thermal capacity at high / low temperatures

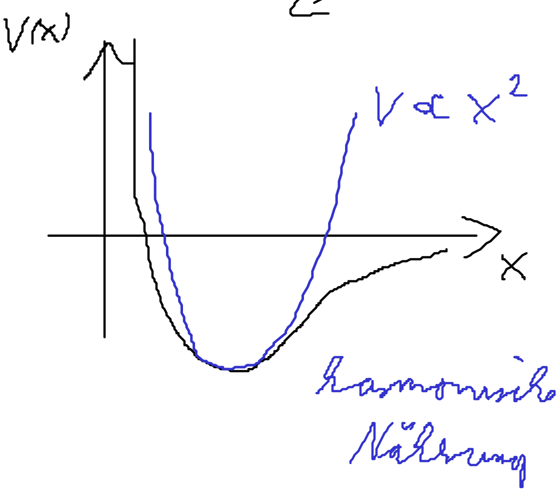
$\Leftrightarrow$ Phonon dispersation relation

Einstein Modell (ω = const)

Debye modell

anharmonische Effekte

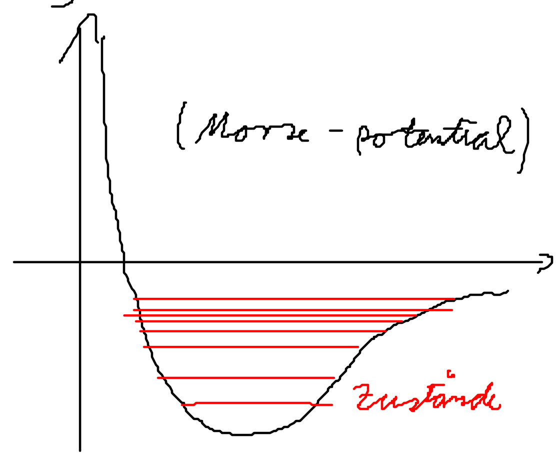
klassisch | quantenmech.



(bei harm. Osz.: ω Amplitudenunabhängig)

Berücksichtigt man höhere Terme, wird ω Amplitudenabhängig

$\Rightarrow$ "nichtlineare" Schwingung



Wechselwirkung von Phononen

$\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3$ "normaler" Stoß

$\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 + \vec{G}$ rez. Gittervektor

auch möglich

Thermische Ausdehnung (Gleichgewichts-eigenschaft)

klassisch $\rightarrow$ $V(x) = cx^2 \underbrace{- g x^3 - f x^4}_{\text{anharm. Terme}}$

Mittlere Auslenkung (Boltzmann Verteilung)

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{V(x)}{k_B T}\right) x \, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{V(x)}{k_B T}\right) dx}$$

Näherung $|g x^3 + f x^4| \ll k_B T$

$$\exp\left(\frac{g x^3}{k_B T} + \frac{f x^4}{k_B T}\right) \approx 1 + \frac{g x^3}{k_B T} + \frac{f x^4}{k_B T} + \cdots$$

$$\Longrightarrow \langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx \, \exp\left(-\frac{c x^2}{k_B T}\right)\left(x + \frac{g x^4}{k_B T} + \frac{f x^5}{k_B T}\right)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx \, \exp\left(-\frac{c x^2}{k_B T}\right)}$$

$$= \frac{\frac{3 \pi^{1/2}}{4} \frac{g}{c^{5/2}} (k_B T)^{3/2}}{\pi^{1/2} c^{-1/2} (k_B T)^{1/2}} = \frac{3g}{4c^2} k_B T \propto T$$

Thermodynamische Rechnung

Wärmeausdehnungskoeffizient α (Ausdehnung in Länge)

$$\alpha := \frac{1}{\ell} \left(\frac{\partial \ell}{\partial T}\right)_p$$

ℓ : Länge T : Temperatur

bei konst. Druck p

$$= \frac{1}{3V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

Thermodynamik $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = -\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$

Kompressionsmodul $\frac{1}{B} = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{V}{B}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha = \frac{1}{3B}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V}$$

aus Thermodynamik $p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ F : freie Energie

$$p = -\frac{\partial}{\partial V}(E_0 + E_Z) - \sum_q \frac{\partial(\hbar\omega_q)}{\partial V}\langle n_q(T)\rangle$$

E_0: Energie im Grundzustand

E_Z: Nullpunkt-Schwingungen

q: Wellenzahl und Energie = alle Zustände der Phononen

V = U oder V oder V oder U

mittlere Zahl von Phononen

$$\langle n_q(T)\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_q}{k_B T}\right) - 1}$$

$$\alpha = \frac{1}{3B}\sum_q \left[-\frac{\partial(\hbar\omega_q)}{\partial V}\right]\frac{\partial}{\partial T}\langle n_q(T)\rangle$$

in harmon. Näherung $= 0$

$c_p = c_V$

Vergleich α und $c_V = \int D(\omega)\frac{\partial}{\partial T}E(\omega,T)\,d\omega$

$$= \sum_q \frac{\hbar\omega_q}{V}\frac{\partial}{\partial T}\langle n_q(T)\rangle$$

$$\alpha = \frac{1}{3B} \sum_q \underbrace{\left[\frac{V}{\omega_q} \frac{\partial \omega_q}{\partial V} \right]}_{\gamma_q} \underbrace{\frac{1}{V} \hbar \omega_q \frac{\partial}{\partial T} \langle n_q(T) \rangle}_{C_V(q)}$$

$= 1$

spez. Wärme eines Phononenzustandes

Grüneisenzahl $\gamma_q := \frac{\partial(\ln(\omega_q))}{\partial(\ln(V))}$

Grüneisenparameter

$$\gamma := \frac{1}{c_V} \sum_q \gamma_q \, c_V(q)$$

$\Rightarrow \quad \alpha = \frac{\gamma c_V}{3B} \qquad \gamma \approx 1..2$ (bei typ. Temperaturen)

für c_V bekannt

$T \ll \Theta_D$: $\alpha \approx c_V \propto T^3$ | $T \gg \Theta_D$: $\alpha \approx c_V = \text{const}$

typisch $\alpha \approx 10^{-5} \frac{1}{K}$

Besondere Material Ceran mit $\alpha \approx 0$ über weiten Temp. Bereich

Wärmeleitfähigkeit

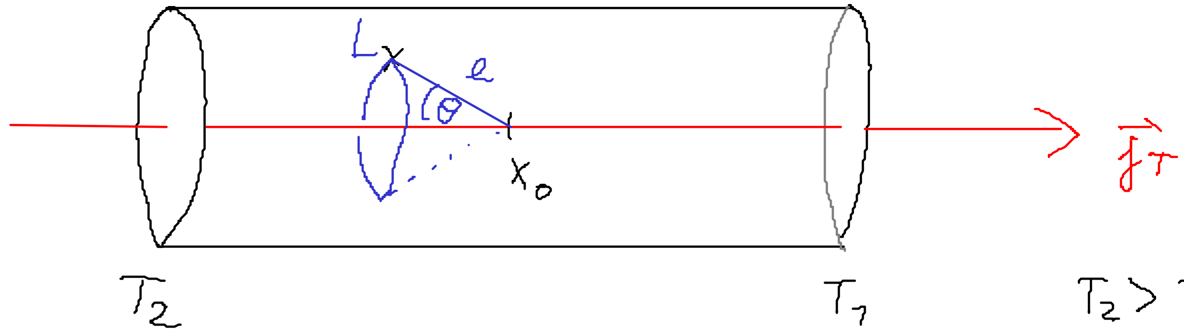
$$\mathcal{K} = \mathcal{K}^{Ph} + \mathcal{K}^{el}$$

Phononen Elektronen

in Metallen : $\mathcal{K}^{el} \gg \mathcal{K}^{Ph}$

extrem : Diamant ($\mathcal{K}_C \approx 10^5 \cdot \mathcal{K}_{Cu}$ bei Raumtemp.)

Wärmestromdichte : $j_T = -\mathcal{K} \nabla T$



$T_2 > T_1$

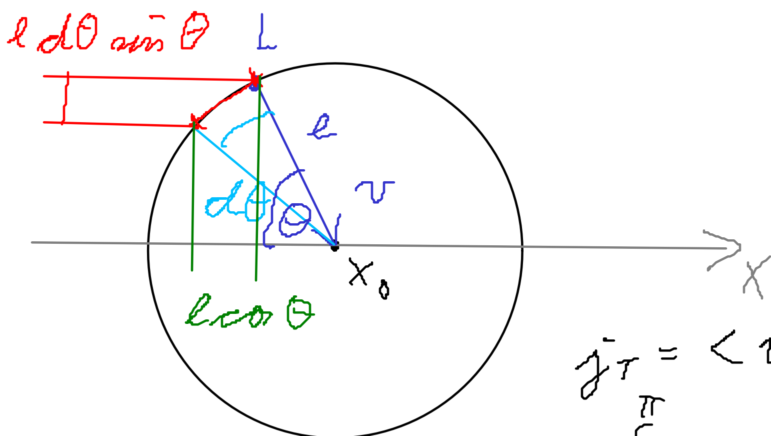
$$-\nabla T = -\frac{\partial T}{\partial x}$$

$$\ell = v\tau$$

v: Geschwind. eines Phonon

τ: mittl. Zeit zw. Stößen

akust. Phonon: $\omega = v q$



u innere Energiedichte

$$j_T = \langle v_x \cdot u(x_0 - \ell\cos\theta)\rangle_\theta$$

$$= \int_0^\pi v\cos\theta\; u(x_0 - \ell\cos\theta)\; 2\pi\, d\theta\, \frac{\sin\theta}{4\pi}$$

φ-Integration (= Ring)

$\cos\theta = t$

$$j_T = -\int_1^{-1} v\, t\, \underbrace{u(x-\ell t)}_{\text{Näherung } \approx -\frac{du}{dx}\ell t}\, \frac{1}{2}\, dt = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} v\, u(x-\ell t)\, t\, dt$$

$$= -v\ell\frac{\partial u}{\partial x}\,\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} t^2\, dt = \frac{1}{3} v\ell \underbrace{\frac{\partial u}{\partial T}}_{c_V}\left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right)$$

$$\Rightarrow j_T = \kappa\left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right)$$

$$\kappa = \frac{1}{3} v\ell\frac{\partial u}{\partial T} = \frac{1}{3} v^2 \tau c_V$$

Stoßrate τ^{-1} (Temperaturabhängig)

1) $T \gg \Theta_D \qquad \langle n_q(T) \rangle = \frac{k_B T}{\hbar \omega_q}$

Phononenzahl $\propto T$, $\tau^{-1} \propto T$

$\varkappa \approx \frac{1}{T^\gamma} \qquad (\gamma \in 1 \dots 2)$

2) $T \ll \Theta_D \qquad \langle n_q(T) \rangle$ sehr klein

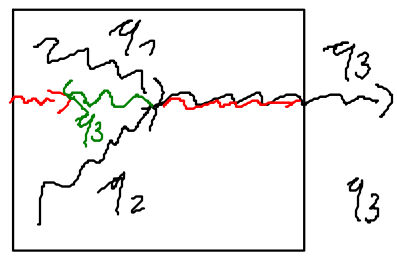
$\Rightarrow \omega_q \ll \omega_D \qquad q \ll \frac{\pi}{a}$

Normal-Prozess:

1. BZ

$\Rightarrow$ kein Energieaustausch

Umklapp-Prozess
(= engl. umklapp-process)



$q_3 = q_3$

$\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 = \vec{G} + \vec{q}_3{}'$

Impulsübertrag ans Gitter

für $\ell = L$ (mittl. Weglänge = größe des Kristalls)