

FESTKÖRPER PROBLEME

HERAUSGEGEBEN
VON
O. MADELUNG

VII



VIEWEG



PERGAMON PRESS

FESTKÖRPER PROBLEME VII

in Referaten des Fachausschusses
»Halbleiter«
der Deutschen Physikalischen Gesellschaft
Bad Nauheim 1967
zugleich
Hauptvorträge der
europäischen Tagung des IEEE:
»Forschung auf dem Gebiet der
Halbleiter-Bauelemente«
(Invited Papers of the European Meeting
of the IEEE:
»Semiconductor Device Research«)

Herausgegeben von
O. Madelung, Marburg

Mit 166 Abbildungen



FRIEDR. VIEWEG & SOHN



PERGAMON PRESS

Oxford · London · Edinburgh · New York
Toronto · Sydney · Paris · Braunschweig

Pergamon Press Ltd., Headington Hill Hall, Oxford
4 & 5 Fitzroy Square, London W. 1
Pergamon Press (Scotland) Ltd., 2 & 3 Teviot Place, Edinburgh 1
Pergamon Press Inc., 44-01 21st Street, Long Island City, New York 11101
Pergamon of Canada, Ltd., 6 Adelaide Street East, Toronto, Ontario
Pergamon Press (Aust.) Pty. Ltd., Rushcutters Bay, Sydney, N.S.W.
Pergamon Press S. A. R. L., 24 rue des Écoles, Paris 5^e
Vieweg & Sohn GmbH, Burgplatz 1, Braunschweig

Copyright © 1967
Friedr. Vieweg & Sohn GmbH, Verlag, Braunschweig

First edition 1967

Library of Congress Catalog Card No. 64-51891

Printed in Germany

Best.-Nr. 8013

08 003679 1

Vorwort

Die diesjährige Frühjahrstagung des Fachausschusses Halbleiter der Deutschen Physikalischen Gesellschaft fand gemeinsam mit der internationalen Tagung der Europäischen Sektion des Institute of Electrical and Electronic Engineers vom 17. bis 22. 4. 1967 in Bad Nauheim statt. Während die Tagung des Fachausschusses diesmal auf die Probleme der reinen Halbleiterphysik beschränkt blieb, behandelte die internationale Tagung das Thema: Forschung auf dem Gebiet der Halbleiter-Bauelemente.

Der Europäischen Sektion des IEEE danke ich für ihre Zustimmung, die Hauptvorträge beider Tagungen in diesem Bande zu veröffentlichen. Durch diese Zusammenfassung wird die enge Verknüpfung der reinen und angewandten Festkörper-Forschung deutlich.

Das neue Druckverfahren, das seit dem VI. Band dieser Buchreihe angewandt wird, hat die Zeit bis zum Erscheinen des Tagungsbandes wesentlich verkürzt. Auch in den kommenden Jahren werden die folgenden Bände jeweils kurz nach den Frühjahrstagungen des Halbleiterausschusses erscheinen können. Dem Vieweg Verlag danke ich für sein Entgegenkommen bei allen meinen Wünschen. Die kurze Zeitspanne zwischen Tagung und Erscheinen des Bandes gestattete es nicht, den Autoren alle Korrekturen vorzulegen. So trifft die Verantwortung für alle Druckfehler allein den Herausgeber.

Marburg/Lahn, im Juni 1967

O. Madelung

Inhaltsverzeichnis

	Seite
W. Klose, Supraleitende Halbleiter	1
J. Treusch, Neuere Methoden und Ergebnisse der Bandstruktur- berechnung in Halbleitern	18
D. L. Greenaway, Recent advances in band structures investigations using optical techniques	73
H.-J. Schulz, Ultrarot-Lumineszenz von Zinksulfid-Phosphoren . . .	75
E. Spenke, Some problems in the physics of power rectifiers and thyristors	108
E. Kooi, The surface properties of thermally oxidized silicon	132
C. F. Quate, Amplification of acoustic waves at microwave frequencies	158
G. Klein/H. Koelmans, Active thin film devices	183
H. Weiß, Galvanomagnetische Bauelemente	200
R. W. Keyes, Optoelectronic devices	217
H. Kroemer, Negative conductance in semiconductors	264
Autorenverzeichnis	288

Supraleitende Halbleiter

Mit 6 Abbildungen

Zusammenfassung: Anhand einer kurzen Einführung in die Theorie der Supraleitung wird auf die Parameter hingewiesen, die die Einstellung des Suprazustands ermöglichen. Auf Halbleiter angewandt zeigt sich, daß in homöopolaren Halbleitern eine starke Interbandstreuung, bei polaren Halbleitern die Kopplung der Elektronen an die optischen Phononen für die Supraleitung wesentlich ist. Die theoretischen Vorstellungen werden mit den experimentellen Ergebnissen verglichen.

1. Einleitung

Die Einteilchennäherung der Festkörperphysik erklärt erfolgreich viele Eigenschaften von Metallen und Halbleitern. Abgesehen von den kollektiven Freiheitsgraden des Elektronengases in Metallen werden z. B. die niedrig liegenden Anregungsspektren der Festkörper und elektronische Transporteigenschaften in ihnen gut beschrieben. Zur Erklärung des Phänomens der Supraleitung dagegen reicht die Einteilchennäherung nicht aus. Im Jahre 1957 konnten die Autoren J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer [1] (BCS) nachweisen, daß man den Effekt einer Elektronenpaarung berücksichtigen muß, um den Suprazustand zu beschreiben. Die aus der BCS-Theorie ableitbare Relation für die kritische Temperatur T_c des Supraleiters

$$k_B T_c = 1,14 \hbar \omega_D e^{-\frac{1}{N(0)V}}$$

(ω_D Debye-Frequenz; $N(0)$ Elektronenzustandsdichte an der Fermikante, V mittleres Wechselwirkungsmatrixelement zweier Elektronen)

zeigt ferner, daß T_c nicht aus einer Störungsrechnung nach V erhalten werden kann. Auch in der Wahl der mathematischen Beschreibung weicht die BCS-Theorie also von der üblichen Einteilchennäherung ab.

Noch vor 15 Jahren sah man das Phänomen der Supraleitung als eine ganz spezielle Eigenschaft an und versuchte, die Regeln zu finden, nach denen Supraleiter sich vor Nichtsupraleitern auszeichneten. Die Vielzahl verschiedenartigster supraleitender Systeme (heute sind über

1000 bekannt, darunter Elemente, Legierungen, intermetallische Verbindungen) und der immer gleiche "einfache" Übergang in den Suprazustand bei T_c legten die durch die BCS-Theorie bestätigte Vermutung nahe, daß Supraleitung eine so allgemeine Erscheinung ist, daß man eher fragen muß, warum gewisse Substanzen nicht supra-leitend werden. Sieht man von magnetisch aktiven Stoffen wie den Ferromagnetika ab, dann bleibt unser heutiges Thema, das der Mög-lichkeit von Supraleitung in Halbleitern, eine der wichtigsten Frage-stellungen.

2. Supraleitung in Metallen

Wir stellen zunächst fest, daß die maximale Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand eines Normalleiters und eines Supraleiters [2]

$$\Delta F = F_n - F_s = \frac{\Omega}{8\pi} H_c(0)^2$$

(Ω Volumen des Metalls, $H_c(0)$ das bei $T = 0$ K die Supra-leitung aufhebende kritische Magnetfeld)

umgerechnet auf ein Atom sehr klein ist

$$\Delta F \approx 10^{-8} \text{ eV/Atom}$$

im Vergleich zu anderen Energien, wie der Bindungsenergie pro Atom oder der Coulombwechselwirkungsenergie von ca. 1 eV. Es ist daher aussichtslos, die Berechnung des Normalzustands im Sinn einer Stö-rungsrechnung "etwas" zu verbessern, um die Supraeigenschaften zu erhalten. Man sucht nach einem Mechanismus, der bei tiefen Tempera-turen wirksam werdend zusätzlich zu den Normalleitereffekten auftritt und zur Supraleitung führt.

Man geht daher in der BCS-Theorie von der üblichen Einteilchenappro-ximation aus und beschreibt die Elektronen durch die bekannten Bloch-wellen von denen angenommen wird, daß sie für den Normalzustand ausgerechnet sind. Zusätzlich wird dann eine Elektron-Elektron-Wechselwirkung betrachtet und untersucht, ob diese zur Supraleitung führen kann.

$$H = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \epsilon(\mathbf{p}) \hat{n}_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \sigma \\ \sigma, \sigma'}} (\mathbf{p} + \sigma, \mathbf{p}' - \sigma | V | \mathbf{p}, \mathbf{p}') C_{\mathbf{p} + \sigma}^+ C_{\mathbf{p}' - \sigma}^+ \cdot C_{\mathbf{p}'\sigma'} C_{\mathbf{p}\sigma}$$

($C_{\mathbf{p}\sigma}^+$, $C_{\mathbf{p}\sigma}$ Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für ein Blochteilchen (\mathbf{p}, σ) ; $\hat{n}_{\mathbf{p}\sigma} = C_{\mathbf{p}\sigma}^+ C_{\mathbf{p}\sigma}$ Teilchenzahloperator; $\epsilon(\mathbf{p})$ Blochenergie.)

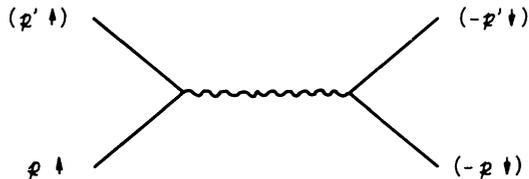
Die BCS-Theorie zeigt, daß es ausreicht, eine Wechselwirkung zwi-schen je zwei Elektronen $(\mathbf{p}\uparrow)$, $(-\mathbf{p}\downarrow)$ anzunehmen:

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \epsilon(\mathbf{p}) \hat{n}_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}' \\ (\mathbf{p}', -\mathbf{p}' | V | \mathbf{p}, -\mathbf{p}) \equiv V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}}} (\mathbf{p}' - \mathbf{p} | V | \mathbf{p}, -\mathbf{p}) C_{\mathbf{p}'\uparrow}^+ C_{-\mathbf{p}'\downarrow}^+ C_{-\mathbf{p}\downarrow} C_{\mathbf{p}\uparrow}$$

wenn die Wechselwirkung V so beschaffen ist, daß sie zu einer Energieabsenkung gegenüber E_{on} führt.

Die zu einer Energieabsenkung gegenüber dem Normalzustand führende anziehende Wechselwirkung wird durch Austausch virtueller Phononen vermittelt (vgl. Abb. 1) und beschreibt eine Polarisationswirkung des Gitters auf die Elektronen.

Abb. 1
Impulsiagramm der Streuung zweier Elektronen ($\mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow$) durch ein virtuelles Phonon. Bei diesem Stoßprozeß ist $\mathbf{p} + (-\mathbf{p}) = (\mathbf{p}') + (-\mathbf{p}') = 0$.



Diese Wechselwirkung war von Fröhlich 1950 [3] angegeben worden und führte zur Interpretation des Isotopeneffekts

$$T_c \cdot \sqrt{M} = \text{const.}$$

Wir wollen zur Vorbereitung auf die Theorie supraleitender Halbleiter das Wechselwirkungsmatrixelement V explizit angeben. Zwei Anteile werden explizit berücksichtigt:

a) Coulomb-Wechselwirkung

$$V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\text{C}} = \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}.$$

b) Elektron-Phonon-Elektron-Wechselwirkung

$$V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\text{Ph}} = - \frac{2\hbar\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} |M_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}|^2}{(\hbar\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'})^2 - (\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}'})^2},$$

wobei $\omega_{\mathbf{q}}$ eine Phononfrequenz und $M_{\mathbf{q}}$ das Elektron-Phonon-Streumatrixelement ist. Wir sehen, daß diese Phononwechselwirkung ein Prozeß 2. Ordnung ist.

Für den Grundzustand des Normalleiters ist die Elektronenverteilung durch die Fermifunktion

$$f = \left\{ \exp \frac{\epsilon_{\mathbf{p}} - E_F}{k_B T} + 1 \right\}^{-1}$$

gegeben und auch der BCS-Hamiltonoperator führt zur Grundzustandsenergie der Normalleiter.

Es ist: $\langle H_{\text{BCS}} \rangle_n = E_{\text{on}}$.

Berücksichtigt man jedoch die über der Fermienergie liegenden Zustände, nimmt also auch diese als besetzt an (vgl. Abb. 2), dann ist zwar der "kinetische" Energieanteil $\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \varepsilon(\vec{p}) \hat{n}_{\vec{p}, \sigma} \rangle$ größer als im Normalzustand, die anziehende Wechselwirkung läßt den "potentiellen" Paarenergieanteil diesen Zuwachs überkompensieren, so daß

$$\langle H_{\text{BCS}} \rangle_s < E_{\text{on}}.$$

Die Verteilung der Elektronen im Supraleiter wird so bestimmt, daß E_{OS} minimal wird. Wir erkennen daraus, daß es für das BCS-Modell wichtig ist, viele tiefliegende angeregte Einteilchenzustände zu haben, die den Elektronen als Streuzustände zur Verfügung stehen, damit die Energieabsenkung durch die Paarwechselwirkung möglichst groß werden kann.

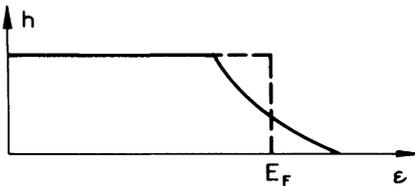
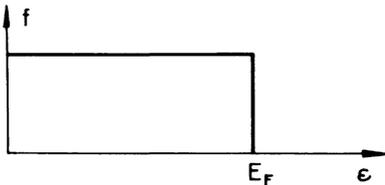


Abb. 2

a) Elektronenverteilung im Grundzustand eines Normalleiters

b) Elektronenverteilung im Grundzustand eines Supraleiters

Die BCS-Theorie der Supraleitung liefert weiterhin, daß der Grundzustand des Supraleiters trotz der relativ geringen Energieabsenkung stabil ist, da starke Korrelationen zwischen den Paaren bestehen. Die große Anzahl der Paare führt zur Stabilität der Supraphase.

Zum Abschluß dieser kurzen Übersicht über die BCS-Theorie müssen wir auf die angeregten Zustände eines Supraleiters zu sprechen kommen. Angeregte Zustände des Supraleiters sind Einteilchenzustände, deren Energiedispersion von der eines Normalleiters wesentlich abweicht. An die Stelle der Blochenergien treten beim Supraleiter:

$$E(\vec{p}) = \sqrt{\varepsilon^2(\vec{p}) + \Delta^2(\vec{p})}.$$

$\Delta(\vec{p})$ ist die sogenannte Energielücke. Sie gibt die minimale Anregungsenergie (anschaulich: ein Paar muß aufgebrochen werden, wozu die durch die anziehende Wechselwirkung bewirkte Bindungsenergie aufzuwenden ist) und ist ein Zeichen für die Kohärenz des Grundzustands.

Anders als in der Einteilchenapproximation der Normalmetalle oder Halbleiter hängt die Energielücke $\Delta(\varphi)$ von dem Anregungszustand des Supraleiters ab. Sie ergibt sich aus einer Integralgleichung:

$$\Delta(\varphi) = -\frac{1}{2} \sum_{\varphi'} V_{\varphi\varphi'} \frac{\Delta(\varphi')}{E(\varphi')} \tanh\left(\frac{E_{\varphi'}}{2k_B T}\right).$$

Da andererseits auch die Energieabsenkung des Grundzustands über die Besetzung der Einteilchenzustände durch $\Delta(\varphi)$ ausdrückbar ist:

$$h(\varphi) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\varphi} - E_F}{E(\varphi)} \right]$$

und die kritische Temperatur T_c mit $\Delta(\varphi)$ zusammenhängt, kommt der Berechnung der Größe $\Delta(\varphi)$ eine fundamentale Bedeutung zu.

Im einfachsten Fall der BCS-Theorie setzt man

$$a) V_{\varphi\varphi'} = \begin{cases} -V & \text{für } \varepsilon_{\varphi}, \varepsilon_{\varphi'} \text{ im Intervall } (E_F \pm \hbar\omega_D) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

b) $\hbar\omega_{\varphi-\varphi'} = \hbar\omega = \text{const}$ mittlere Phononenenergie
und erhält (vgl. Abb. 3):

$$\Delta(T=0) = 2\hbar\omega e^{-\frac{1}{N(0) \cdot V}}$$

$$\Delta(\varphi) = \Delta = \text{const}_{\varphi}$$

$$\Delta F = \frac{9}{2} N(0) \Delta(T=0)^2.$$

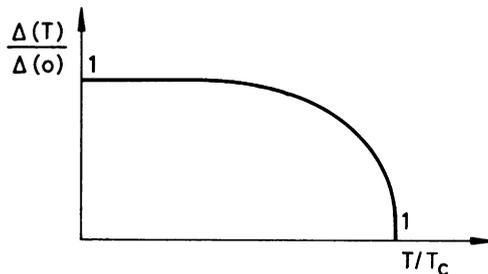


Abb. 3
Temperaturabhängigkeit der BCS-Energie-
lücke $\Delta(T)$

3. Möglichkeiten des Suprazustands in Halbleitern

Eigenhalbleiter weisen die zwei Eigenschaften nicht auf, die wir für den BCS-Supraleiter als wesentlich erkannten. Bei $T = 0^{\circ}\text{K}$ füllen die Elektronen gerade das Valenzband voll auf. Die Zustandsdichten an der Valenzbandkante und für die ersten angeregten Einteilchen-

zustände an der Leitungskante sind klein, so daß weder viele Paare gebildet werden können, die die Stabilität des Suprazustands garantieren, noch genügend viel tiefliegende Streuzustände zur Verfügung stehen, um die Energie hinreichend abzusenken.

Sieht man von Halbleitern mit einer sehr kleinen Energielücke ab [4] ($\Delta E = E_L - E_V \ll \hbar \omega_D$), kann man nur in entarteten Halbleitern die Möglichkeit der Supraleitung erwarten. Bei Elektronendichten von $n > 10^{20} \cdot \text{cm}^{-3}$ ist die Zustandsdichte im L-Band hinreichend groß, um Supraeffekte zuzulassen.

Wegen ihrer im Vergleich zu Metallen ganz anderen Elektronenstruktur und dielektrischen Eigenschaften sind die Halbleiter interessante Systeme für die Supraleitung. Die Möglichkeit, zwischen Intra- und Interbandübergängen unterscheiden zu können und dabei die dielektrischen Eigenschaften auch noch zu trennen, die Existenz optischer Phononen und ihre Ankopplung an die Elektronen, verschaffen den Halbleitern großes grundsätzliches Interesse. Aber auch interessante Anwendungen wären zu erwarten.

Die in einem Halbleitergleichrichter durch die Bahnwiderstände im n- und p-Teil begrenzten Stromstärken könnten durch den Effekt der Supraleitung wesentlich erhöht werden [5].

Anwendung von mechanischem Druck kann nichtäquivalente Bänder so verschieben, daß sie energetisch gleichberechtigt werden. Die dadurch vergrößerte Anzahl der Streuzustände für die Elektronen könnte zur Supraleitung führen, womit man einen Druckschalter realisiert hätte [6].

Nachteilig für Anwendungen ist bisher die im Vergleich zu Metallen kleine Sprungtemperatur gewesen. Da $N(o)|_{\text{Halbleiter}} < N(o)|_{\text{Metall}}$ ist

$$k_B T_c^{\text{Halbl.}} = \hbar \omega_e \frac{1}{N(o)_{\text{Halbl.}} V} < k_B T_c^{\text{Metall}}$$

Einige bekannte halbleitende Systeme sind in Tabelle 1 angeführt.

Tabelle 1

Substanz	T_c (°K)	$n(\text{cm}^{-3})$
$\text{Ge}_{0,94}\text{Te}$	0.04 - 0.28	$> 8,5 \cdot 10^{20}$
$\text{Sn}_{0,97}\text{Te}$	0.07 - 0.21	$1,05 \cdot 10^{21} - 2 \cdot 10^{21}$
SrTiO_3	0,28	$3,3 \cdot 10^{19}$
PbS	5	
PbTe	5,3	

4. Supraleitendes n-Germanium

Wir setzen für die folgenden Betrachtungen voraus, daß trotz eventueller hoher Dotierung am Elektronenbanderschema nichts geändert wird und daß die Teilbänder des Leitungsbandes äquivalent aufgefüllt werden. Die Elektronen sollen alle in den Teilbändern bei L liegen.

Wir wollen gleich zu Beginn zwei Voraussetzungen erwähnen, die für die Formulierung der Theorie wichtig sind.

- a) Auch die durch Dotierung weiter von der Bandkarte entfernt liegenden Elektronen sollen die Symmetrie der Bandkante haben.
- b) Ohne nähere Begründung wollen wir hier die Streuung der Elektronen an den Donatoren vernachlässigen. Bei $n \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ist die Interbandrelaxationszeit

$$\tau \approx 2 \cdot 10^{-13} \text{ s}$$

die Elektronen sind energetisch also nur mit

$$\delta \varepsilon = \frac{\hbar}{\tau} \approx 3 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$$

festlegbar, wohingegen die Supraleitungsenergielücken der Halbleiter bei $\Delta \sim 10^{-4} \text{ eV}$ liegen.

Es gibt eine Verallgemeinerung der BCS-Theorie auf derartige "schmutzige Supraleiter", die jedoch im Fall äquivalenter Subbänder, wie sie bei Ge angenommen sind, auf die BCS-Formulierung zurückführt [6].

Ausgangspunkt der Betrachtungen ist daher die Energielückengleichung

$$\Delta(\mathbf{p}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{\Delta(\mathbf{p}')}{E(\mathbf{p}')} \tanh \frac{E(\mathbf{p}')}{2k_{\text{B}}T},$$

die den Bedürfnissen des Halbleiters angepaßt wird:

1. Man setzt $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + \vec{\kappa}$ wobei \mathbf{p}_0 die Bandkante ist.
2. Man ersetzt $\sum_{\mathbf{p}'} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \kappa'^2 d\kappa' \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi'$ und nimmt $\vec{\kappa}$ als Polarachse der Integration.
3. Man approximiert die Bandkanten parabolisch:

$$\varepsilon(\vec{\kappa}) = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*}.$$

4. Man zerlegt die Summe über \mathbf{p}' in zwei Teilsummen, wovon die eine über die Bandkante \mathbf{k}_0 und die andere über die Bandkante $\neq \mathbf{p}_0$ erstreckt wird.

Die Lückengleichung nimmt folgende Gestalt an:

$$D(\kappa) = - \int \frac{D(\kappa')}{E(\kappa')} K(c, \delta) \tanh \left(\frac{E(\kappa')}{2k_{\text{B}}T} \right) d\varepsilon(\kappa'),$$

wobei:

$$D(\kappa) = \frac{\kappa}{\kappa_F} \Delta(\kappa)$$

$$c = \frac{\kappa}{\kappa_F} = \sqrt{\varepsilon(\kappa) / \varepsilon_F(\kappa)}$$

$$\delta = [\varepsilon(\kappa') - \varepsilon(\kappa)] / \varepsilon_F$$

und

$$K(c, \delta) = K^{\text{ra}}(c, \delta) + K^{\text{er}}(c, \delta)$$

"ra" Abkürzung für IntraBandübergang

"er" Abkürzung für InterBandübergang.

$$K^{\text{ra}}(c, \delta) = \frac{\Omega}{4\pi^2} \cdot \frac{\kappa_F^3}{\varepsilon_F} \cdot \frac{1}{\sqrt{\delta + c^2}} \int_{\frac{1}{2}[c - \sqrt{\delta^2 + c^2}]}^{\frac{1}{2}[c + \sqrt{\delta^2 + c^2}]} \beta V^{\text{ra}}(\beta, \delta) d\beta$$

$$K^{\text{er}}(c, \delta) = \frac{\Omega}{4\pi^2} \cdot \frac{\kappa_F^3}{\varepsilon_F} \cdot \frac{\nu - 1}{\sqrt{\delta + c^2}} \int_{\frac{1}{2}[c - \sqrt{\delta^2 + c^2}]}^{\frac{1}{2}[c + \sqrt{\delta^2 + c^2}]} \beta V^{\text{er}}(\beta, \delta, \beta_0) d\beta$$

$$\beta = \frac{|\kappa - \kappa|}{2\kappa_F}; \quad \beta_0 = \frac{|\kappa'_0 - \kappa_0|}{2\kappa_F}; \quad \nu \text{ Anzahl der Subbänder.}$$

Aufgabe der Theorie ist die Berechnung der Kerne $K(c, \delta)$, d. h. Angabe der wesentlichen Wechselwirkungsmechanismen und eine Lösung der Lückengleichung.

Wir wollen die verschiedenen Wechselwirkungen kurz anführen:

Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen

Die große Elektronendichte macht es erforderlich, neben der vom Gitter herrührenden Dielektrizitätskonstante $\hat{\varepsilon}_0$ eine dynamische DK [7] der Elektronen zu beachten:

$$\hat{\varepsilon}(\beta, \delta) = \hat{\varepsilon}_1(\beta, \delta) + i \hat{\varepsilon}_2(\beta, \delta),$$

so daß

$$V_c = \frac{4\pi e^2}{(2\kappa_F)^2 \Omega \beta^2 \hat{\varepsilon}_0 \cdot \hat{\varepsilon}(\beta, \delta)}$$

Die dynamische DK ist nur bei kleinen Impulsänderungen $\frac{|\vec{\kappa} - \vec{\kappa}|}{2\kappa_F} = \beta$

wesentlich. Für Interbandübergänge kann $\hat{\epsilon} = 1$ gesetzt werden. In der numerischen Auswertung der Lückengleichung für Ge zugrunde liegenden Theorie ist $\hat{\epsilon}$ in der RPA berechnet worden:

$$- - - = - - - + - - - O - - - + - - - O - - - O - - - + \dots = - - - + - - - O - - -$$

Also:

$$V_c = V(q) - V(q) \Pi(q, \epsilon) V_c,$$

wobei $V(q) = \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2 \hat{\epsilon}_0}$ die ungeänderte Coulomb-Wechselwirkung ist und die in RPA gegebene Polarisation

$$\Pi(q, \epsilon) = V(q)^{-1} (1 - \hat{\epsilon})$$

die dynamische DK definiert. Man findet:

$$\text{Re } \hat{\epsilon}(\beta, \delta) = 1 + \frac{\nu \cdot 3\pi e^2 n \hbar^2}{\hat{\epsilon}_0 32 m^* \epsilon_F^2 \beta^3} \cdot \begin{cases} [1 - (\beta + \frac{\delta}{4\beta})^2] \ln \left| \frac{1 + \beta + (\delta/4\beta)}{1 - \beta - (\delta/4\beta)} \right| \\ + 4\beta \\ + [1 - (\beta - \frac{\delta}{4\beta})^2] \ln \left| \frac{1 + \beta - (\delta/4\beta)}{1 - \beta + (\delta/4\beta)} \right| \end{cases}$$

$$\text{Im } \hat{\epsilon}(\beta, \delta) = \frac{\nu \cdot 3\pi e^2 n \hbar^2}{\hat{\epsilon}_0 32 m^* \epsilon_F^2 \beta^3} \left\{ 1 - \left(\beta - \frac{\delta}{4\beta} \right)^2 \right\} \text{ wenn } \begin{cases} \beta < 1 \text{ und } \delta < |4\beta^2 - 4\beta| \\ |4\beta^2 - 4\beta| < \delta < (4\beta^2 + 4\beta) \\ \delta > (4\beta^2 + 4\beta) \\ \beta > 1, \delta < |4\beta^2 - 4\beta| \end{cases}$$

(n ist die Elektronendichte an der einen Teilbandkante).

Phonon-vermittelte Wechselwirkung der Elektronen

Das in dem BCS-Ausdruck vorkommende Elektron-Phonon-Matrixelement $M_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$ wird in der Näherung des Deformationspotentials einfach. Für die verschiedenen Prozesse setzen wir:

$$|M_i(\beta, \delta)|^2 = \alpha_i \cdot \frac{2\hbar^2 \kappa_F^2}{\hat{\epsilon} M G \Omega} \cdot \begin{cases} \frac{\beta^2}{\hbar \omega_i} \xi_i & \begin{array}{l} \text{long. und transversale} \\ \text{akustische Phononen in} \\ \text{Intrabandprozessen} \end{array} \\ \frac{\beta^2}{\hbar \omega_i} \xi_i & \begin{array}{l} \text{long. und transversale} \\ \text{optische Phononen in} \\ \text{Intrabandprozessen} \end{array} \\ \frac{\beta^2}{\hbar \omega_{er}} \xi_{er} & \text{Interbandstreuung} \end{cases}$$

Dabei ist α_i die Entartung des jeweils ins Auge gefaßten Phononenzweigs, $\beta_1 = |\mathcal{R}_1|/2\alpha_F$ entspricht dem kleinsten reziproken Gittervektor, M ist die Ionenmasse, G die Gesamtzahl der Massen im Grundgebiet Ω .

Wegen der großen Elektronendichten sind die Deformationspotentialkonstanten mit der dynamischen DK reduziert worden [6].

Die numerische Auswertung [6] der Integralkerne führt unter Benutzung folgender Zahlenwerte für Ge:

$$\begin{aligned}\xi_{LA} &= 19 \text{ eV} \\ \xi_{TA} &= 0,5 \text{ eV} \\ |\mathcal{R}_1| \xi_{Opt} &= 0,5 \cdot 10^9 \text{ eV/cm} \\ \xi_{er} &= 8 \text{ eV} \\ \alpha_{er} &= 2 \text{ [8]}\end{aligned}$$

zu folgenden Aussagen:

$$\begin{aligned}|\mathbf{K}_c^{er}(c, \delta)| &\ll |\mathbf{K}_c^{ra}(c, \delta)| \\ |\mathbf{K}_{Ph}^{ra}(c, \delta)| &\ll |\mathbf{K}_{Ph}^{er}(c, \delta)|\end{aligned}$$

so daß das Zusammenspiel von Interbandphononstreuung und Intra-bandcoulombwechselwirkung die Supraleitung des Ge und jedes analogen homöopolaren Vielbandhalbleiters bestimmt (vgl. auch Abb. 4). Es ergibt sich im Fall des Ge eine Sprungtemperatur $T_c = 0,002^\circ\text{K}$. Weiter ist wesentlich, daß T_c eine Funktion der Elektronendichte n ist. Mit wachsendem n steigt T_c . Der angegebene Zahlenwert ist für $n = 10^{20}$ Elektronen $\cdot \text{cm}^{-3}$ errechnet.

Experimentell ist wegen der kleinen Sprungtemperatur an Ge noch keine Supraleitung gefunden worden. Das zur Stützung der Theorie untersuchte System $\text{Ge}_{0,937}\text{Te}$ war p-leitend und hatte ein $T_c = 0,28^\circ\text{K}$ [9]. Die n -Abhängigkeit von T_c konnte am System $\text{Sn}_{0,97}\text{Te}$ direkt nachgewiesen werden [9a]. Durch Dotierung mit Sb und As gelang es, die Konzentration der freien Ladungsträger (Löcher) stark zu senken und damit die Sprungtemperatur zu reduzieren.

5. Supraleitung in polaren Halbleitern

Experimente mit SrTiO_3 und Mischungen aus SrTiO_3 und anderen Titanaten, die durch chemische Reduktion n -dotiert waren (Ti-Überschuß, aber keine Ti, TiO-Phasen) zeigten, daß verhältnismäßig