

Bisher wurde für die Kopplung der Atome untereinander ein lineares Kraftgesetz (harmonische Näherung) angenommen.

Für die Wärmeausdehnung als auch für die Wärmeleitung aber Anharmonizitäten des Potentials relevant.

Um die berücksichtigten „höheren Terme“ findet man für Potential:

$$U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4$$

( $x$  = Auslenkung aus Gleichgewichtslage)

- $x^3$ -Term beschreibt Asymmetrie in gegenseitigen Abstöß
- $x^4$ -Term beschreibt Abschwächung der Schwärze bei großen Ausl.

Um Annahme einer Boltzmann-Verteilung findet man für die mittlere Auslenkung  $\langle x \rangle$ :

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\beta U(x)}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta U(x)}} \quad \text{mit } \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Für Auslenkungen bei denen die anharmonischen Terme klein gegen  $k_B T$  sind kann man  $e^{-\beta U(x)}$  entwickeln:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta U(x)) &= \exp(-\beta (cx^2 - gx^3 - fx^4)) \\ &\approx \exp(-\beta cx^2) \cdot (1 + \beta gx^3 + \beta fx^4) \end{aligned}$$

Mit dieser Entwicklung findet man für  $\langle x \rangle$ :

$$\langle x \rangle = \frac{3g}{4c^2} k_B T$$

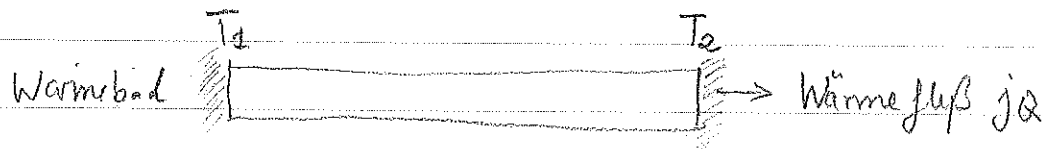
Die mittlere Auslenkung  $\langle x \rangle$ , d.h. der mittlere Atomabstand, steigt also mit  $T$  an:

Genauere Temperaturabhängigkeit des Ausdehnungskoeff. wird durch die sogenannte Grüneisen-Beziehung gegeben.

### 3.4 Wärmeleitfähigkeit dielektrischer Kristalle

Hier wird nur der phononische Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit behandelt. Der elektronische Beitrag wird in Kap. 4 diskutiert.

Wärmeleitfähigkeit / Wärmeleitzahl  $\Lambda$ :



$$j_Q = -\Lambda \frac{dT}{dx} \quad \leftarrow \text{Temp. Gradient}$$

Diese Beziehung für den Wärmefluss nimmt bereits implizit an, daß Wärmetransport ein statischer Prozess ist: Diffusion.

- Energie tritt nicht einfach an einem Ende des FK ein und wandert dann zum anderen Ende.  
In diesem Szenario würde  $j_Q$  von der Temp. diff.  $\Delta T$  und nicht vom Temp. gradienten  $dT/dx$  abhängen.
- Stattdessen wird der Wärmetransport durch diffundierende Phononen mit einer mittleren freien Weglänge  $l$  zwischen zwei Stößen bewirkt.

In der kinetischen Gastheorie (s.u.) findet man für die <sup>Wärme</sup> Leitfähigkeit eines idealen Gases:

$$\Lambda = \frac{1}{3} C v l$$

$$\left( \begin{array}{l} C = \text{Wärmekapazität pro Volumeneinheit} \\ v = \text{Schallgeschwindigkeit} \\ l = \text{frei Weglänge} \end{array} \right)$$

Debye hat als erster dieses Ergebnis zur Beschreibung der Wärmeleitfähigkeit von dielektr. FK auf die Diffusion von Phononen angewandt:

$$\begin{array}{l} C = \text{Wärmekapazität der Phononen} \\ v = \text{Phononengeschwindigkeit} \\ l = \text{mittlere Weglänge zwischen Phononstößen} \end{array}$$

Herleitung von  $\Lambda = \frac{1}{3} C v l$  in kinetischer Gastheorie

Talchenfluß in x-Richtung:  $\frac{1}{2} n \langle |v_x| \rangle$

Bewegt sich ein Talchen mit spezifischer Wärme  $C$  von einem Bereich mit Temp.  $T + \Delta T$  in einen Bereich mit Temp.  $T$  so transportiert es die Energie  $C \Delta T$  und gibt diese ab. Die Temp. differenz zwischen den beiden Endpunkten der freien Weglänge  $l$  des Talchens beträgt:

$$\Delta T = \frac{dT}{dx} \cdot l = \frac{dT}{dx} v_x \cdot \tau \quad (\tau = \text{Zeit zw. Stößen})$$

Energiefluß aus beiden Richtungen  $\begin{array}{c} \xrightarrow{C \Delta T} \\ \xleftarrow{C \Delta T} \end{array}$ :

$$j_Q = -n \langle v_x^2 \rangle \epsilon \cdot \tau \frac{dT}{dx} = \frac{1}{3} C v l \frac{dT}{dx}$$

$$v_x = \frac{1}{3} v, \quad C = n \epsilon \\ \tau l = l$$

Weglänge

Eine Wärmeleitung durch Diffusion ist nur möglich wenn Stöße der Phononen mit einem Energiübertrag verbunden ist: diffundierende Phononen mit einer „hohen Temp.“ geben ihre Energie beim Stoß teilweise an andere Phononen oder an den Kristall ab, so daß sie im thermischen Gleichgewicht mit ihrer Umgebung sind (Thermalisierung)

In Kristall existieren zwei unterschiedliche Stoßprozesse, mit freien Weglängen  $l_1$  und  $l_2$ , die die freie Weglänge des Phonons bestimmen  $l^{-1} = l_1^{-1} + l_2^{-1}$  (\*) und die zum Energiübertrag und zum Wärmewiderstand führen.

- (I) Phonon-Phonon Stöße (nur möglich für anharmon. Pot.)
- (II) Stöße an Gitterfehlern und an Kristallgrenzen

### a) 3-Phononprozesse

Anharmonische Terme (Terme 3. Ordnung) erlauben daß 2 Phononen mit einander stoßen und ein 3. Phonon bilden:

$$\hbar \omega_1 + \hbar \omega_2 = \hbar \omega_3 \quad \text{s. Fig 3.10}$$

$$\hbar \vec{q}_1 + \hbar \vec{q}_2 = \hbar \vec{q}_3 \quad \text{Fig 3.13}$$

Erklärung:

Die Anwesenheit eines Phonons verursacht eine periodische elastische Deformation, die die elast. Konstanten des Kristalls in Raum und Zeit verändert. Zweites Phonon spürt diese Modulation und wird an ihr gestreut. Es stellt so ein 3. Phonon mit anderer Energie dar.

(\*) Stoßfrequenz  $\omega_1$  und  $\omega_2$ :  $\omega = \omega_1 + \omega_2$ ,  $\omega \propto l^{-2}$

Außer diesen sogenannten „normal“ - (N) Prozessen kommt es aber insbesondere bei Streuung von Phononen mit  $q$  nahe der Brillouin-Zonen-grenze auch zu sogenannten „umklapp“ (U)-Prozessen:

$$\begin{aligned} \hbar_1 \omega_1 + \hbar_2 \omega_2 &= \hbar_3 \omega_3 \\ \hbar_1 \vec{q}_1 + \hbar_2 \vec{q}_2 &= \hbar_3 \vec{q}_3 + \hbar \vec{G} \end{aligned}$$

Bei N-Prozessen bleibt der Quasi-Impuls der Phononen konstant, so daß sich weder Impuls- noch Energiestrom ändern. Diese Stöße tragen deshalb nicht zum Wärmewiderstand bei (Gäbe es nur N-Prozesse wäre die Wärmeleitfähigkeit unendlich groß)

Bei U-Prozessen und Wellenvektoren  $q_1$  und  $q_2$  nahe der Zonen-grenze liegt der Wellenvektor  $q_3$  des resultierenden Phonons außerhalb der 1. BZ. Durch Addition eines reziproken Gittervektors  $\vec{G}$  entsteht ein Phonon, das eine entgegengesetzte Gruppengeschwindigkeit besitzt.

(Energieimpuls wird wiedergeliefert)!

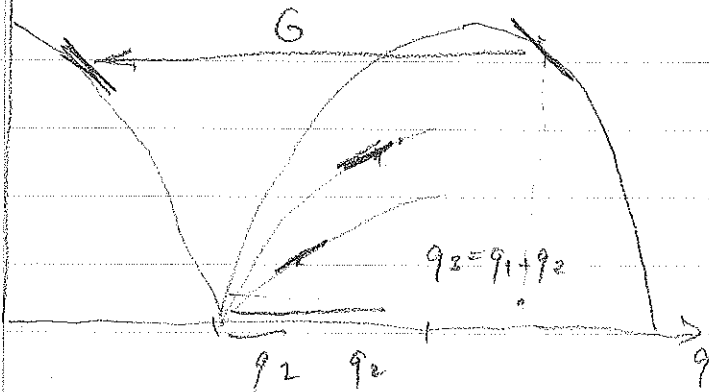


Fig.: S. 14

Bei hohen Temperaturen dominieren die Umklappprozesse. Man findet für diese Prozesse eine freie Weglänge

$$l \sim \frac{1}{n_{\text{ph}}} \Rightarrow l^{-1} \sim T \quad (\text{für } T > \Theta) \quad (*)$$

$$\text{Für } T > \Theta: \quad C_V \propto \text{const.} \Rightarrow \Lambda \sim l \sim T^{-1}$$

$$(*) \text{ für } T < \Theta: \quad l \sim e^{\Theta/2T}$$

b.) Streuung an Kristallrändern und Defekten.

Bei niedriger Temp. sterben Umklapp-Prozesse aus.  
(Phononstreuung findet vollst. im ABZ statt)

Streuung nun vor allem an Oberfläche der Probe.  
Gesamtinput des Phononen ändert sich ähnlich  
wie bei Umklapp-Prozessen.

In der Gleichung der Wärmeleitfähigkeit übernimmt nun  
der Probendurchmesser die Rolle der freien Weglänge.  
Hier dominiert die  $T^3$ -Abhängigkeit der Wärmekapazität,  
die Wärmeleitfähigkeit:

$$\Lambda \approx \frac{1}{3} C \cdot v \cdot d \sim T^3 d$$

"   
 Probendurchmesser

Den Temp.-Bereich in dem die Leitfähigkeit vom  
Probendurchmesser abhängt, bezeichnet man als  
Casimir-Bereich.

s. Fig. 3.15