT COE0(KA1,KA2,KS,INDEXL OR COE1(KA1,KA2,KS,INDEXL INDEX OF ARRAY COE0 OR COE1
KA2	INT	I	INDEX OF ARRAY COE0 OR COE1
KS	INT	I	KS < 0: OUTPUT COE0 > 0: OUTPUT COE1 INDEX OF ARRAY COE0 OR COE1
INDEXL	INT	I	INDEX OF ARRAY COE0 OR COE1

DECLARATIVE SECTION

PARAMETER (KA=6)

DIMENSION COE0(0:KA,0:KA,4,0:KA),COE1(0:KA,0:KA,4,0:KA+1)

SAVE COE0,COE1

EXECUTIVE SECTION

KA1 < 0: COMPUTE COE0 AND COE1

IF (KA1.LT.0) THEN

IF (KA2.NE.KA) STOP 'FN TCCOEFF: KA2.NE.KA '

IF (-KA1.GT.KA2) STOP 'FN TCCOEFF: KA1.GT.KA2 '

CALL TCCCOE(-KA1,KA2,COE0,COE1)

TCCOEFF=0.

- 215 -

```
C      KA1 >= 0, KS < 0: OUTPUT CDEC(KA1,KA2,-KS,INDEXL)
C
ELSE IF (KS.LT.0) THEN
  TCCDEFF=CDEC(KA1,KA2,-KS,INDEXL)
C
C      KA1 >=0, KS > 0: OUTPUT COE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)
C
ELSE
  TCCDEFF=COE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)
ENDIF
C
C
RETURN
END
```

SUBROUTINE TCCOCOE

=====

Zweck: Berechnen der Koeffizienten ${}^{ss'}K_e^{aa'}$ und ${}^{ss'}K_e^{aa'}$

Input: Dimension des Funktionenraumes (IDIMEN), Max. Dimension des Funktionenraumes (MAXDIM)

Output: Koeffizienten ${}^{ss'}K_e^{aa'}$ (COE0) und ${}^{ss'}K_e^{aa'}$ (COE1)

Gleichungen:

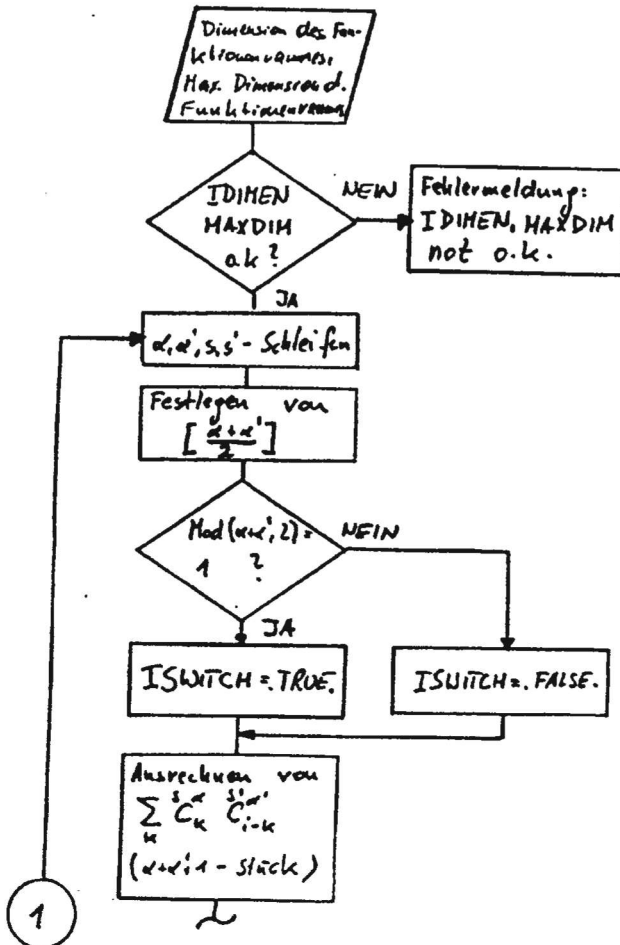
$${}^{ss'}K_{2e}^{aa'} = 2 \eta(2e) \sum_{i=0}^{a+a'-2e} \frac{(a+a'-i)!}{(a+a'+1-i-2e)!} \left\{ \sum_{k=\max(0, i-a')}^{\min(a, i)} {}^sC_k^a {}^{s'}C_{i-k}^{a'} \right\} \quad e \geq 1$$

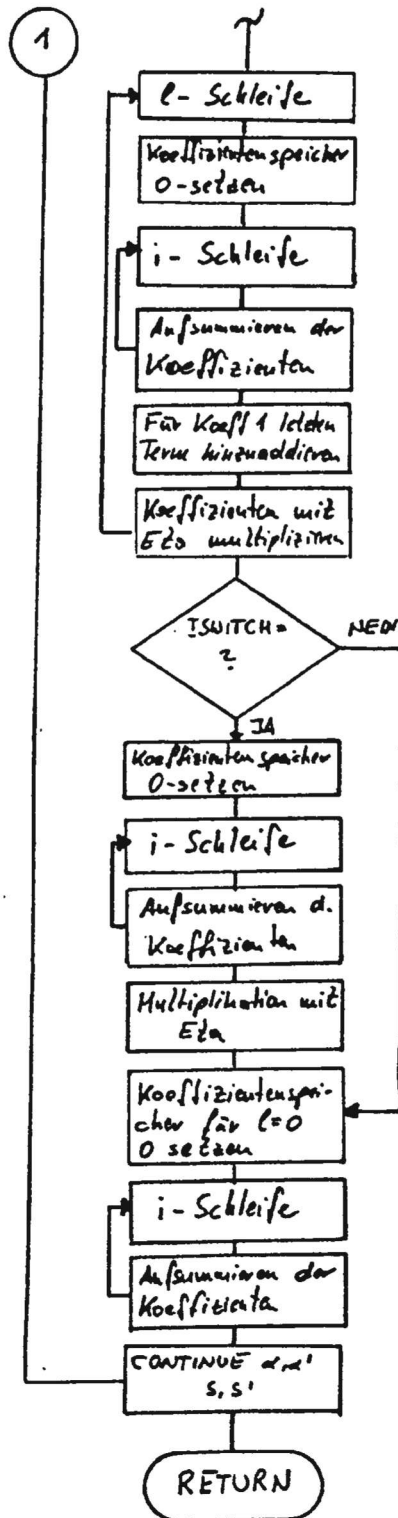
$${}^{ss'}K_0^{aa'} = \sum_{i=0}^{a+a'} \frac{1}{a+a'+1-i} \left\{ \sum_{k=\max(0, i-a')}^{\min(a, i)} {}^sC_k^a {}^{s'}C_{i-k}^{a'} \right\} \quad e = 0$$

$${}^{ss'}K_{2e}^{aa'} = 2 \eta(2e) \sum_{i=0}^{a+a'+1-2e} \frac{(a+a'+1-i)!}{(a+a'+2-i-2e)!} \left\{ \sum_{k=\max(0, i-a')}^{\min(a, i)} {}^sC_k^a {}^{s'}C_{i-k}^{a'} \right\} \quad e \geq 1$$

$${}^{ss'}K_0^{aa'} = \sum_{i=0}^{a+a'} \frac{1}{a+a'+2-i} \left\{ \sum_{k=\max(0, i-a')}^{\min(a, i)} {}^sC_k^a {}^{s'}C_{i-k}^{a'} \right\}$$

Definition der ${}^sC_k^a$ siehe 3.2.1.29





SUBROUTINE TCCOCCE(IDIMEN,MAXDIM,CDEO,CDE1)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT COEFFICIENTS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE COEFFICIENTS CDEO,CDE1
 VERSION = 1.0
 DATE = 23-9-83
 SOURCE FILENAME = TCCOCCE
 AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
IDIMEN	INT	I	REQUESTED DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
MAXDIM	INT	I	MAX. DIMENSION OF MATRIX OF COLLISION OPERATOR
CDEO	REAL	O	COEFFICIENTS DEFINED IN HANDBLOCK
CDE1	REAL	O	COEFFICIENTS DEFINED IN HANDBLOCK

DECLARATIVE SECTION

PARAMETER(KA=6)
 DIMENSION IA(0:KA,0:KA),IA1(0:KA),IA2(0:KA),CDEFHEL(0:2*KA),
 IETA(20),FAKT(0:19),
 ICDEO(0:KA,0:KA,4,0:KA),CDE1(0:KA,0:KA,4,0:KA+1)

LOGICAL ISWITCH

DATA (FAKT(I),I=0,19) /.10000000000000E+01,
 1.10000000000000E+01,
 1.20000000000000E+01,
 1.60000000000000E+01,
 1.24000000000000E+02,
 1.12000000000000E+03,
 1.72000000000000E+03,
 1.50400000000000E+04,
 1.40320000000000E+05,
 1.36288000000000E+06,
 1.36288000000000E+07,
 1.39916800000000E+08,
 1.47900160000000E+09,
 1.62270208000000E+10,
 1.87178291200000E+11,
 1.13076743680000E+13,
 1.20922789888000E+14,
 1.35568742809600E+15,
 1.6402373705728E+16,
 1.1216451004088E+18/

```

DATA (ETA(J),J=2,20,2) / .82246703342411,
1.94703282949725,
1.9855109129744, .99623300185265, .99903450759027,
1.9997576851439, .99993917034598, .99998476421491,
1.9999961878696, .99999904661158/

```

C

```

DATA(IA(0,K),K=0,6)/1,6*0/
DATA(IA(1,K),K=0,6)/1,-1,5*0/
DATA(IA(2,K),K=0,6)/1,-2,1,4*0/
DATA(IA(3,K),K=0,6)/1,-3,3,-1,3*0/
DATA(IA(4,K),K=0,6)/1,-4,6,-4,1,2*0/
DATA(IA(5,K),K=0,6)/1,-5,10,-10,5,-1,0/
DATA(IA(6,K),K=0,6)/1,-6,15,-20,15,-6,1/

```

C

C

EXECUTIVE SECTION

C

C

C

```

IF (MAXDIM.NE.KA) THEN
  STOP 'SR TCCDCOE: MAXDIM.NE.KA'
ELSE IF (IDIMEN.GT.MAXDIM) THEN
  STOP 'SR TCCDCOE: IDIMEN.GT.MAXDIM'
ENDIF

```

C

C

C

BEGINN DES RECHENTEILES FUER COEO,COE1

```

DO 50 KA1=0,IDIMEN
DO 50 KA2=0,IDIMEN
DO 50 I1=0,2,2
DO 50 I2=0,2,2
KS=(I1+I2*I2)/2+1
KSUM=KA1+KA2
LGRENZ=KSUM/2

```

C

C

C

BEREICH DES INDEXL FUER COE1 FESTLEGEN

```

IF (MOD(KSUM,2).EQ.1) THEN
  ISWITCH=.TRUE.
ELSE
  ISWITCH=.FALSE.
ENDIF

```

C

C

C

KONSTANTEN COEFHEL BERECHNEN

```

DO 100 IPOLCOE=0,MAX0(KA1,KA2)
IA1(IPOLCOE)=IA(KA1,IPOLCOE)*(I1-1)
IA2(IPOLCOE)=IA(KA2,IPOLCOE)*(I2-1)
100 CONTINUE
IA1(0)=IA1(0)+1
IA2(0)=IA2(0)+1
DO 150 IHELP=0,KSUM
COEFHEL(IHELP)=0.
DO 150 J=MAX0(0,IHELP-KA2),MIN0(KA1,IHELP)
COEFHEL(IHELP)=COEFHEL(IHELP)+FLOAT(IA1(J)*IA2(IHELP-J))
150 CONTINUE

```

C

C

C

MIT COEFHEL COEO,COE1 BERECHNEN (INDEXL>=1)

```

DO 250 INDEXL=1,LGRENZ
LKONST=KSUM-2*INDEXL
COEO(KA1,KA2,KS,INDEXL)=0.
250

```

```
COE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)=0.  
CUOTO=FAKT(KSUM)/FAKT(LKONST+1)  
CUOT1=CUOTO*FLOAT(KSUM+1)/FLOAT(LKONST+2)
```

C
C
C

AUFSUMMIEREN DER I-SUMME

```

      DO 300 INDEXI=0,LKONST
      CCEO(KA1,KA2,KS,INDEXL)=CCEO(KA1,KA2,KS,INDEXL)+COEFHEL(INDEX
1*QUOTO
      COE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)=COE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)+COEFHEL(INDEX
1*QUOT1
      IF (INDEXI.NE.LKONST) THEN
        QUOTO=QUOTO*FLOAT(LKONST-INDEXI+1)/FLOAT(KSUM-INDEXI)
        QUOT1=QUOT1*FLOAT(LKONST-INDEXI+2)/FLOAT(KSUM+1-INDEXI)

```

300

```

CONTINUE
CCE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)=CCE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)+
1CDEFHEL(LKONST+1)*FAKT(2*INDEXL)
CDEO(KA1,KA2,KS,INDEXL)=CDEO(KA1,KA2,KS,INDEXL)*
1ETA(2*INDEXL)*2.
CCE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)=CCE1(KA1,KA2,KS,INDEXL)*
1ETA(2*INDEXL)*2.

```

250

C
C
C

ABFRAGE OB NOCH EIN CGEI ZU RECHNEN IST

```

      IF (ISWITCH) THEN
        COE1(KA1,KA2,KS,LGRENZ+1)=FAKT(KSUM+1)*COEFHEL(0)*
1  ETA(2*LGRENZ+2)*2.
      ENDIF

```

C
C
C

COE0,COE1 FUER INDEXL=0

```

CDE0(KA1,KA2,KS,0)=0.
CDE1(KA1,KA2,KS,0)=0.
DO 400 INDEXI=0,KSUM
  CDE0(KA1,KA2,KS,0)=CDE0(KA1,KA2,KS,0)+CDEFHEL(INDEXI)/
1FLDAT(KSUM+1-INDEXI)
  CDE1(KA1,KA2,KS,0)=CDE1(KA1,KA2,KS,0)+CDEFHEL(INDEXI)/
1FLDAT(KSUM+2-INDEXI)

```

400

50

CCC

RETURN
END

FUNCTION TCINTEG
=====

Zweck: Brechnung der Integrale $\int_0^{\bar{w}} \frac{w^n}{(e^w-1)(1-e^{-w})} dw$ $n \geq 2, n \leq 22$
auf 8 Stellen genau

Input: Integralparameter n ($N, 1 \leq N \leq 22$), obere Integrationsgrenze $\bar{w}$ (Y)

Output: Wert des Integrales $\int_0^{\bar{w}} \frac{w^n}{(e^w-1)(1-e^{-w})} dw$ (auf 8 Stellen genau)

Gleichungen:

$$\int_0^{\bar{w}} \frac{w^k}{(e^w-1)(1-e^{-w})} dw = k \int_0^{\bar{w}} \frac{w^{k-1}}{e^w-1} dw - \frac{\bar{w}^k}{e^{\bar{w}}-1}$$

Auswertung des Integrales $\int_0^{\bar{w}} \frac{w^k}{e^w-1} dw$ in 3 Bereichen:
(1) $\bar{w} < 3$

$$\frac{w}{e^w-1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{w^n}{n!} \quad |w| < 2\pi$$

$$\int_0^{\bar{w}} \frac{w^k}{e^w-1} dw = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} \int_0^{\bar{w}} w^{k+n-1} dw = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} \frac{\bar{w}^{k+n}}{k+n}$$

$B_n \dots$ Bernoulli-Koeffizienten
(/14/, Seite 810)

(2) $3 < \bar{w} < \bar{w}_m$ (für $\bar{w} > \bar{w}_m$ wird nach Punkt 3 ausgewertet)

$$\int_0^{\bar{w}} \frac{w^k}{e^w-1} dw = \int_0^{\bar{w}} \frac{w^k}{e^w-1} dw - \int_{\bar{w}}^{\infty} \frac{w^k}{e^w-1} dw$$

$$\int_0^{\bar{w}} \frac{w^k}{e^w-1} dw = k! \zeta(k+1) \quad k \geq 1 \quad \zeta(n) \dots \text{Riemann'sche Zeta-Funktion}$$

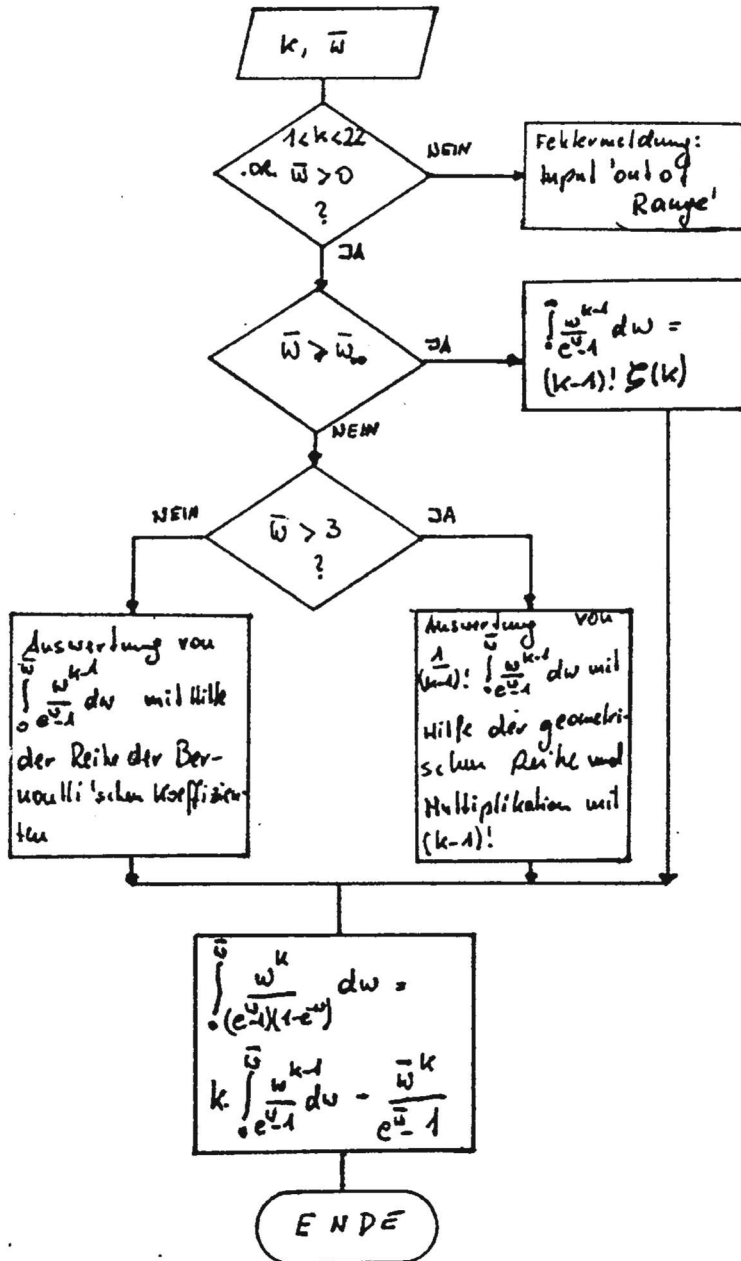
(/14/, Seite 811)

$$\int_{\bar{w}}^{\infty} \frac{w^k}{e^w-1} dw = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^k \left(\frac{1}{n}\right)^{k-m+1} \frac{k!}{m!} \gamma^m e^{-\gamma n}$$

$$\int_0^{\bar{w}} \frac{w^k}{e^w-1} dw = k! \zeta(k+1) - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^k \left(\frac{1}{n}\right)^{k-m+1} \frac{k!}{m!} \gamma^m e^{-\gamma n}$$

(3) asymptotische Auswertung: $\int_0^{\infty} dw \frac{w^k}{e^w - 1} - \int_0^{\bar{w}} dw \frac{w^k}{e^w - 1} \leq 10^{-8} \int_0^{\infty} dw \frac{w^k}{e^w - 1}$

$$\int_0^{\infty} dw \frac{w^k}{e^w - 1} = k! \zeta(k+1)$$



FUNCTION TCINTEG(N,Y)

GENERAL PURPOSE: COMPLETE TRANSPORT-COEFFICIENTS

HOST
 COMPILER
 PURPOSE OF ROUTINE
 VERSION
 DATE
 SOURCE FILENAME
 AUTHOR

= CYBER 720
 = FOR5 R2-TL VERSION 23-9-83
 = INTEGRATION OF FUNCTION $X**N/((EXP(X)-1)(1-EXP(-X)))$ IN THE BOUNDARIES (0,Y)
 = 1.0
 = 26-9-83
 = TCINTEG
 = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
N	INT	I	PARAMETER OF INTEGRAL N>1,N<22
Y	REAL	I	UPPER INTEGRATION BOUNDARY Y>0

DECLARATIVE SECTION

PARAMETER(PI=3.141592654)

DIMENSION B(0:20),BE(21),YGRENZ(20),FAKT(0:20)

DATA (B(I),I=0,15) /.10000000000000E+01,
 1.83333333350000E-01,
 1 -.13888888887500E-02,
 1.3306678306944E-04,
 1 -.8267195758929E-06,
 1.2087675698854E-07,
 1 -.5264190138405E-09,
 1.1338253656892E-10,
 1 -.3389680297740E-12,
 1.8586062057836E-14,
 1 -.2174868698616E-15,
 1.5509002826909E-17,
 1 -.1395446467924E-18,
 1.3534707036307E-20,
 1-.8953517427038E-22,
 1.2267952452338E-23/

DATA (BE(I),I=1,21) /.1644934066848E+01,
 1.120205690316E+01,
 1.1082323233711E+01,
 1.1036927755143E+01,
 1.1017343061984E+01,
 1.1008349277382E+01,
 1.1004077356198E+01,
 1.1002008392826E+01,
 1.1000994575128E+01,
 1.1000494188604E+01,

- 224 -

```

1.1000246066553E+01,
1.1000122713348E+01,
1.1000061248135E+1,
1.1000030568236E+1,
1.1000015282259E+1,
1.1000007637198E+1,
1.1000003817293E+1,
1.1000001908213E+1,
1.1000000953962E+1,
1.1000000476933E+1,.1000000238451E+1/

```

C

```

DATA (YGRENZ(I),I=1,20) /22.,25.,29.,34.,39.,
143.,46.,50.,55.,60.,65.,70.,75.,80.,86.,
191.,97.,102.,108.,113./

```

C

```

DATA (FAKT(I),I=0,20) /.1000000000000CE+01,
1.1000000000000E+01,
1.2000000000000E+01,
1.6000000000000E+01,
1.2400000000000E+02,
1.1200000000000E+03,
1.7200000000000E+03,
1.5040000000000E+04,
1.4032000000000E+05,
1.3628800000000E+06,
1.3628800000000E+07,
1.3991680000000E+08,
1.4790016000000E+09,
1.6227020800000E+10,
1.8717829120000E+11,
1.1307674368000E+13,
1.2092278988800E+14,
1.3556874280960E+15,
1.6402373705728E+16,
1.1216451004088E+18,.2432902008177E+19/

```

C

C-----

EXECUTIVE SECTION

C-----

C

C

C

C

ABFRAGEN DES GUELTIGKEITSBEREICHES

```

IF ((N.LE.1).OR.(N.GT.21)) STOP 'FUNCTION TCINTEG:
1 N OUT OF RANGE'
IF (Y.LE.0.) STOP 'FUNCTION TCINTEG: Y <= 0'
M=N-1

```

C

C

C

PROGRAMMZWEIG - ABFRAGE

C

```

IF (Y.GE.YGRENZ(M)) GOTO 1
GOTO 2

```

1

```

F1=BE(M)*FAKT(M)

```

```

GOTO 200

```

2

```

IF (Y.GT.3.) GOTO 3

```

```

J1=INT(ALOG(7./16.*1.E-8*FLGAT(M+2)/FLOAT(M+1)
1*Y*EXP(-Y))/ALOG(Y/2./PI)/2.+1.)

```

```

IF (J1.GT.15) STOP 'FUNCTION TCINTEG: J1>15'

```

```

GOTO 30

```

3

```

N1=INT((19.473+FLOAT(M))/Y+1.)

```

```

GOTO 300

```

C

- 225 -

```

23      C      AUSWERTUNG FUER Y <= 3
24      C
25      30      F1=0.
26              POLY=Y**(M-2)
27              REALNEN=FLOAT(M-2)
28              YPOT2=Y*Y
29              DO 50 J=0,J1
30              POLY=POLY*YPOT2
31              REALNEN=REALNEN+2.
32              F1=F1+B(J)*POLY/REALNEN
33      50      CONTINUE
34              F1=F1-(.5*Y**(M+1)/FLOAT(M+1))
35              GOTO 200
36      C
37      C      AUSWERTUNG DER REIHE FUER Y > 3
38      C
39      300      F1=0.
40              DO 150 I1=1,N1
41              XM2=1.
42              QUOT1=1./Y
43              REALI1=FLOAT(I1)
44              QUOT2=(1./REALI1)**(M+2)
45              DO 150 I2=0,M
46              QUOT1=QUOT1*Y
47              QUOT2=QUOT2*REALI1
48              IF (I2.EQ.0) GOTO 350
49              XM2=XM2*FLOAT(I2)
50      350      F1=F1+QUOT2/XM2*QUOT1*EXP(-Y*REALI1)
51      150      CONTINUE
52              F1=(BE(M)-F1)*FAKT(M)
53      C
54      C
55      200      TCINTEG=FLOAT(N)*F1-Y**N/(EXP(Y)-1.)
56              RETURN
57      END

```

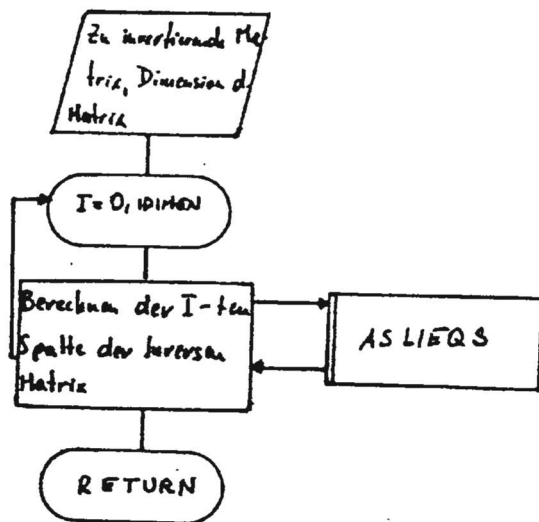
SUBROUTINE TCMAINV

=====

Zweck: Inversion einer $n \times n$ - Matrix

Input: Zu invertierende Matrix (COEMAT), Max. Dimension der Matrix (MAXDIM), Dimension der Matrix (IDIMEN)

Output: Zu COEMAT inverse Matrix (COEINV)



- 227 -

SUBROUTINE TCMAINV(COEMAT,COEINV,MAXDIM,IDIMEN)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE TRANSPORT-COEFFICIENTS
TC INPUT CONDITIONS

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 R2-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = INVERT INPUT MATRIX
 VERSION = 2.0
 DATE = 14-11-1983
 SOURCE FILENAME = TCMAINV
 AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

=====

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
COEMAT	REAL	I	INPUT MATRIX THAT SHOULD BE INVERTED
COEINV	REAL	O	INVERSE MATRIX OF COEMAT
MAXDIM	INT	I	MAX. DIMENSION OF COEMAT AVAILABLE
IDIMEN	INT	I	REQUESTED DIMENSION OF COEMAT

DECLARATIVE SECTION

PARAMETER (KA=6)

DIMENSION COEMAT(0:MAXDIM,0:MAXDIM),COEINV(0:MAXDIM,
10:MAXDIM),COINHOM(0:KA),XCCEFF(0:KA)

EXECUTIVE SECTION

IF (KA.NE.MAXDIM) STOP 'SR TCMAINV:KA.NE.MAXDIM'
 IF (IDIMEN.GT.KA) STOP 'SR TCMAINV:IDIMEN.GT.KA'

COMPUTE THE ROWS OF THE INVERSE MATRIX

DO 10 IROW=0,IDIMEN
 DO 20 IUNIT=0,IDIMEN
 IF (IUNIT.EQ.IROW) THEN
 COINHOM(IUNIT)=1.
 ELSE
 COINHOM(IUNIT)=0.
 ENDIF
 20 CONTINUE
 CALL ASLIEQS(COEMAT,COINHOM,MAXDIM,IDIMEN,XCCEFF)

DO 10 IDIS=0,IDIMEN
 COEINV(IDIS,IROW)=XCCEFF(IDIS)
 10 CONTINUE

- 228 -

RETURN
END

A.2.2 Programme zur Berechnung der Spektralfunktionen

A.2.2.1 Das Programmpaket CMS

Das Programmpaket CMS dient zur Berechnung der Spektralfunktionen $G_{--}^0, \dots, G_{++}^1$ der Potential-, der Magnetischen- und der Phononen-Streuung für zueinander äquidistant liegende Temperaturen.

Es legt die berechneten Daten auf die Dateien
TAPE 53 - 55 ab.

Seitenverzeichnis für die Programmeinheiten

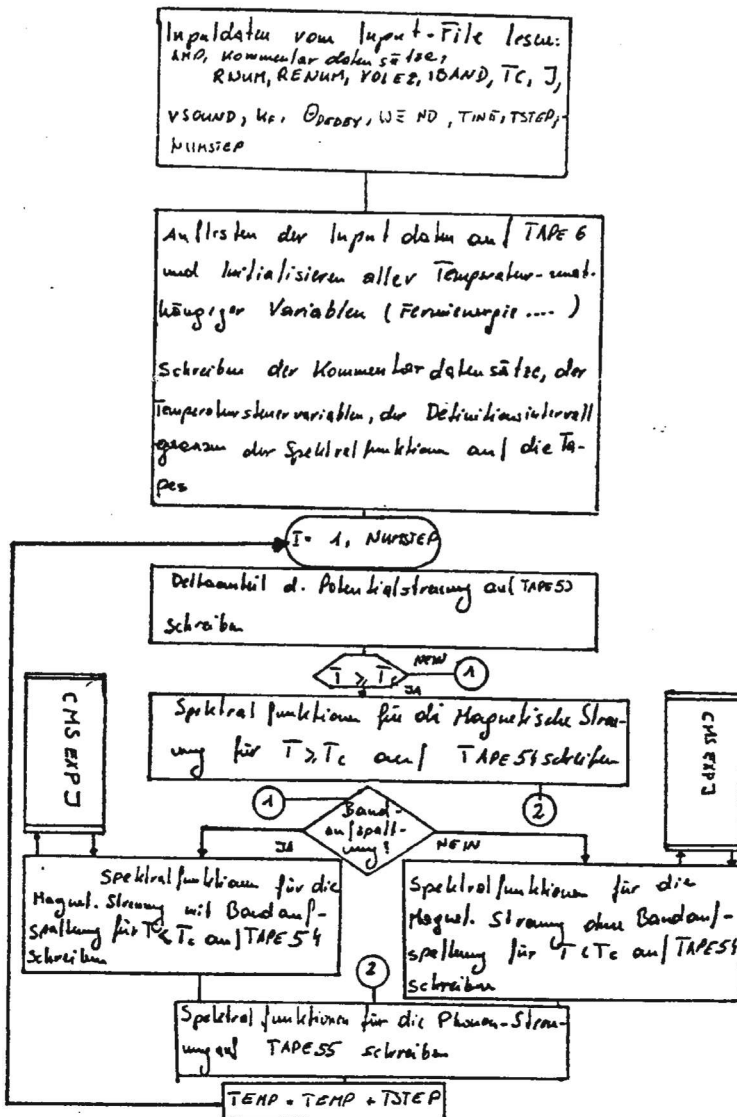
PROGRAM	CMSFILE	230
SUBROUTINE	CMSREFA	238
SUBROUTINE	CMSEXPJ	242
FUNCTION	CMSMAGN	246

PROGRAM CMSFILE

=====

Input: Absolute Stärke der Wechselwirkungen (AMP), Kommentardatensätze (STRART,ABSAMP,MODEL), Zahl der Leitungselektronen in der Einheitszelle (RNUM), Zahl der Seltenen Erd Ionen in der Einheitszelle (RENUM), Volumen der Einheitszelle (VOLEZ), Bandaufspaltung JA/NEIN (IBAND), Ordnungstemperatur magnetisch (TC), Gesamtdrehimpulsquantenzahl (RJ), Schallgeschwindigkeit (VSOUND), Fermiwellenvektor (QFERMI), Debeytemperatur (WDEBEY), oberes Definitionsintervallende für die Spektralfunktionen (WEND), Anfangstemperatur (TINIT), Temperaturschrittweite (TSTEP), Zahl der Temperaturschritte (NUMSTEP)

Zweck: Berechnen der Spektralfunktionen für die Potential-Streuung, die Magnetische-Streuung und die Phonon-Streuung und Ablegen der Daten auf die Tapes 53-55



Berechnen der Modellspektralfunktionen im PROGRAM CMSFILE

Potential-Streuung:

G^0 Gleichungen 4.2.1.1.6, 4.2.1.1.7

G^1 Gleichungen 4.2.1.1.12, 4.2.1.1.13

Magnetische-Streuung:

Bestimmung der Bandaufspaltung Δb für $T < T_c$

$$\Delta b = -\frac{1}{2} \langle J_z \rangle \langle k | \sum_{\vec{r}} G(\vec{r}) | k \rangle = -\frac{1}{2} \langle J_z \rangle N \cdot N_{RE} \frac{G_0}{\Delta^3 r}$$

$$G_0 = \int d^3 r G(\vec{r})$$

$$\text{Matrixelement } |G|^2 = (\Delta^3 r)^3 \sum_{\vec{r}} |\langle k | G(\vec{r}) | k \rangle|^2 = N_{RE} |G_0|^2$$

$$k_0 a_m = \frac{(2\pi)^3}{16} \frac{1}{V_{\text{Lattice}}} |G|^2 \bar{v}(0) N(0)$$

$$\Delta b = - \text{sign}(G_0) \frac{1}{2} \langle J_z \rangle \left[\frac{k_0 a_m}{\bar{v}(0) N(0)} \frac{16}{(2T)^3} \frac{N_{RE}}{V_{\text{Lattice}}} \right]^{1/2} (\text{sign}(G_0) = -1)$$

Spektralfunktionen $T < T_c$ mit Bandaufspaltung

$G_{\pm\pm}^0$ Gleichung 4.2.1.2.5

$$G_{+-}^0(\Omega) = a_{+-}(\Delta b, -\Delta b) \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega - \Delta E)$$

$G_{\pm\pm}^1$ Gleichung 4.2.1.2.7

$$G_{+-}^1(\Omega) = \delta(\Omega) [a'_{+-}(-\Delta b, -\Delta b) + a'_{+-}(\Delta b, \Delta b)] + a'_{+-}(\Delta b, -\Delta b) \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega - \Delta E) + a'_{+-}(-\Delta b, \Delta b) \frac{\langle J_z \rangle}{n} \delta(\Omega + \Delta E) \quad (Q'_{ss}(E, E') = \frac{\partial}{\partial E} Q_{ss}(E, E'))$$

$$\mu = E_f$$

$T < T_c$ ohne Bandaufspaltung

G^0 Gleichungen 4.2.1.2.24, 4.2.1.2.25

G^1 Gleichungen 4.2.1.2.28, 4.2.1.2.29

$$\mu = E_f$$

$T \gg T_c$

G^0 Gleichungen 4.2.1.2.30, 4.2.1.2.31

G^1 Gleichungen 4.2.1.2.34, 4.2.1.2.35

$$\mu = E_f$$

Phononen-Streuung

G^0 Gleichungen 4.2.1.3.4 - 4.2.1.3.6

G^1 Gleichungen 4.2.1.3.8, 4.2.1.3.11 - 4.2.1.3.13 $\mu = E_f$

PROGRAM CMSFILE

PROGRAMM ZUR ERZEUGUNG DER TAPES 53,...,55
 FUER POTENTIALSTREUNUNG, MAGNETISCHE STREUUNG,
 ELEKTRON PHONON STEUUNG

HOST = CYBER 720
 COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
 PURPOSE OF ROUTINE = CREATE MODEL-SPECTRALFUNCTIONS
 TO CALCULATE TRANSPORTCOEFF.S
 VERSION = 1.0
 DATE = 6-12-1983
 SOURCE FILENAME = CMSFILE
 AUTHOR = D. EIBL

 DECLARATIVE SECTION

PARAMETER (MAXPOLY=6, NUMINT=8, MAXM1=2, MAXM2=4, MAXM3=5,
 1MAXDIM=300)

DIMENSION GPDLY(2,3,0:MAXPOLY), VAR1(MAXM1), VAR2(MAXM2),
 1VAR3(MAXM3), XHELP(MAXDIM), YHELP(MAXDIM), AMP(3)

CHARACTER*60 STRART(3), ABSAMP(3), MODEL(3)

DATA CONV, CONN, CONST /.36843E-8, .552639E-8, .6450306885E-1/

DATA CONFIRM /4.1921166E5/

V(E)=CONV*E*SQRT(E)
 DVDE(E)=1.5*CONV*SQRT(E)
 RN(E)=CONN*SQRT(E)
 DNDE(E)=.5*CONN/SQRT(E)

 EXECUTIVE SECTION

M2=MAXM2-2
 M3=MAXM3-2

READ(*,*) (AMP(I), I=1,3), RNUM, RENUM, VGLEZ, IBAND,
 1(VAR2(I), I=1, M2), (VAR3(I), I=1, M3), WEND, TINIT, TSTEP, NUMSTEP

 ANNOTATION OF INPUT PARAMETERS

P. NAME	TYPE	EXPLANATION
AMP	REAL	ABSOLUTE STRENGTHS OF INTERACTIONS
RNUM	REAL	NUMBER OF CONDUCTION ELECTRONS IN THE UNIT CELL


```

C
C      RENUM      REAL      NUMBER OF RARE EARTH IONS IN THE
C                               UNIT CELL
C
C      VOLEZ      REAL      VOLUME OF THE UNIT CELL
C
C      IBAND      INT       I=1...CALCULATION WITH BAND GAP
C                               0.....WITHOUT BAND GAP
C
C      VAR2(1)    REAL      TC FOR MAGNETICAL ORDERING
C
C      VAR2(2)    REAL      QUANTUM NUMBER OF TOTAL ANGULAR
C                               MOMENTUM
C
C      VAR3(1)    REAL      VELOCITY OF SOUND
C
C      VAR3(2)    REAL      VECTOR ON THE FERMI SURFACE
C
C      VAR3(3)    REAL      DEBEY TEMPERATUR
C
C      WEND       REAL      UPPER INTERVAL BOUNDARY FOR
C                               SPECTRAL FUNCTIONS
C
C      TINIT      REAL      LOWEST TEMPERATUR WHERE SPECTRAL
C                               FUNCTIONS WILL BE COMPUTED
C
C      TSTEP      REAL      TEMPERATUR INCREASE FOR EVERY STEP
C
C      NUMSTEP    INT      NUMBER OF STEPS FOR COMPUTATION
C-----
C      EFERMI=CONFIRM*(RNUM/VOLEZ)**.666666666666667
C
C      WRITE(6,120) (AMP(I),I=1,3),EFERMI,RNUM,RENUM,VOLEZ,IBAND,
120  1(VAR2(I),I=1,M2),(VAR3(I),I=1,M3),WEND,TINIT,TSTEP,NUMSTEP
      FORMAT('1',10X,10('*'),'MR CMSFILE:ERZEUGEN DER MODELL',
1      'SPEKTRALFUNKTIONEN',10('*'),/,/,
11X,'ABSOLUTE STAERKE DER POTENTIALSTREUUNG      =',E12.5/,
11X,'                                DER MAGNET. STREUUNG      =',E12.5/,
11X,'                                DER PHONON STREUUNG      =',E12.5/,
11X,'FERMIENERGIE [K]                                =',E12.5/,
11X,'ZAHL DER ELEKTRONEN IN VOLEZ                    =',E12.5/,
11X,'ZAHL DER SELTENEN ERD IONEN IN VOLEZ            =',E12.5/,
11X,'VOLUMEN DER ELEMENTARZELLE      [A**3]          =',E12.5/,
11X,'BANDAUFSPALTUNG (I=1-JA; I=0-NEIN)              I =',I2/,
11X,'KRITISCHE TEMPERATUR (MAGNETISCH)                =',E12.5/,
11X,'QUANTENZAHLE DES GESAMTDREHIMPULSES              =',E12.5/,
11X,'SCHALLGESCHWINDIGKEIT [A/SEC]                   =',E12.5/,
11X,'FERMIWELLENVEKTOR      [1/A]                    =',E12.5/,
11X,'DEBEY TEMPERATUR      [K]                        =',E12.5/,
11X,'DEFINITIONSBEREICH DES POLYNOMANTEILS            =',E12.5/,
1/,
11X,'ANFANGSTEMPERATUR      [K]                        =',E12.5/,
11X,'TEMPERATURSCHRITTWEITE [K]                        =',E12.5/,
11X,'ZAHL DER TEMPERATURSCHRITTE                      =',I4)
      READ(*,*) (STRART(I),ABSAMP(I),MODEL(I),I=1,3)
C      INITIALIZE VARIABLES
C
C      VO=V(EFERMI)
C      RNO=RN(EFERMI)
C      VNO=VO*RNO

```

- 235 -

```
CONSTB=.5*SQRT(AMP(2)*CONST*RENUM/VELLZ/VNO)
AMPG1M=(DVDE(EFERMI)*RNO-DNDE(EFERMI)*VO)/VNO
AMPG1P=(DVDE(EFERMI)*RNO+DNDE(EFERMI)*VO)/VNO
VAR1(1)=AMPG1P
VAR1(2)=AMPG1M
VAR2(MAXM2-1)=VAR1(1)
VAR2(MAXM2)=VAR1(2)
VAR3(MAXM3-1)=VAR1(1)
VAR3(MAXM3)=VAR1(2)
TC=VAR2(1)
RJ=VAR2(2)
VSOUND=VAR3(1)
QFERMI=VAR3(2)
WDEBEY=VAR3(3)
```

C

```
DO 10 IDIS=1,3
ITAP=IDIS+52
WRITE(ITAP,20) STRART(IDIS)
20  FORMAT(A60)
WRITE(ITAP,20) ABSAMP(IDIS)
WRITE(ITAP,20) MODEL(IDIS)
10  CONTINUE
```

C

```
DO 50 ITAPE=1,3
ITAP=ITAPE+52
WRITE(ITAP,*) TINIT,TSTEP,NUMSTEP
WRITE(ITAP,*) WEND
50  CONTINUE
```

C

```
TEMP=TINIT
QDEBEY=WDEBEY/VSOUND
QUOTQ=QDEBEY*QDEBEY/QFERMI/QFERMI/4.
WINT=WEND/FLOAT(NUMINT)
```

C

```
C  START TEMPERATUR LOOP
C
```

C

```
DO 60 ISTEP=1,NUMSTEP
```

C

C

C

C

C

C

C

C

C

```
WRITE(53,*) 0,0,0,0,0,0
WRITE(54,*) 0,0,0,0,0,0
```

C

C

C

```
DELTA ANTEIL DER POTENTIAL STREUUNG
```

C

```
WRITE(53,*) 1,0,1,1,1,1
WRITE(53,*) 0.,AMP(1)
WRITE(53,*) 0.,AMP(1)
WRITE(53,*) 0.,AMPG1P*AMP(1)
WRITE(53,*) 0.,AMPG1M*AMP(1)
WRITE(53,*) 0.,AMPG1P*AMP(1)
```

C

C

C

```
DELTA ANTEIL DER MAGNETISCHEN STREUUNG
```

```
IF (TEMP.LT.TC) THEN
CALL CMSEXPJ(TEMP,TC,RJ,EXPJZ,EXPJZZ,ETA)
```

```

IF (IBAND.EQ.1) THEN
  DELTAB=CONSTB*EXPJZ
  EFPDB=EFERMI+DELTAB
  EFMDB=EFERMI-DELTAB
  DSM=(DVDE(EFPDB)*RN(EFPDB)-V(EFPDB)*DNDE(EFPDB)+DVDE(EFMDB)
1 *RN(EFMDB)-V(EFMDB)*DNDE(EFMDB))/VNO
  EQUOT=DELTAB/EFERMI
  FMPM=2.*SQRT(1.-EQUOT*EQUOT)*EQUOT
  DMPM=(DVDE(EFPDB)*RN(EFMDB)-V(EFMDB)*DNDE(EFPDB))/VNO
  DMMP=(DVDE(EFMDB)*RN(EFPDB)-V(EFPDB)*DNDE(EFMDB))/VNO
ENDIF
DIFJ2Z=(EXPJ2Z-EXPJZ*EXPJZ)
ETA2=ETA*2.*TEMP
QUOT=EXPJZ/ETA
AMPM=AMPG1M*QUOT
AMPP=AMPG1P*QUOT
IF (IBAND.EQ.1) THEN
  WRITE(54,*) 2,1,2,3,3,3
ELSE IF (IBAND.EQ.0) THEN
  WRITE(54,*) 2,0,2,3,3,3
ELSE
  STOP 'MR CMSFILE:IBAND OUT OF RANGE'
ENDIF
WRITE(54,*) 0.,2.*DIFJ2Z*AMP(2)
WRITE(54,*) ETA2,2.*QUOT*AMP(2)
IF (IBAND.EQ.1) THEN
  WRITE(54,*) ETA2,FMPM*QUOT*AMP(2)
ENDIF
WRITE(54,*) 0.,2.*DIFJ2Z*AMP(2)
WRITE(54,*) ETA2,2.*QUOT*AMP(2)
WRITE(54,*) 0.,AMPG1P*2.*DIFJ2Z*AMP(2)
WRITE(54,*) ETA2,AMPP*AMP(2)
WRITE(54,*) -ETA2,AMPP*AMP(2)
IF (IBAND.EQ.1) THEN
  WRITE(54,*) 0.,DSM*DIFJ2Z*AMP(2)
  WRITE(54,*) ETA2,DMPM*QUOT*AMP(2)
  WRITE(54,*) -ETA2,DMMP*QUOT*AMP(2)
ELSE
  WRITE(54,*) 0.,AMPG1M*2.*DIFJ2Z*AMP(2)
  WRITE(54,*) ETA2,AMPM*AMP(2)
  WRITE(54,*) -ETA2,AMPM*AMP(2)
ENDIF
WRITE(54,*) 0.,AMPG1P*2.*DIFJ2Z*AMP(2)
WRITE(54,*) ETA2,AMPP*AMP(2)
WRITE(54,*) -ETA2,AMPP*AMP(2)
ELSE
  CONST=2.*RJ*(RJ+1)
  CONST1=CONST/2.
  WRITE(54,*) 1,0,1,1,1,1
  WRITE(54,*) 0.,CONST1*2.*AMP(2)
  WRITE(54,*) 0.,CONST1*2.*AMP(2)
  WRITE(54,*) 0.,AMPG1P*CONST*AMP(2)
  WRITE(54,*) 0.,AMPG1M*CONST*AMP(2)
  WRITE(54,*) 0.,AMPG1P*CONST*AMP(2)
ENDIF
C
C
C
ELEKTRON PHONON STREUUNG
DO 80 I1=1,3
DO 80 I2=0,3
GPOLY(1,I1,I2)=0.

```


- 237 -

```

5      GPOLY(2,I1,I2)=0.
6      60      CONTINUE
7      C
8      C          ERZEUGUNG DER WERTETABELLE DER SPEKTRALFUNKTION
9      C          FUER DIE ELEKTRON PHONON STREUUNG
10     C
11     CONST1=QUOTQ/WDEBEY/WDEBEY
12     CONST2=CONST1*CONST1
13     XCONST=WDEBEY
14     GPOLY(1,1,1)=4.*TEMP*CONST1*AMP(3)
15     GPOLY(1,1,3)=-4.*TEMP*CONST2*AMP(3)
16     GPOLY(1,3,3)=-GPOLY(1,1,3)
17     POLYP=TEMP*AMPG1M*CONST1*AMP(3)
18     POLYM=-POLYP
19     C
20     NUM1=NUMINT+1
21     NUM2=2*NUMINT+1
22     WRITE(55,*) NUM1,NUM1,NUM1,NUM2,NUM2,NUM2
23     DO 100 ISPEC=1,6
24     IF (ISPEC.LE.3) THEN
25         KENNPOL=1
26         KS=ISPEC
27         NUM=NUM1
28         X=0.
29     ELSE
30         KENNPOL=2
31         KS=ISPEC-3
32         NUM=NUM2
33         X=-WEND
34     ENDIF
35     DO 90 ICOUNT=1,NUM
36     IF (X.LT.0.) THEN
37         GPOLY(2,2,1)=POLYM
38     ELSE
39         GPOLY(2,2,1)=POLYP
40     ENDIF
41     YHELP(ICOUNT)=0.
42     DO 110 ISUM=1,3
43     YHELP(ICOUNT)=YHELP(ICOUNT)+GPOLY(KENNPOL,KS,ISUM)*
44     1X**ISUM
45     110     CONTINUE
46     XHELP(ICOUNT)=X
47     X=X+WINT
48     90     CONTINUE
49     WRITE(55,*) (XHELP(I),YHELP(I),I=1,NUM)
50     100     CONTINUE
51     C
52     C          DELTAANTEIL DER SPEKTRALFUNKTION FUER DIE ELEKTRON
53     C          PHONON WECHSELWIRKUNG
54     C
55     WRITE(55,*) 1,0,1,0,2,2
56     WRITE(55,*) XCONST,TEMP*(1.-QUOTQ)*(1.-QUOTQ)*AMP(3)
57     WRITE(55,*) XCONST,TEMP*(1.-QUOTQ*QUOTQ)*AMP(3)
58     WRITE(55,*) XCONST,.5*AMPG1M*TEMP*(1.-QUOTQ)*AMP(3)
59     WRITE(55,*) -XCONST,.5*AMPG1M*TEMP*(1.-QUOTQ)*AMP(3)
60     WRITE(55,*) XCONST,.5*AMPG1P*TEMP*AMP(3)
61     WRITE(55,*) -XCONST,.5*AMPG1P*TEMP*AMP(3)
62     TEMP=TEMP+TSTEP
63     60     CONTINUE
64     STOP
65     END

```

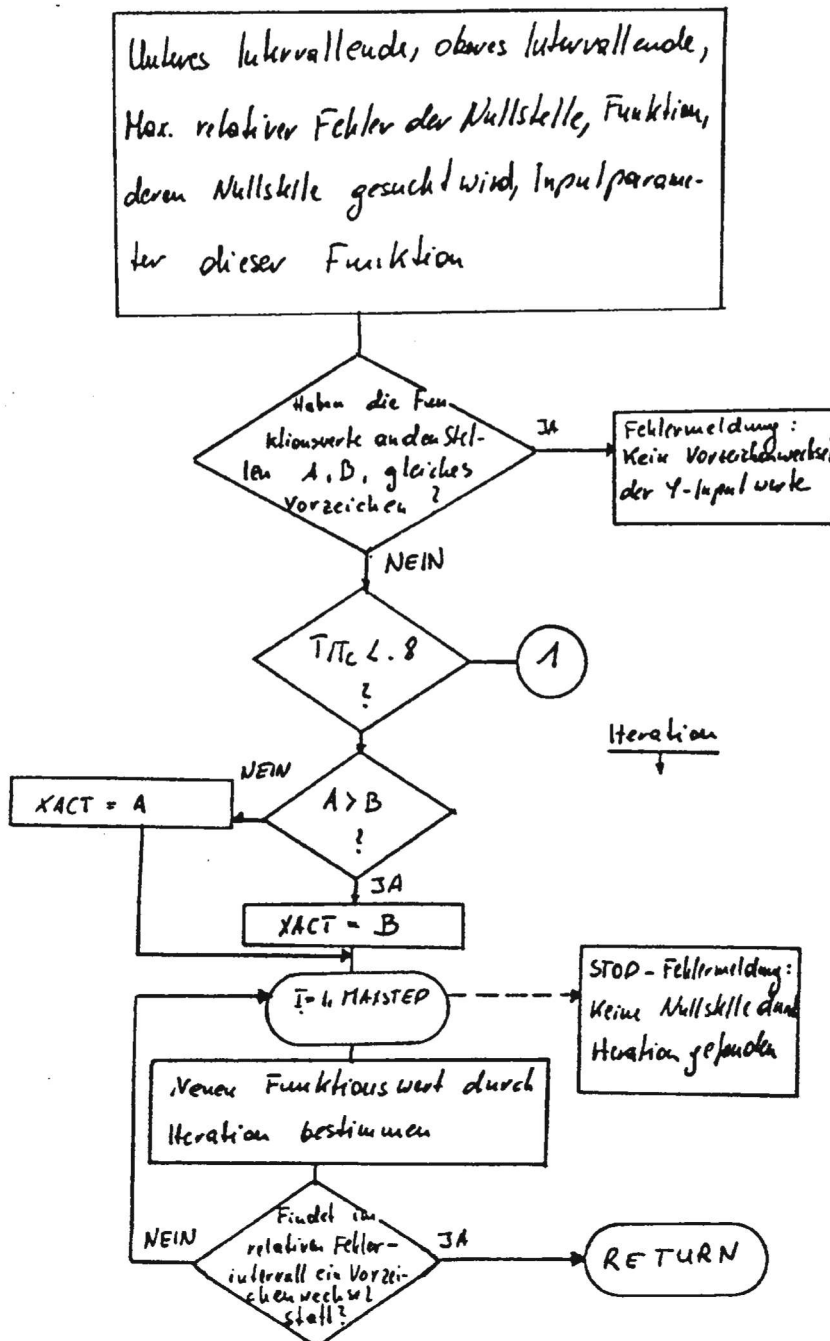
SUBROUTINE CMSREFA

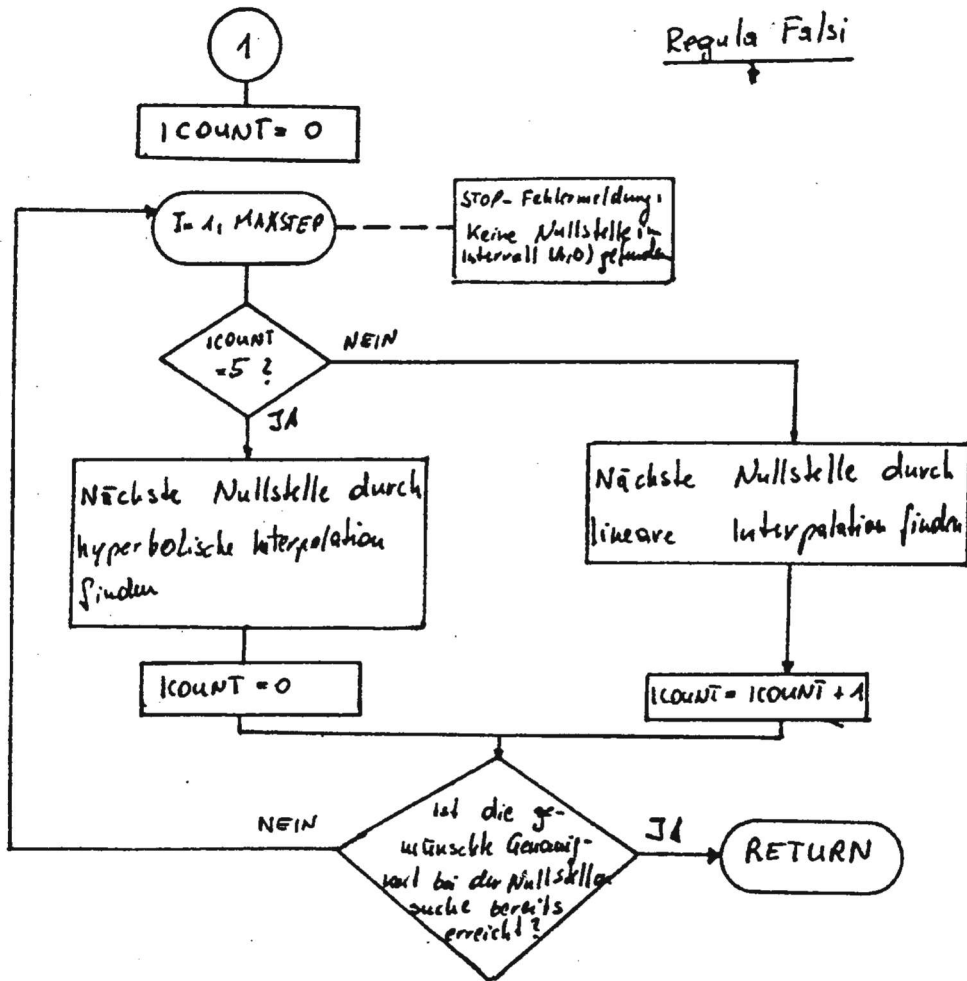
=====

Zweck: Finden der Nullstelle einer gegebenen Funktion in einem gegebenen Intervall mit Hilfe der Regula Falsi

Input: Unteres Intervallende (A), oberes Intervallende (B), Max. relativer Fehler der Nullstelle (EPS), Funktion deren Nullstelle im Intervall (A,B) gesucht wird (FUNCTION), Parameter dieser Funktion (PARA1, PARA2, PARA3)

Output: Nullstelle der Funktion FUNCTION im Intervall (A,B)





SUBROUTINE CMSREFA(A,B,EPS,FUNCTON,PARA1,PARA2,PARA3,X)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE MODEL SPECTRAL FUNCTIONS
FOR INPUT OF AS

HOST = CYBER 720
COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-83
PURPOSE OF ROUTINE = FIND ROOT OF FUNCTON
VERSION = 1.0
DATE = 22-11-1983
SOURCE FILENAME = CMSREFA
AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
A	REAL	I	LOWER STARTING VALUE FOR ROOT OF FUNCTON
B	REAL	I	SECOND STARTING VALUE FOR ROOT OF FUNCTON
EPS	REAL	I	MAX. RELATIVE ERROR OF X (X=COMPUTED ROOT OF FUNCTON)
FUNCTON	REAL	I	USED FUNCTON FOR FINDING THE ROOT BETWEEN (A,B)
PARA1	INT	I	FIRST ACTUAL PARAMETER FOR FUNCTON
PARA2	REAL	I	SECOND ACTUAL PARAMETER FOR FUNCTON
PARA3	REAL	I	THIRD ACTUAL PARAMETER FOR FUNCTON
X	REAL	O	ROOT OF FUNCTON BETWEEN (A,B)

DECLARATIVE SECTION

PARAMETER (MAXSTEP=1000)

X1=A

X2=B

Y1=FUNCTON(X1,PARA1,PARA2,PARA3)

Y2=FUNCTON(X2,PARA1,PARA2,PARA3)

IF (Y1*Y2.GT.0.) STOP

1'SR CMSREFA:NO SIGN CHANGE IN INPUT Y-VALUES'

IF (PARA3/PARA2.LT..8) THEN

FIND ROOT BY ITERATION

IF (A.GT.B) THEN

XACT=B

ELSE

XACT=A

```
2      ENDIF
3      DO 20 ISTEP=1,MAXSTEP
4      XNEW=XACT-CMSMAGN(XACT,PARA1,PARA2,PARA3)
5      Y1=CMSMAGN(XNEW,PARA1,PARA2,PARA3)
6      Y2=CMSMAGN(XNEW*(1.+EPS),PARA1,PARA2,PARA3)
7      X=XNEW
8      IF (Y1*Y2.LE.0.) GOTO 999
9      XACT=XNEW
10     CONTINUE
11     STOP 'SR CMSREFA: FAILED FINDING ROOT BY IT.'
12     ELSE
13     C
14     C      FIND ROOT BY REGULA FALSI
15     C
16     ICOUNT=0
17     DO 10 ISTEP=1,MAXSTEP
18     IF (ICOUNT.EQ.5) THEN
19     ICOUNT=0
20     C
21     C      HYPERBOLIC APROXIMATION
22     C
23     CONST=(Y1-Y2)/(X2-X1)*X2
24     XNEW=-CONST*X1/(Y1-CONST)
25     YNEW=FUNCTION(XNEW,PARA1,PARA2,PARA3)
26     X=XNEW
27     IF (YNEW.EQ.0.) GOTO 999
28     IF (YNEW*Y1.LT.0.) THEN
29     X2=XNEW
30     Y2=YNEW
31     IF (ABS((X1-X2)/X2).LE.EPS) GOTO 999
32     ELSE
33     X1=XNEW
34     Y1=YNEW
35     IF (ABS((X1-X2)/X1).LE.EPS) GOTO 999
36     ENDIF
37     ELSE
38     C
39     C      LINEAR APROXIMATION
40     C
41     ICOUNT=ICOUNT+1
42     XNEW=X1-Y1*(X2-X1)/(Y2-Y1)
43     YNEW=FUNCTION(XNEW,PARA1,PARA2,PARA3)
44     X=XNEW
45     IF (YNEW.EQ.0.) GOTO 999
46     IF (YNEW*Y1.LT.0.) THEN
47     X2=XNEW
48     Y2=YNEW
49     IF (ABS((X1-X2)/X2).LE.EPS) GOTO 999
50     ELSE
51     X1=XNEW
52     Y1=YNEW
53     IF (ABS((X1-X2)/X1).LE.EPS) GOTO 999
54     ENDIF
55     ENDIF
56     CONTINUE
57     STOP 'SR CMSREFA: FAILED FINDING ROOT'
58     ENDIF
59     RETURN
60     999
61     END
```

SUBROUTINE CMSEXPJ

=====

Zweck: Berechnen der Thermodynamischen Erwartungswerte $\langle J_z^2 \rangle$ und $\langle J_z \rangle$ sowie der Energieaufspaltung im Molekularfeld im Rahmen der Molekularfeldnäherung

Input: Temperatur (TEMP), Kritische Temperatur für Magnetische Ordnung (TC), Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses (RJ)

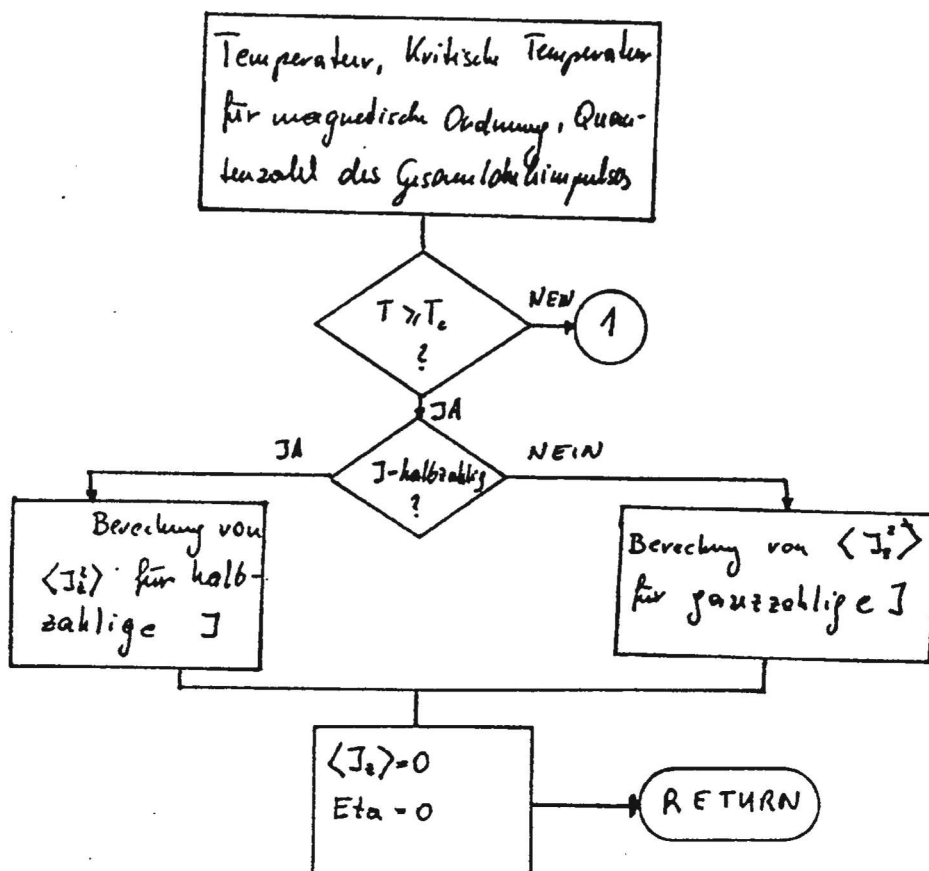
Output: Erwartungswerte $\langle J_z^2 \rangle$, $\langle J_z \rangle$ sowie $\text{Eta} = .5/\Delta E$

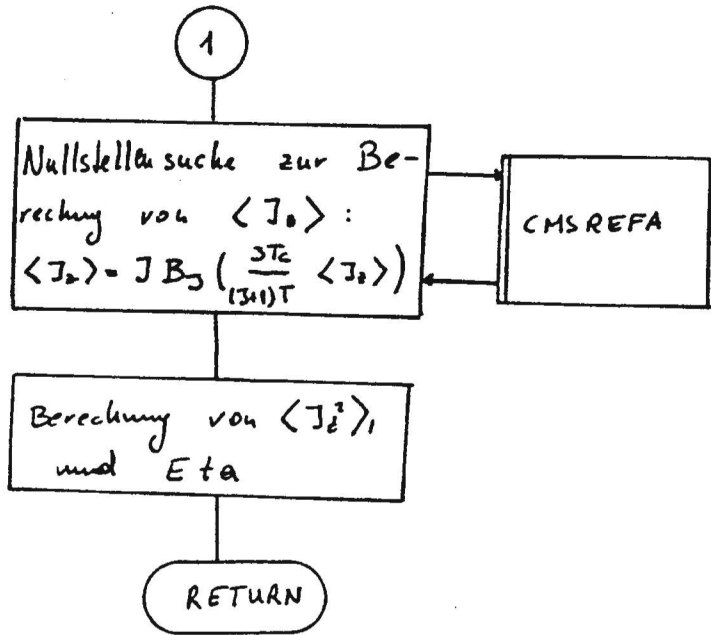
Gleichungen:

$$\begin{aligned} \langle J_z \rangle &= \frac{1}{2} \left\{ 2J+1 \operatorname{ctgh} \left(\frac{T_c}{T} \frac{3(2J+1)}{2J(J+1)} \langle J_z \rangle \right) - \operatorname{ctgh} \left(\frac{T_c}{T} \frac{3\langle J_z \rangle}{2J(J+1)} \right) \right\} \quad T < T_c \\ \langle J_z^2 \rangle &= \left\{ J(J+1) - \frac{1}{2} (2J+1) \operatorname{ctgh} \eta (2J+1) \operatorname{ctgh} \eta + \frac{1}{2} \operatorname{ctgh}^2 \eta \right\} \\ \eta = \text{Eta} &= \frac{3}{2} \frac{T_c}{T} \frac{\langle J_z \rangle}{J(J+1)} \end{aligned}$$

Gleichungen:

$$\begin{aligned} \langle J_z \rangle &= 0 ; \quad \eta = 0 \\ \langle J_z^2 \rangle &= \frac{1}{2J+1} \sum_{M=-J}^J M^2 \quad \begin{cases} J = \text{mod } 2: & \frac{2}{2J+1} \sum_{M=1}^J M^2 \\ J \neq \text{mod } 2: & \frac{2}{2J+1} \left\{ (1/2)^2 + \dots + (J)^2 \right\} \end{cases} \quad T \gg T_c \end{aligned}$$





SUBROUTINE CMSEXPJ(TEMP,TC,RJ,EXPJZ,EXPJ2Z,ETA)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE MODEL SPECTRAL FUNCTIONS
FOR INPUT OF AS

HOST = CYBER 720
COMPILER = FOR5 RZ-TU VERSION 23-9-63
PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE EXPECTATION VALUES OF
JZ, JZ**2 AND ENERGY SPLIT BY
APPLIED MEAN FIELD
VERSION = 1.0
DATE = 22-11-1983
SOURCE FILENAME = CMSEXPJ
AUTHOR = D. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
TEMP	REAL	I	TEMPERATUR
TC	REAL	I	CRITICAL TEMPERATUR FOR MAGNETICAL ORDER
RJ	INT	I	QUANTUM NUMBER FOR ANGULAR MOMENTUM
EXPJZ	REAL	O	EXPECTATION VALUE OF JZ
EXPJ2Z	REAL	O	EXPECTATION VALUE OF JZ**2
ETA	REAL	O	ETA=.5*DELTA E/(K*TEMP) DELTA E=ENERGY SPLITTING BY APPLYING A MEAN FIELD, K=BOLTZMANN-CONST.

DECLARATIVE SECTION

EXTERNAL CMSMAGN

DATA EPS1,EPS2 /1.E-3,1.E-6/

EXECUTIVE SECTION

```
IF (TEMP.GE.TC) THEN
  EXPJZ=0.
  EXPJ2Z=0.
  ETA=0.
  IF (MOD(INT(2.*RJ+.1),2).EQ.1) THEN
    ACTJ=RJ
    DO 10 I=1,INT(RJ)+1
      EXPJ2Z=EXPJ2Z+ACTJ*ACTJ
      ACTJ=ACTJ-1.
10  CONTINUE
  ELSE
    DO 15 I=1,INT(RJ+.1)
      EXPJ2Z=EXPJ2Z+FLOAT(I*I)
```

- 245 -

```
15      CONTINUE
      ENDIF
      EXPJ2Z=EXPJ2Z*2./((2.*RJ+1.)
ELSE
      CONST=RJ/2.
      Y1=CMSMAGN(CONST,RJ,TC,TEMP)
      Y2=CMSMAGN(CONST*.9999,RJ,TC,TEMP)
      XRELO=CONST*(1.+Y1*.0001/(Y2-Y1))
      A=XRELO*.1
      B=XRELO*10.
      IF (B.GT.RJ) B=RJ
      IF (TEMP.LT.TC*.5) THEN
        EPS=EPS2
      ELSE
        EPS=EPS1
      ENDIF
      C
      C      COMPUTE EXPJZ
      C
      CALL CMSREFA(A,B,EPS,CMSMAGN,RJ,TC,TEMP,EXPJZ)
      C
      C      COMPUTE ETA
      C
      ETA=1.5*TC/TEMP*EXPJZ/RJ/(RJ+1)
      C
      C      COMPUTE EXPJ2Z
      C
      RJ2=2.*RJ
      EXPJ2Z=RJ*(RJ+1.)-.5*((RJ2+1.)/TANH(ETA*
1 (RJ2+1.)/TANH(ETA)-1./(TANH(ETA)**2))
      ENDIF
      RETURN
      END
```

FUNCTION CMSMAGN(X,RJ,TC,TEMP)

GENERAL PURPOSE: COMPUTE MODEL SPECTRAL FUNCTIONS
FOR INPUT OF AS

HOST = CYBER 720
COMPILER = FOR5 R2-TU VERSION 23-9-83
PURPOSE OF ROUTINE = COMPUTE MAGNETIZATION ERROR
FUNCTION
VERSION = 1.0
DATE = 22-11-1983
SOURCE FILENAME = CMSEXPJ
AUTHOR = O. EIBL

ANNOTATION OF DUMMY PARAMETERS

P. NAME	TYPE	I/O	EXPLANATION
RJ	INT	I	QUANTUM NUMBER OF ANGULAR MOMENTUM
X	REAL	I	REDUCED MAGNETIZATION
TC	REAL	I	TC=CRITICAL MAGNETIC ORDERING TEMPERATUR
TEMP	REAL	I	TEMPERATUR

EXECUTIVE SECTION

RJ2=RJ*2.
TCDT=TC/TEMP*3./(RJ+1.)
QUOTJ=(RJ2+1.)/RJ2
CMSMAGN=X-RJ2/2.*(QUOTJ/TANH(QUOTJ*X*TCDT)-1./RJ2/
1TANH(X*TCDT/RJ2))
RETURN
END

A.3 Tabellen der Ergebnisse für GdAl_2

Anhang A.3 enthält die Ergebnisse, die für GdAl_2 mit Hilfe der Rechenprogramme erhalten wurden. Dabei wurden die Transportkoeffizienten beim Vorhandensein einzelner Streumechanismen (Potential-, Magnetische- und Phononen-Streuung), und bei der Überlagerung der Streumechanismen bestimmt.

Seitenverzeichnis für die Ergebnis - Tabellen

Einzelne Streumechanismen:

Potential-Streuung	24 8
Magnetische-Streuung (ohne Bandaufspaltung)	24 9
Magnetische-Streuung (mit Bandaufspaltung)	2 50
Phononen-Streuung	2 51

Überlagerung von Streumechanismen:

Potential + Magnetische-Streuung	25 2
Potential + Phononen-Streuung	25 3
Magnetische + Phononen-Streuung	25 4
Potential + Magnetische + Phononen-Streuung	25 5

AUSGEFUEHRT AM: 04/01/21. AUSGEFUEHRT UM: 10.37.24.
BEMERKUNGEN ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF:
TEMPERATURVERHALTEN DER TRANSPORTKOEFF.-POTENTIAL STREUUNG

STAEKKE DER WECHSELWIRKUNGEN: STAEKKE1, STAEKKE2...
.10000000E+01, 0.

KONSTANTEN ABHAENGTIG VON DER BANDSTRUKTUR

MASS*V**2**N/DENSITY = .14603476E+00

D(MASS*V**2**N/DENSITY)/DE = .18842853E-05

MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN

POTENTIALSTREUUNG

ABSOLUTE STAEKKE: RHO=15. [MIKROOHM*CM]

FERMIENERGIE=1.E5 [K]

MAGNETISCHE STREUUNG

ABSOLUTE STAEKKE: PHO(T=TC)=60. [MIKROOHM*CM]

TC=150, J=7/2, FERMIENERGIE=1.E5 [K], VOIEZ= 493[A**3], MBA

PHONONEN STREUUNG

ABSOLUTE STAEKKE: RHO(T=TOBEY)=90. [MIKROOHM*CM]

MSDUND=1, WOFERMI=125, WOFBEY=250, FERMIENERGIE=1.E5 [K]

INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG UND INTEGRATION

GRAD DER POLYNOME (G0--.....G1++) :

6, 6, 6, 6, 6, 6,

ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG = .25000000E+02

STUETZSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION

G0--.....G1++ :

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 0,

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

EL. RESESTIVITY THERMPOWER HEAT CONDUCT. TEMP
[MIKROOHM*CM] [MIKROVOLT/K] [MILLIWATT/(CM*K)] [K]

.15009187E+02	-.48777967E-01	.32551535E+02	.20000000E+02
.15009186E+02	-.97555868E-01	.65103089E+02	.40000000E+02
.15009184E+02	-.14633363E+00	.97654684E+02	.60000000E+02
.15009181E+02	-.19511120E+00	.13020634E+03	.80000000E+02
.15009178E+02	-.24388850E+00	.16275807E+03	.10000000E+03
.15009174E+02	-.29256546E+00	.19530991E+03	.12000000E+03
.15009169E+02	-.34144202E+00	.22786186E+03	.14000000E+03
.15009164E+02	-.39021812E+00	.26041395E+03	.16000000E+03
.15009157E+02	-.43899367E+00	.29296621E+03	.18000000E+03
.15009151E+02	-.48776853E+00	.32551864E+03	.20000000E+03
.15009143E+02	-.53654291E+00	.35807127E+03	.22000000E+03
.15009134E+02	-.58531646E+00	.39062413E+03	.24000000E+03
.15009125E+02	-.63408920E+00	.42317722E+03	.26000000E+03
.15009115E+02	-.68286107E+00	.45573057E+03	.28000000E+03
.15009105E+02	-.73163200E+00	.48828421E+03	.30000000E+03

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

EL. RESESTIVITY THERMPOWER HEAT CONDUCT. TEMP
[MIKROOHM*CM] [MIKROVOLT/K] [MILLIWATT/(CM*K)] [K]

.15009187E+02	-.12194494E-01	.81378829E+01	.50000000E+01
.15009187E+02	-.24388988E-01	.16275766E+02	.10000000E+02
.15009187E+02	-.36583479E-01	.24413650E+02	.15000000E+02
.15009187E+02	-.48777967E-01	.32551535E+02	.20000000E+02
.15009187E+02	-.60972451E-01	.40689421E+02	.25000000E+02
.15009186E+02	-.73166930E-01	.48827308E+02	.30000000E+02
.15009186E+02	-.85361402E-01	.56965198E+02	.35000000E+02
.15009184E+02	-.97555868E-01	.65103089E+02	.40000000E+02

TEMPERATURVERHALTEN DES TRANSPORTKOEFF.-MAGN. (DBA)STREUUNG

0. 0. 0. 0. 0.

TARELLE WIRD FUER 6-TE DIMENSION ANGELEGT

60141303E+02	-54226107E+00	.11373403E+03	.28000000E+03
60141263E+02	-73163200E+00	.12185825E+03	30000000E+03

AUSGEFUEHRT AM: 04/01/73. AUSGEFUEHRT UM: 16.21.01.
BEMERKUNGEN ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF:
TEMPERATURVERHALTEN DER TRANSPORTKOEFF.-MAGNETIS. STREUUNG

STAEKKE DER WECHSELWIRKUNGEN: STAEKKE1, STAEKKE2...

0. .10000000E+01, 0.

KONSTANTEN ABHAENGIG VON DER BANDSTRUKTUR

MASS*V*2*N/DENSITY = .14603476E+00

C(MASS*V*2*N/DENSITY)/DE = .18842853E-05

MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN

POTENTIALSTREUUNG

ABSOLUTE STAEKKE: RHOO=15. [MIKROOHM*CM]

FERMIENERGIE=1.55 [K]

MAGNETISCHE STREUUNG

ABSOLUTE STAEKKE: RHU(T=TC)=60. [MIKROOHM*CM]

TC=150. J=7/2. FERMIENERGIE=1.55 [K], VOLT= 492A*33, MRA

POLYNOM STREUUNG

ABSOLUTE STAEKKE: RHU(T=TDREY)=90. [MIKROOHM*CM]

WSPUND=1., OEFEXI=125, WDEREY=250, FERMIENERGIE=1.55 [K]

INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG UND INTEGRATION

GRAD DER POLYNOME (G0--, ..., G1++) :

5. 6. 6. 6. 5. 6.

ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG = .25000000E+03

STUFTSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION

G0--, ..., G1++ :

0. . 0. , 0. ,

0. . 0. , 0. ,

INPUT ZUR TEMPERATURSTEUERUNG

ANFANGSTEMPERATUR= .20000000E+02 TEMP. SCHRITTWEITE= .20000000E+02

ZAHL DER SCHRITTE= 15

GRÖSSE DES FUNKTIONENRAUMES: 0-6

TABELLE WIRD FUER 6-TE DIMENSION ANGELEGT

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMOPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP. [K]
.61877161E+00	.19383311E+01	.25596728E+03	.20000000E+02
.65424647E+01	.24495039E+01	.93557899E+02	.40000000E+02
.14313850E+02	.20484129E+01	.83584975E+02	.60000000E+02
.22445135E+02	.13784766E+01	.79115300E+02	.80000000E+02
.31384557E+02	.75412875E+00	.74370274E+02	.10000000E+03
.41617209E+02	.23408286E+00	.69088175E+02	.12000000E+03
.53495700E+02	-.18677011E+00	.63626084E+02	.14000000E+03
.60141478E+02	-.39021812E+00	.64989995E+02	.16000000E+03
.60141473E+02	-.43899367E+00	.73113871E+02	.18000000E+03
.60141446E+02	-.49776983E+00	.81237793E+02	.20000000E+03
.60141415E+02	-.53654291E+00	.89361764E+02	.22000000E+03
.60141381E+02	-.58531646E+00	.97485790E+02	.24000000E+03
.60141345E+02	-.63408920E+00	.10560988E+03	.26000000E+03
.60141305E+02	-.68286107E+00	.11373403E+03	.28000000E+03
.60141263E+02	-.73163200E+00	.12185825E+03	.30000000E+03

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMOPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP. [K]
.38696820E-06	.83092765E+00	.29379432E+08	.50000000E+01
.49204140E-02	.13743997E+01	.88285946E+04	.10000000E+02
.12376659E+00	.16912236E+01	.75122129E+03	.15000000E+02
.61877161E+00	.19383311E+01	.25596728E+03	.20000000E+02
.16117328E+01	.21543474E+01	.15173377E+03	.25000000E+02
.20236697E+01	.23227859E+01	.11636323E+03	.30000000E+02
.47085354E+01	.24229141E+01	.10113624E+03	.35000000E+02
.65424647E+01	.24495039E+01	.93557899E+02	.40000000E+02

AUSGEFUEHRT AM: 04/01/21. AUSGEFUEHRT UM: 10.46.05.
BEMERKUNGEN ZUM AKTUELLEN PROZESSLAUF:
TEMPERATURVERHALTEN DER TRANSPORTKOEFF.-PHONONEN STREUUNG

STÄRKEN DER WECHSELWIRKUNGEN: STÄRKE1, STÄRKE2...
0. 0. 1.0000000E+01,

KONSTANTEN ABHÄNGIG VON DER BANDSTRUKTUR
MASS*(V**2)*N/DENSITY = .14603476E+00

D(MASS*(V**2)*N/DENSITY)/DE = .18842853E-05

MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN

POTENTIALSTREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: $\rho_{HO}=15$. [MIKROOHM*CM]

FERMIENERGIE=1.55 [K]

MAGNETISCHE STREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: $\rho_{HO}(T=TC)=60$. [MIKROOHM*CM]

$TC=150$, $J=7/2$, FERMIENERGIE=1.55 [K], $VOLF7=493(A**3)$, M9A

PHONONEN STREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: $\rho_{HO}(T=DEBEY)=90$. [MIKROOHM*CM]

$VSCUND=1$, $DEBEY=125$, $WDEBEY=250$, FERMIENERGIE=1.55 [K]

INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG UND INTEGRATION

GRAD DER POLYNOME (50--...61++)

5, 5, 5, 5, 5, 5,

GRAD DER POLYNOMENTWICKLUNG = .25000000E+03

STIFTSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION

50--...61++

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP [K]
.12727911E+00	-.48645336E-01	.40540008E+03	.20000000E+02
.22006112E+01	-.95801279E-01	.14991699E+03	.40000000E+02
.00806662E+01	-.14481559E+00	.93081963E+02	.60000000E+02
.16630164E+02	-.19784490E+00	.80248964E+02	.80000000E+02
.25941678E+02	-.25098983E+00	.73050011E+02	.10000000E+03
.35159418E+02	-.30256946E+00	.69683779E+02	.12000000E+03
.44101370E+02	-.35277583E+00	.67898801E+02	.14000000E+03
.52785069E+02	-.40210205E+00	.66853901E+02	.16000000E+03
.61263184E+02	-.45092069E+00	.66193660E+02	.18000000E+03
.69583586E+02	-.49946257E+00	.65750833E+02	.20000000E+03
.77783178E+02	-.54786202E+00	.65439812E+02	.22000000E+03
.85889273E+02	-.59619584E+00	.65212800E+02	.24000000E+03
.93921097E+02	-.64450709E+00	.65042010E+02	.26000000E+03
.10187630E+03	-.69281954E+00	.64910222E+02	.28000000E+03
.10982345E+03	-.74114630E+00	.64806352E+02	.30000000E+03

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP [K]
.14984831E-03	-.10734458E-01	.56785749E+04	.50000000E+01
.46282233E-02	-.24925053E-01	.14521396E+04	.10000000E+02
.33070128E-01	-.37224319E-01	.67441659E+03	.15000000E+02
.12727911E+00	-.48645336E-01	.40540008E+03	.20000000E+02
.34340997E+00	-.60244456E-01	.28297957E+03	.25000000E+02
.73565161E+00	-.72118989E-01	.2170423E+03	.30000000E+02
.13457779E+01	-.83997290E-01	.17683716E+03	.35000000E+02
.22006112E+01	-.95801279E-01	.14991699E+03	.40000000E+02

*****PROGRAM COTRACO*****
 AUSGEFUEHRT AM: 84/01/23. AUSGEFUEHRT UM: 16.44.45.
 BEMERKUNGEN ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF:
 TEMP. VERHALTEN DER TRANSPORTKO.-POTENTIAL+MAGNET. STREUUNG

STAERKEN DER WECHSELWIRKUNGEN: STAERKE1, STAERKE2...
 .10000000E+01, .10000000E+01, 0.
 KONSTANTEN ABHAENGIG VON DER BANDSTRUKTUR
 MASS* $\langle V^{*2} \rangle$ *N/DENSITY = .14603476E+00
 D(MASS* $\langle V^{*2} \rangle$ *N/DENSITY)/DE = .18842853E-05
 MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN
 POTENTIALSTREUUNG
 ABSOLUTE STAERKE: RHO=15. [MIKROOHM*CM]
 FERMIENERGIE=1.E5 [K]
 MAGNETISCHE STREUUNG
 ABSOLUTE STAERKE: RHO(T=TC)=60. [MIKROOHM*CM]
 TC=150, J=7/2, FERMIENERGIE=1.E5 [K], VOLEZ= 4931A**3], MBA
 PHONONEN STREUUNG
 ABSOLUTE STAERKE: RHO(T=DEBEY)=90. [MIKROOHM*CM]
 VSDUND=1., QFERMI=125, WDEBEY=250, FERMIENERGIE=1.E5 [K]
 INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG UND INTEGRATION
 GRAD DER POLYNOME (G0--, ..., G1++) :
 6, 6, 6, 6, 6, 6,
 ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG = .25000000E+03
 STUETZSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION
 G0--, ..., G1++ :
 0, 0, 0, 0, 0, 0,
 0, 0, 0, 0, 0, 0,

INPUT ZUR TEMPERATURSTEUERUNG
 ANFANGSTEMPERATUR= .20000000E+02 TEMP. SCHRITTWEITE= .20000000E+02
 ZAHL DER SCHRITTE= 15
 GROESSE DES FUNKTIONENRAUMES: 0-6
 TABELLE WIRD FUER 6-TE DIMENSION ANGELEGT

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

EL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMOPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP [K]
.15874309E+02	.41268193E+00	.27443628E+02	.20000000E+02
.21856785E+02	.11509132E+01	.37679906E+02	.40000000E+02
.29434188E+02	.11099272E+01	.44924445E+02	.60000000E+02
.37488587E+02	.80674956E+00	.49185965E+02	.80000000E+02
.46403181E+02	.44739568E+00	.51039463E+02	.10000000E+03
.56628341E+02	.97696983E-01	.51034109E+02	.12000000E+03
.68505002E+02	-.22045241E+00	.49737700E+02	.14000000E+03
.75150662E+02	-.39021812E+00	.52010130E+02	.16000000E+03
.75150631E+02	-.43899367E+00	.58511498E+02	.18000000E+03
.75150596E+02	-.48776863E+00	.65012901E+02	.20000000E+03
.75150558E+02	-.53654291E+00	.71514345E+02	.22000000E+03
.75150516E+02	-.58531646E+00	.78015833E+02	.24000000E+03
.75150470E+02	-.63408920E+00	.84517368E+02	.26000000E+03
.75150421E+02	-.68286107E+00	.91018956E+02	.28000000E+03
.75150367E+02	-.73163200E+00	.97520599E+02	.30000000E+03

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. PESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMOPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP [K]
.15009188E+02	-.12191176E-01	.81378584E+01	.50000000E+01
.15020785E+02	-.89601496E-02	.16150184E+02	.10000000E+02
.15223557E+02	.13237816E+00	.22826282E+02	.15000000E+02
.15874309E+02	.41268193E+00	.27443628E+02	.20000000E+02
.16978123E+02	.69641200E+00	.30692046E+02	.25000000E+02
.18410477E+02	.91644321E+00	.33328207E+02	.30000000E+02
.20076090E+02	.10649010E+01	.35692673E+02	.35000000E+02
.21856785E+02	.11509132E+01	.37679906E+02	.40000000E+02

*****PROGRAM CONTINUED*****

AUSGEFUEHRT AM: 84/01/21. AUSGEFUEHRT UM: 14.15.53.

BEMERKUNGEN ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF:

TEMP.VERHALTEN DER TRANSPORTKG. POTENTIAL+PHONON STREUUNG

STAERKEN DER WECHSELWIRKUNGEN: STAERKE1,STAERKE2...

.10000000E+01, . 0. , .10000000E+01,

KONSTANTEN ABHAENGIG VON DER BANDSTRUKTUR

MASS*<V**2>*N/DENSITY = .14603476E+00

D(MASS*<V**2>*N/DENSITY)/DE = .18642853E-05

MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN

POTENTIALSTREUUNG

ABSOLUTE STAERKE: RHO=15. [MIKROOHM*CM]

FERMIENERGIE=1.E5 [K]

MAGNETISCHE STREUUNG

ABSOLUTE STAERKE : RHO(T=TC)=60. [MIKROOHM*CM]

TC=150,J=7/2,FERMIENERGIE=1.E5 [K],VOLTZ= 493LA*3],MBA

PHONONEN-STREUUNG

ABSOLUTE STAERKE: RHO(T=DEBEY)=50. [MIKROOHM*CM]

VSDUND=1.,QFERMI=125,WDEBEY=250,FERMIENERGIE=1.E5 [K]

INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG UND INTEGRATION

GRAD DER POLYNOME (G0--,...,G1++) :

6, 6, 6, 6, 6, 6,

ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG = .25000000E+03

STUETZSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION

G0--,...,G1++ :

0. , 0. , 0. ,

0. , 0. , 0. ,

INPUT ZUR TEMPERATURSTEUERUNG

ANFANGSTEMPERATUR= .20000000E+02 TEMP.SCHRITTWEITE= .20000000E+02

ZAHL DER SCHRITTE= 15

GRÖSSE DES FUNKTIONENRAUMES: 0-6

TABELLE WIRD FÜR 6-TE DIMENSION ANGELEGT

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

EL.RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP [K]
.15155646E+02	-.49433442E-01	.29552548E+02	.20000000E+02
.17644128E+02	-.10102379E+00	.43288152E+02	.40000000E+02
.23896335E+02	-.15130882E+00	.47178634E+02	.60000000E+02
.32334571E+02	-.20189252E+00	.48733490E+02	.80000000E+02
.41416096E+02	-.25245312E+00	.49976448E+02	.10000000E+03
.50461498E+02	-.30243499E+00	.51135460E+02	.12000000E+03
.59296001E+02	-.35182892E+00	.52190644E+02	.14000000E+03
.67914810E+02	-.40080047E+00	.53128344E+02	.16000000E+03
.76353204E+02	-.44950575E+00	.53952739E+02	.18000000E+03
.84648623E+02	-.49805499E+00	.54675804E+02	.20000000E+03
.92832023E+02	-.54651887E+00	.55311226E+02	.22000000E+03
.10092731E+03	-.59494092E+00	.55871867E+02	.24000000E+03
.10895263E+03	-.64334737E+00	.56368946E+02	.26000000E+03
.11692173E+03	-.69175368E+00	.56811947E+02	.28000000E+03
.12484514E+03	-.74016869E+00	.57208777E+02	.30000000E+03

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

EL.RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP [K]
.15009339E+02	-.12192971E-01	.81224189E+01	.50000000E+01
.15014026E+02	-.24420695E-01	.16039108E+02	.10000000E+02
.15045424E+02	-.36795769E-01	.23321761E+02	.15000000E+02
.15155646E+02	-.49433442E-01	.29552548E+02	.20000000E+02
.15419237E+02	-.62317917E-01	.34552323E+02	.25000000E+02
.15202655E+02	-.75306996E-01	.38383045E+02	.30000000E+02
.15642546E+02	-.88239972E-01	.41225645E+02	.35000000E+02
.17644128E+02	-.10102379E+00	.43288152E+02	.40000000E+02

ANFANGSTEMP. DES TRANSPORTK. - MAGNET. + PHONONEN STREUUNG
 TEMPERATURVERHALTEN DER TRANSPORTK. - MAGNET. + PHONONEN STREUUNG

STÄRKEN DER WECHSELWIRKUNGEN: STÄRKE1, STÄRKE2...
 0. 1.0000000E+01, 1.0000000E+01,

KONSTANTEN ABHÄNGIG VON DER BANDSTRUKTUR

MASS*CV**2**N/DENSITY = .14603476E+00

D(MASS*CV**2**N/DENSITY)/DE = .18842853E-05

MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN

POTENTIALSTREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: PH00=15. [MIKROOHM*CM]

FERMIENERGIE=1.E5 [K]

MAGNETISCHE STREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: PH0(T=TC)=60. [MIKROOHM*CM]

TC=150, J=7/2, FERMIENERGIE=1.E5 [K], VOIE7= 493[A**3], M9A

PHONONEN STREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: PH0(T=TDREY)=90. [MIKROOHM*CM]

VSOUND=1., DEFRY=125, WDESEY=250, FERMIENERGIE=1.E5 [K]

INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG UND INTEGRATION

GRAD DER POLYNOME (G0--...,G1++) :

6. 6. 6. 6. 6. 6.

ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG = .25000000E+03

STUFTSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION

G0--...,G1++ :

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMOPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP. [K]
.79909224E+00	.14978377E+01	.15283837E+03	.20000000E+02
.87771018E+01	.14539549E+01	.57053578E+02	.40000000E+02
.22749351E+02	.90944861E+00	.44210746E+02	.60000000E+02
.39540015E+02	.50725666E+00	.39270046E+02	.80000000E+02
.57876936E+02	.20052409E+00	.35541295E+02	.10000000E+03
.77247750E+02	-.54027374E-01	.34517909E+02	.12000000E+03
.97988952E+02	-.27367900E+00	.32743426E+02	.14000000E+03
.11322252E+03	-.29786141E+00	.32888858E+02	.16000000E+03
.12161111E+03	-.44658227E+00	.34696829E+02	.18000000E+03
.12987257E+03	-.42523460E+00	.36308725E+02	.20000000E+03
.13803246E+03	-.54384532E+00	.37754552E+02	.22000000E+03
.14611116E+03	-.59243213E+00	.39058516E+02	.24000000E+03
.15412456E+03	-.64100656E+00	.40240374E+02	.26000000E+03
.16206495E+03	-.68957510E+00	.41316408E+02	.28000000E+03
.17000187E+03	-.73814551E+00	.42300150E+02	.30000000E+03

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMOPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP. [K]
.15081359E-03	-.10672235E-01	.55901736E+04	.50000000E+01
.12471829E-01	.38829305E+00	.12465553E+04	.10000000E+02
.17991319E+00	.11449734E+01	.34582617E+03	.15000000E+02
.70909224E+00	.14978377E+01	.15283837E+03	.20000000E+02
.20193191E+01	.16486570E+01	.97642015E+02	.25000000E+02
.35052890E+01	.16611200E+01	.75483943E+02	.30000000E+02
.60796337E+01	.15814629E+01	.64047568E+02	.35000000E+02
.87771018E+01	.14539549E+01	.57053578E+02	.40000000E+02

PROGRAMM: TEMPERATUR- UND WERTE
 AUSGEFUEHRT AM: 24/01/73. AUSGEFUEHRT UM: 18.48.54.
 BEMERKUNGEN ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF:
 TEMP. VERHALTEN DER TRANSPORTK. - ALLE STREUMECHANISMEN

STÄRKEN DER WECHSELWIRKUNGEN: STAERKE1, STAERKE2...
 .10000000E+01. .10000000E+01. .10000000E+01.

KONSTANTEN ABHÄNGIG VON DER BANDSTRUKTUR

MASS*V**2**N/DENSITY = .14603476E+00

D(MASS*V**2**N/DENSITY)/DE = .19842853E-05

MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN

POTENTIALSTREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: RHOD=15. [MIKROOHM*CM]

FERMIENERGIE=1.E5 [K]

MAGNETISCHE STREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: RHOT(T=TC)=50. [MIKROOHM*CM]

TC=150, J=7/2, FERMIENERGIE=1.E5 [K], VOLLE7= 493[A**3], M8A

POLYNOMEN STREUUNG

ABSOLUTE STÄRKE: RHOT(T=TDREY)=20. [MIKROOHM*CM]

VSOUND=1., DFERMT=125, WDEREY=250, FERMIENERGIE=1.E5 [K]

INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG UND INTEGRATION

GRAD DER POLYNOME (G0--, ..., G1++) :

6. 6. 6. 6. 6. 6.

ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG = .25000000E+03

STUFTSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION

G0--, ..., G1++:

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

0. 0. 0. 0. 0. 0.

INPUT ZUR TEMPERATURSTEUERUNG

ANFANGSTEMPERATUR= .20000000E+02 TEMP. SCHRITTWEITE= .20000000E+02

ZAHL DER SCHRITTE= 15

GRÖSSE DES FUNKTIONENRAUMES: 0-6

TABELLE WIRD FÜR 6-TE DIMENSION ANGELEGT

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP [K]
.16001776E+02	.37260315E+00	.25582987E+02	.20000000E+02
.24291879E+02	.81521115E+00	.29566554E+02	.40000000E+02
.38258622E+02	.61655195E+00	.30039425E+02	.60000000E+02
.54974057E+02	.36024063E+00	.30015986E+02	.80000000E+02
.73065921E+02	.12501189E+00	.29781498E+02	.10000000E+03
.92352220E+02	-.88065934E-01	.29309521E+02	.12000000E+03
.11304845E+03	-.28203177E+00	.28619301E+02	.14000000E+03
.12825234E+03	-.39718612E+00	.29195292E+02	.16000000E+03
.13664402E+03	-.44592278E+00	.31018593E+02	.18000000E+03
.14489976E+03	-.49460032E+00	.32662149E+02	.20000000E+03
.15205548E+03	-.54324120E+00	.34151151E+02	.22000000E+03
.16113113E+03	-.59186025E+00	.35506302E+02	.24000000E+03
.16914225E+03	-.64046721E+00	.36744780E+02	.26000000E+03
.17710091E+03	-.68906851E+00	.37880964E+02	.28000000E+03
.18501651E+03	-.73766831E+00	.38926978E+02	.30000000E+03

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

FL. RESESTIVITY [MIKROOHM*CM]	THERMPOWER [MIKROVOLT/K]	HEAT CONDUCT. [MILLIWATT/(CM*K)]	TEMP [K]
.15009340E+02	-.12189828E-01	.81223974E+01	.50000000E+01
.15025535E+02	-.96341746E-02	.15927750E+02	.10000000E+02
.15257349E+02	.12268947E+00	.21995673E+02	.15000000E+02
.16003776E+02	.37260315E+00	.25582987E+02	.20000000E+02
.17335727E+02	.59048966E+00	.27483776E+02	.25000000E+02
.12205260E+02	.74327650E+00	.28544552E+02	.30000000E+02
.21545442E+02	.80772907E+00	.22181571E+02	.35000000E+02
.24291879E+02	.81521115E+00	.29566554E+02	.40000000E+02

A.4 Dokumentation eines Programmlaufes

Zur Illustration und zur Reproduktion ist in Anhang A.4 ein Programmlauf, der mit den in Anhang A.2 vorhandenen Programmen durchgeführt wurde, vollständig dokumentiert (Inputfile - Inputlisting - Ergebnislisting), der bei 20 K für die Phononen-Streuung die Transportkoeffizienten berechnet.

```

2.72E4,2.46E3,6.9E2,72.,8.,4.93E2,1,150.,2.5,1.,125.,250.,250.,
20.,20.,1
POTENTIALSTREUUNG
ABSOLUTE STAERKE: RHO=15. [MIKROOHM*CM]
FERMIENERGIE=1.E5 [K]
MAGNETISCHE STREUUNG
ABSOLUTE STAERKE : RHO(T=TC)=60. [MIKROOHM*CM]
TC=150,J=7/2,FERMIENERGIE=1.E5 [K],VLEZ= 493[A**3],MBA
PHONONEN STREUUNG
ABSOLUTE STAERKE: RHO(T=DEBEY)=90. [MIKROOHM*CM]
VSOUND=1.,QFERMI=125,WDEBEY=250,FERMIENERGIE=1.E5 [K]

```

Inputfile für das PROGRAM CMSFILE

*****MR CMSFILE:ERZEUGEN DER MODELLSPEKTRALFUNKTIONEN*****

ABSOLUTE STAERKE DER POTENTIALSTREUUNG	=	.27200E+05
DER MAGNET. STREUUNG	=	.34600E+04
DER PHONON STREUUNG	=	.69000E+03
FERMIENERGIE [K]	=	.11626E+06
ZAHLE DER ELEKTRONEN IN VLEZ	=	.72000E+02
ZAHLE DER SELTENEN ERD IONEN IN VLEZ	=	.80000E+01
VOLUMEN DER ELEMENTARZELLE [A**3]	=	.49300E+03
BANDAUFSPLATTUNG (I=1-JA; I=0-NEIN)	I =	1
KRITISCHE TEMPERATUR (MAGNETISCH)	=	.15000E+03
QUANTENZAHL DES GESAMTDREHMIMPULSES	=	.35000E+01
SCHALLGESCHWINDIGKEIT [A/SEC]	=	.10000E+01
FERMIWELLENVEKTOR [1/A]	=	.12500E+03
DEBEY TEMPERATUR [K]	=	.25000E+03
DEFINITIONSBEREICH DES POLYNOMANTEILS	=	.25000E+03
ANFANGSTEMPERATUR [K]	=	.20000E+02
TEMPERATURSCHRITTWEITE [K]	=	.20000E+02
ZAHLE DER TEMPERATURSCHRITTE	=	1

Listing vom PROGRAM CMSFILE

PHENONEN STRELUNG

ABSOLUTE STAERKE: $\rho_H(T=T_{DEBEY})=90$. [MIKROOHM*CM]

VSDUND=1., QFERMI=125, WDEBEY=250, FERMIENERGIE=1.E5 [K]

.200E+02 .200E+02 1

.250E+03

16 16 16 31 31 31

0.	0.	.166667E+02	.146546E+02
.333333E+02	.289166E+02	.500000E+02	.423936E+02
.666667E+02	.546930E+02	.833333E+02	.654222E+02
.100000E+03	.741886E+02	.116667E+03	.806002E+02
.133333E+03	.842638E+02	.150000E+03	.847672E+02
.166667E+03	.817778E+02	.183333E+03	.748430E+02
.200000E+03	.635904E+02	.216667E+03	.476274E+02
.233333E+03	.265614E+02	.250000E+03	-.181899E-11

0.	0.	.166667E+02	0.
.333333E+02	0.	.500000E+02	0.
.666667E+02	0.	.833333E+02	0.
.100000E+03	0.	.116667E+03	0.
.133333E+03	0.	.150000E+03	0.
.166667E+03	0.	.183333E+03	0.
.200000E+03	0.	.216667E+03	0.
.233333E+03	0.	.250000E+03	0.

0.	0.	.166667E+02	.654222E-01
.333333E+02	.523378E+00	.500000E+02	.176640E+01
.666667E+02	.418702E+01	.833333E+02	.817778E+01
.100000E+03	.141312E+02	.116667E+03	.224396E+02
.133333E+03	.334962E+02	.150000E+03	.476926E+02
.166667E+03	.654222E+02	.183333E+03	.870770E+02
.200000E+03	.113050E+03	.216667E+03	.143733E+03
.233333E+03	.179519E+03	.250000E+03	.220800E+03

-.250000E+03	0.	-.233333E+03	0.
-.216667E+03	0.	-.200000E+03	0.
-.183333E+03	0.	-.166667E+03	0.
-.150000E+03	0.	-.133333E+03	0.
-.116667E+03	0.	-.100000E+03	0.
-.833333E+02	0.	-.666667E+02	0.
-.500000E+02	0.	-.333333E+02	0.
-.166667E+02	0.	.193268E-11	0.
.166667E+02	0.	.333333E+02	0.
.500000E+02	0.	.666667E+02	0.
.833333E+02	0.	.100000E+03	0.
.116667E+03	0.	.133333E+03	0.
.150000E+03	0.	.166667E+03	0.
.183333E+03	0.	.200000E+03	0.
.216667E+03	0.	.233333E+03	0.
.250000E+03	0.		

-.250000E+03	.474805E-03	-.233333E+03	.443151E-03
-.216667E+03	.411498E-03	-.200000E+03	.379844E-03
-.183333E+03	.348190E-03	-.166667E+03	.316537E-03
-.150000E+03	.284883E-03	-.133333E+03	.253229E-03
-.116667E+03	.221576E-03	-.100000E+03	.189922E-03
-.833333E+02	.158268E-03	-.666667E+02	.126615E-03
-.500000E+02	.949610E-04	-.333333E+02	.633073E-04
-.166667E+02	.316537E-04	.193268E-11	.367058E-17
.166667E+02	.316537E-04	.333333E+02	.633073E-04
.500000E+02	.949610E-04	.666667E+02	.126615E-03
.833333E+02	.158268E-03	.100000E+03	.189922E-03
.116667E+03	.221576E-03	.133333E+03	.253229E-03
.150000E+03	.284883E-03	.166667E+03	.316537E-03
.183333E+03	.348190E-03	.200000E+03	.379844E-03
.216667E+03	.411498E-03	.233333E+03	.443151E-03
.250000E+03	.474805E-03		

-.250000E+03	0.
-.216667E+03	0.
-.183333E+03	0.
-.150000E+03	0.
-.116667E+03	0.
-.833333E+02	0.
-.500000E+02	0.
-.166667E+02	0.
.166667E+02	0.
.500000E+02	0.
.833333E+02	0.
.116667E+03	0.
.150000E+03	0.
.183333E+03	0.
.216667E+03	0.
.250000E+03	0.

-.233333E+03	0.
-.200000E+03	0.
-.166667E+03	0.
-.133333E+03	0.
-.100000E+03	0.
-.666667E+02	0.
-.333333E+02	0.
.193268E-11	0.
.333333E+02	0.
.666667E+02	0.
.100000E+03	0.
.133333E+03	0.
.166667E+03	0.
.200000E+03	0.
.233333E+03	0.

1	0	1	0	2	2
---	---	---	---	---	---

.250000E+03	0.
.250000E+03	0.
.250000E+03	0.
.250000E+03	.118701E+00

-.250000E+03	0.
-.250000E+03	.118701E+00

TAPE 55 enthält die Spektralfunktionen für die Phononen-Streuung, und wurde von PROGRAM CMSFILE erzeugt

Inputfile für das PROGRAM COTRACO

```
.14603476,.18842853E-5,3,6,6,6,6,6,6,250.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
20.,20.,1,6,11,6,
TEMPERATURVERHALTEN DER TRANSPORTKOEFF.-PHONONEN STREUUNG
0.
0.
1.
```

Outputlisting vom PROGRAM COTRACO (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

```
*****
* PROGRAM COTRACO : BERECHNUNG DER TRANSPORTKOEFFIZIENTEN *
*
* AUSGEFUEHRT AM : 64/02/18.AUSGEFUEHRT UM : 09.47.32.
*
* BEMERKUNG ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF :
* TEMPERATURVERHALTEN DER TRANSPORTKOEFF.-PHONONEN STREUUNG
*
*****

***** INPUT W E R T E : *****

*****STAERKEN DER STREUPOTENTIALE*****

STAERKE DER 1-ten WECHSELWIRKUNG = 0.
STAERKE DER 2-ten WECHSELWIRKUNG = 0.
STAERKE DER 3-ten WECHSELWIRKUNG = .10000000E+01

*****KONSTANTEN ABHAENGIG VON DER BANDSTRUKTUR*****

MASS*(<V**2>*N)/DENSITY = .14603476E+00
D(MASS*(<V**2>*N)/DENSITY)/DE = .18842853E-05

*****INPUT FUEH DEN TEMPERATURBEREICH*****

ANFANGSTEMPERATUR = .200E+02
TEMPERATURDIFFERENZ PRO SCHRITT = .200E+02
ZAHL DER TEMPERATURSCHRITTE = 1

*****DIMENSION DES FUNKTIONENRAUMES = 6*****

*****TABELLEN-KENNZAHLEN = 6*****

*****OUTPUT STEUERUNG: IPRINT= 11*****

*****INPUT FUEH DIE POLYNOMENTWICKLUNG*****

GRAD DES POLYNOMS FUEH G0-- = 6
GRAD DES POLYNOMS FUEH G0+- = 6
GRAD DES POLYNOMS FUEH G0++ = 6
GRAD DES POLYNOMS FUEH G1-- = 6
GRAD DES POLYNOMS FUEH G1+- = 6
GRAD DES POLYNOMS FUEH G1++ = 6
ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG [KELVIN] = .25000000E+03

STUETZSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION
G0--,...,G1++ :
0. , 0. , 0. ,
0. , 0. , 0. ,

*****MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN*****

POTENTIALSTREUUNG
ABSOLUTE STAERKE: RHOO=15. [MIKROOHM*CM]
FERMIENERGIE=1.E5 [K]
MAGNETISCHE STREUUNG
ABSOLUTE STAERKE : RHU(T=TC)=60. [MIKROOHM*CM]
TC=150,J=7/2,FERMIENERGIE=1.E5 [K],VDELEZ= 4931A**3],MBA
PHONONEN STREUUNG
ABSOLUTE STAERKE: RHD(T=DEBEY)=50. [MIKROOHM*CM]
VSLUND=1.,CFERMI=125,DEBEY=250,FERMIENERGIE=1.E5 [K]
```


ELECTRICAL RESISTIVITY [MIKROHM*CM]:

.15302556E+00	.15302553E+00	.12883087E+00	.12883087E+00
.12750716E+00	.12750716E+00	.12727911E+00	

THERMPOWER [MIKROVOLT/KELVIN] :

-.73157529E-01	-.52943195E-01	-.51901053E-01	-.46939452E-01
-.49549064E-01	-.48309702E-01	-.48795145E-01	

HEAT CONDUCTIVITY [MILLIWATT/(CM*K)] :

.69949390E-03	.29238114E+03	.29238120E+03	.37618808E+03
.37618810E+03	.40540005E+03	.40540008E+03	

*****PROGRAM COTRACO*****

AUSGEFUEHRT AM: 84/02/18. AUSGEFUEHRT UM: 09.47.32.

BEMERKUNGEN ZUM AKTUELLEN PROGRAMMLAUF:

TEMPERATURVERHALTEN DER TRANSPORTKOEFF.-PHONONEN STREUUNG

STAERKEN DER WECHSELWIRKUNGEN: STAERKE1,STAERKE2...

0.	,	0.	,	.10000000E+01,
----	---	----	---	----------------

KONSTANTEN ABHAENGIG VON DER BANDSTRUKTUR

MASS<V**2>*N/DENSITY = .14603476E+00

D(MASS<V**2>*N/DENSITY)/DE = .18842853E-05

MODELLPARAMETER DER SPEKTRALFUNKTIONEN

POTENTIALSTREUUNG

ABSOLUTE STAERKE: RH00=15. [MIKROHM*CM]

FERMIENERGIE=1.E5 [K]

MAGNETISCHE STREUUNG

ABSOLUTE STAERKE : RHO(T=TC)=60. [MIKROHM*CM]

TC=150,J=7/2,FERMIENERGIE=1.E5 [K],VDLEZ= 493[A**3],MBA

PHONONEN STREUUNG

ABSOLUTE STAERKE: RHO(T=TDEBEY)=90. [MIKROHM*CM]

VSDUND=1.,QFERMI=125,WDEBEY=250,FERMIENERGIE=1.E5 [K]

INPUTPARAMETER ZUR POLYNOMENTWICKLUNG UND INTEGRATION

GRAD DER POLYNOME (G0--,...,G1++) :

6,	6,	6,	6,	6,	6,
----	----	----	----	----	----

ENDE DER POLYNOMENTWICKLUNG = .25000000E+03

STUETZSTELLENABSTAND BEI NUMERISCHER INTEGRATION

G0--,...,G1++ :

0.	,	0.	,	0.	,
----	---	----	---	----	---

0.	,	0.	,	0.	,
----	---	----	---	----	---

INPUT ZUR TEMPERATURSTEUERUNG

ANFANGSTEMPERATUR= .20000000E+02 TEMP.SCHRITTWEITE= .20000000E+02

ZAHL DER SCHRITTE= 1

GROESSE DES FUNKTIONENRAUMES: 0-6

TABELLE WIRD FUER 6-TE DIMENSION ANGELEGT

*****ERGEBNISSE IN TABELLENFORM*****

EL.RESESTIVITY	THERMPOWER	HEAT CONDUCT.	TEMP
[MIKROHM*CM]	[MIKROVOLT/K]	[MILLIWATT/(CM*K)]	[K]

.12727911E+00	-.48795145E-01	.40540008E+03	.20000000E+02
---------------	----------------	---------------	---------------