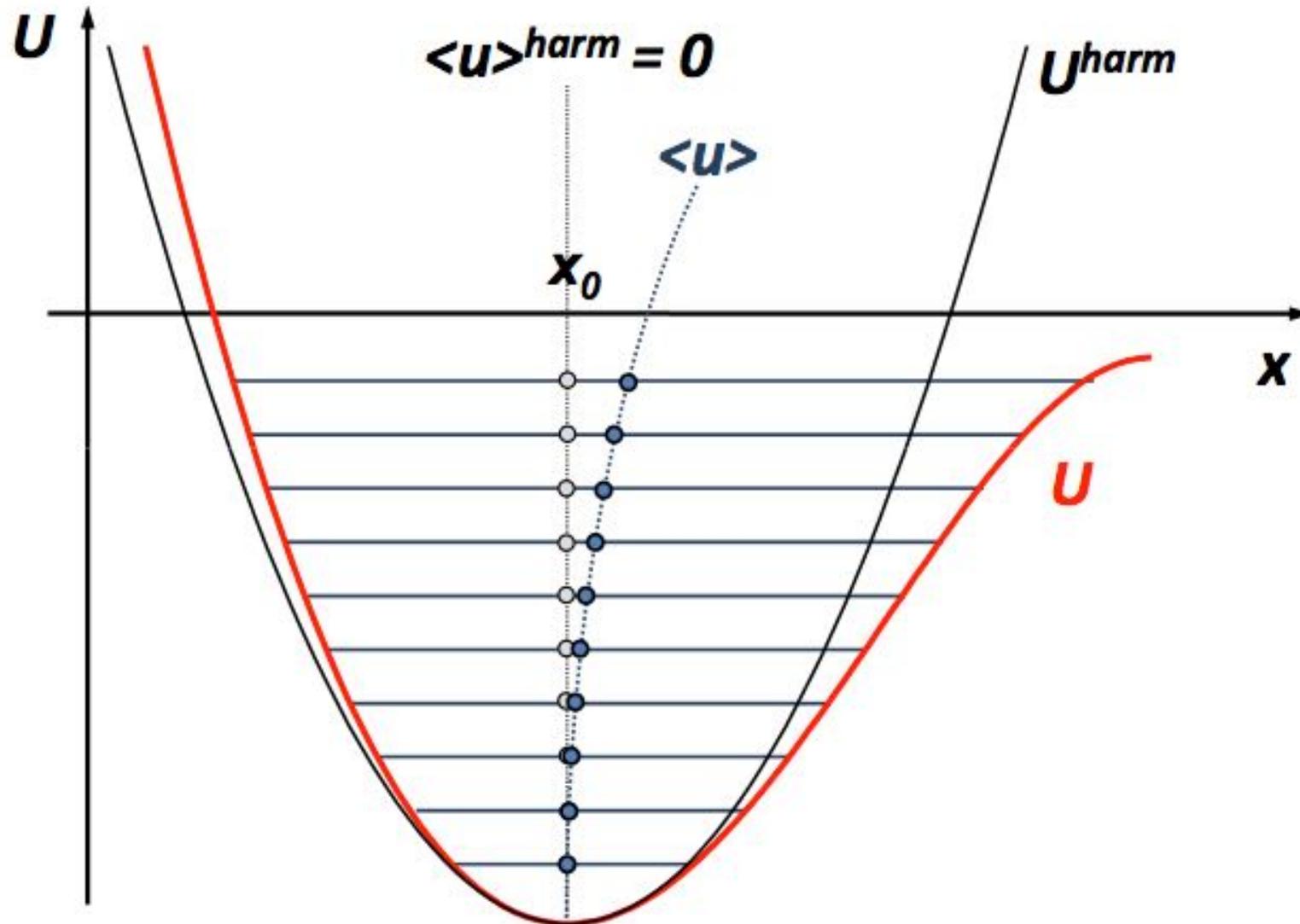
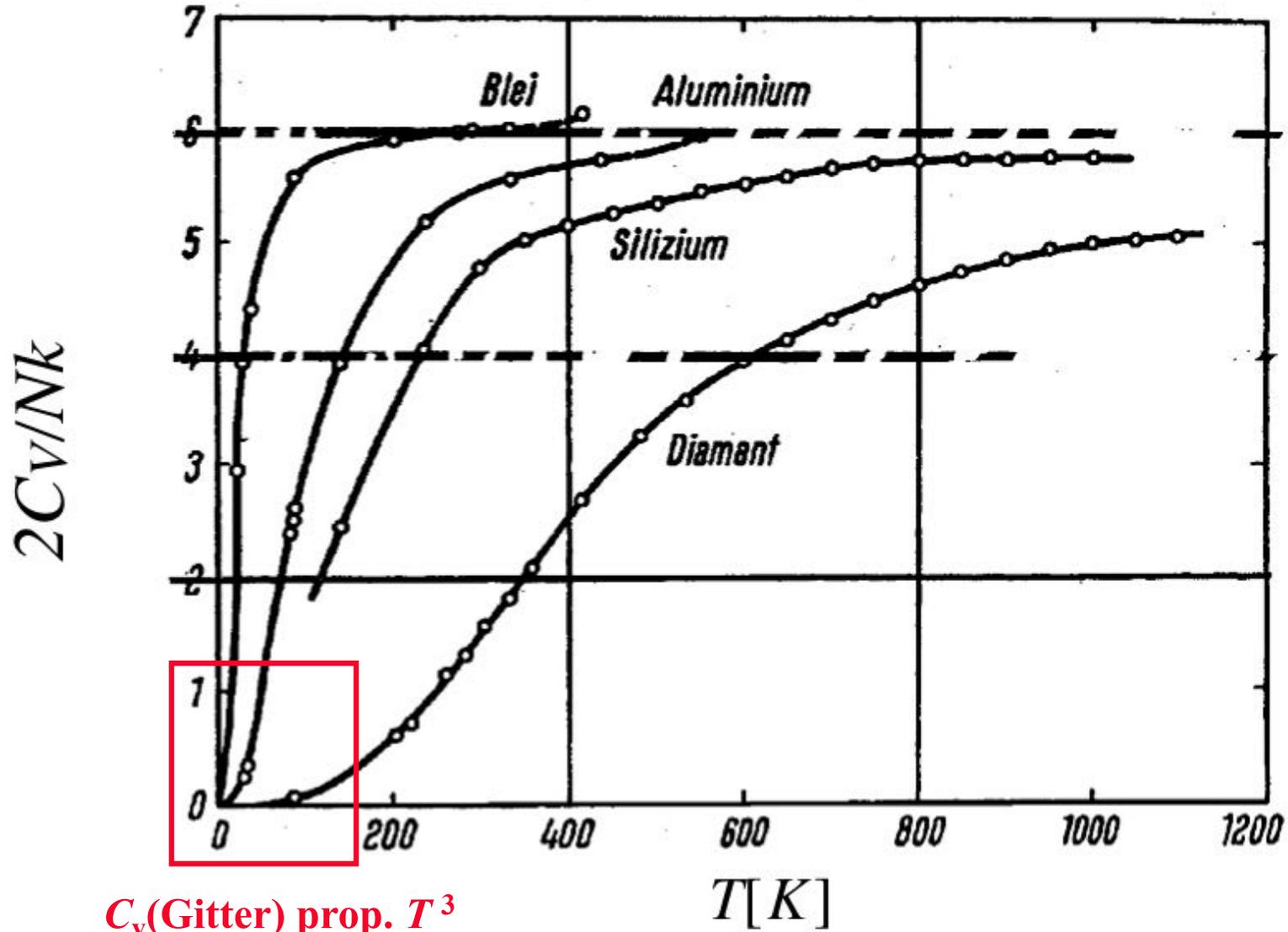


V. Thermische Eigenschaften von Isolatoren

Thermische Ausdehnung in anharmonischem Potential

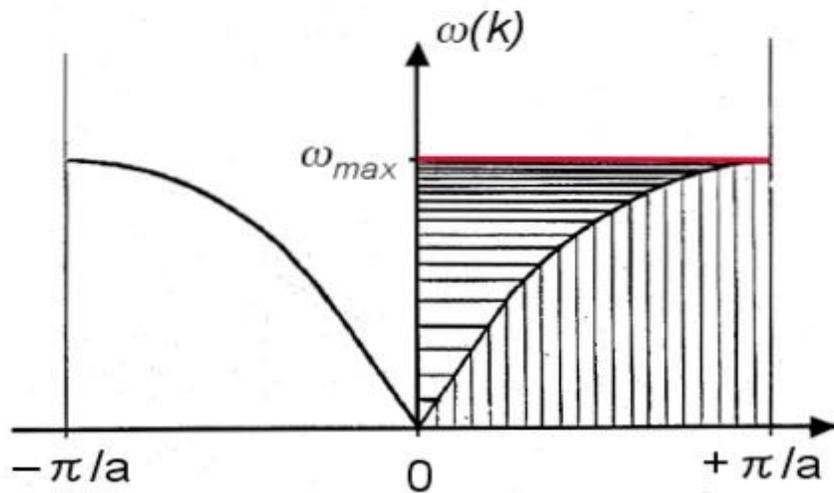


Spezifische Wärme des Kristallgitters

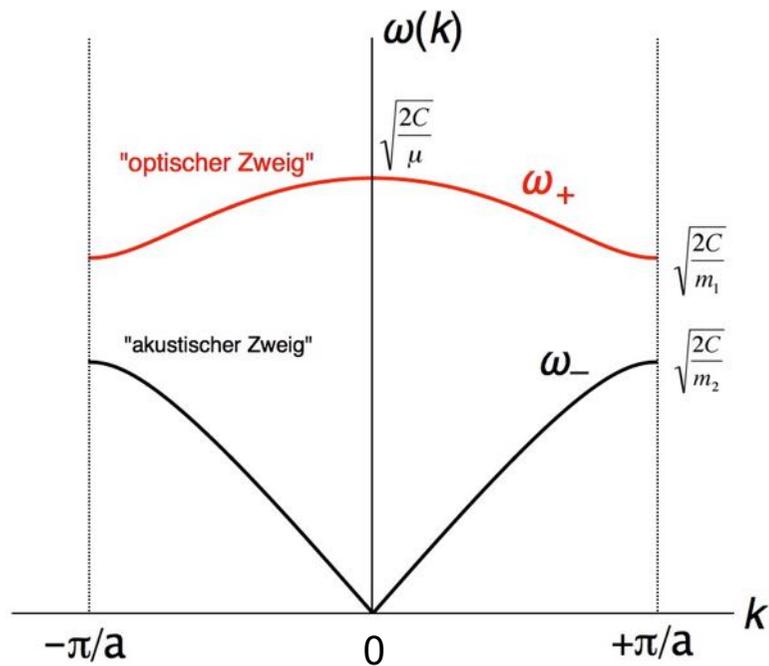
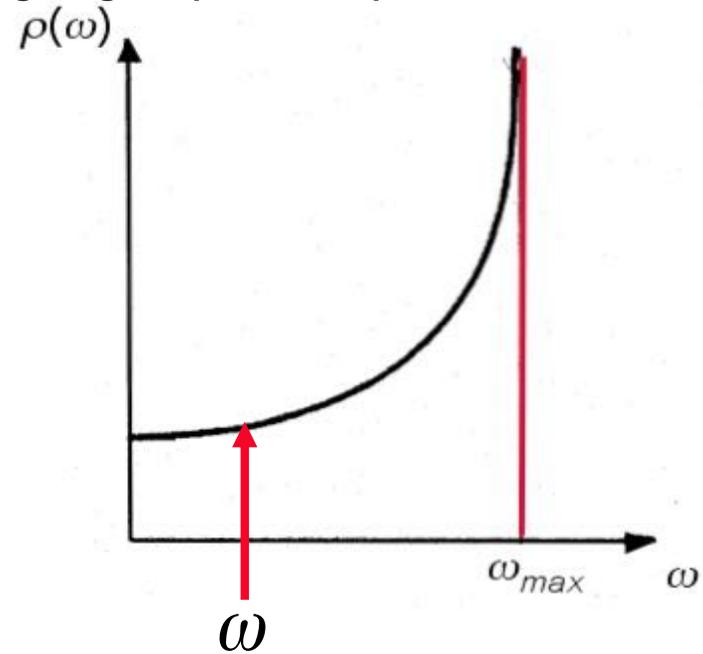


$C_v(\text{Gitter}) \propto T^3$

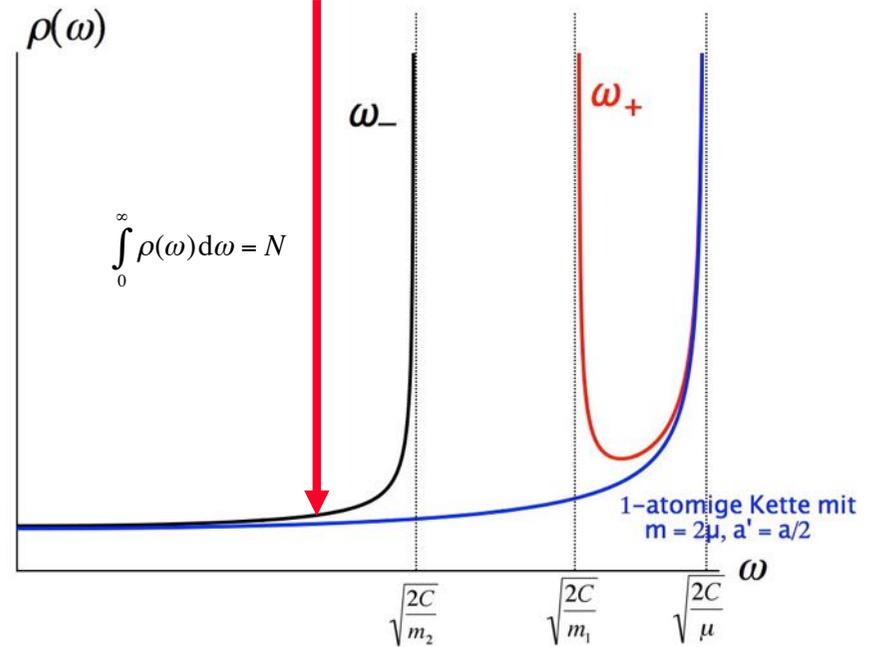
Zustandsdichte $\rho(\omega) = dZ/d\omega$: Anzahl Eigenschwingungen pro Frequenzintervall $d\omega$



lineare Federkette mit 1-atomiger Basis



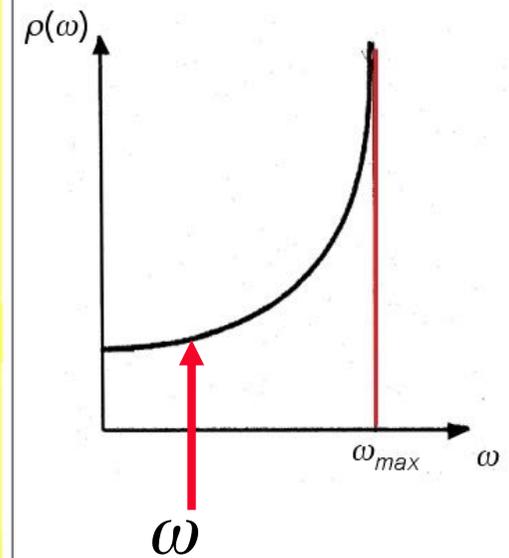
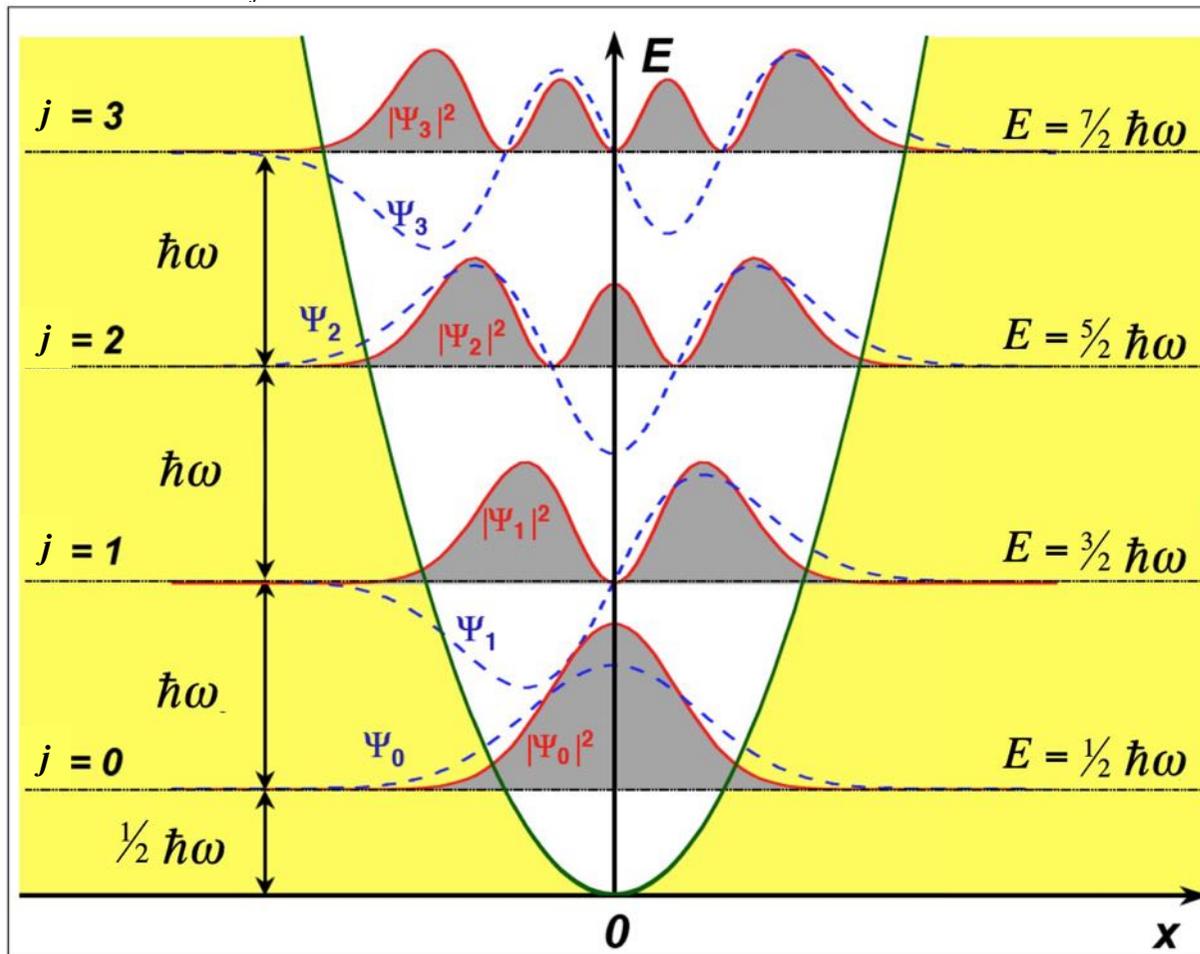
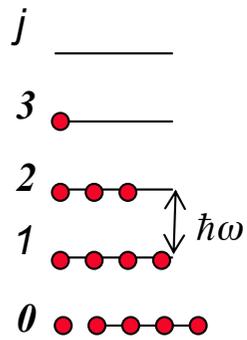
lineare Federkette mit 2-atomiger Basis



Eine Eigenschwingung mit ω kann, je nach Temperatur T , mit mehr oder weniger Phononen besetzt sein. Die Verteilung der quantisierten Energien $E_j = j\hbar\omega$ ist durch den Boltzmann-Faktor gegeben:

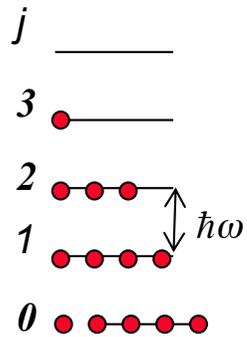
$$1 + x + x^2 + x^3 + \dots = \frac{1}{1-x}, \quad x = \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{k_B T}\right)$$

$$w(E_j) = \frac{\exp(-j\hbar\omega/k_B T)}{\sum_{j=0}^{\infty} \exp(-j\hbar\omega/k_B T)} = \exp(-j\hbar\omega/k_B T) (1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T))$$



Eine Eigenschwingung mit ω kann, je nach Temperatur T , mit mehr oder weniger Phononen besetzt sein. Die Verteilung der quantisierten Energien $E_j = j\hbar\omega$ ist durch den Boltzmann-Faktor gegeben:

$$1 + x + x^2 + x^3 + \dots = \frac{1}{1-x}, \quad x = \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{k_B T}\right)$$



$$w(E_j) = \frac{\exp(-j\hbar\omega / k_B T)}{\sum_{j=0}^{\infty} \exp(-j\hbar\omega / k_B T)} = \exp(-j\hbar\omega / k_B T) (1 - \exp(-\hbar\omega / k_B T))$$

Mittlere Energie der Eigenschwingung ω

$$\bar{E}_\omega = \sum_{j=0}^{\infty} w(E_j) E_j = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1}$$

$$1 + 2x + 3x^2 + 3x^3 + \dots = \frac{x}{(1-x)^2}$$

Besetzungszahl

$$n(\omega) = \bar{E}_\omega / \hbar\omega = \frac{1}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1}$$

Bose-Einstein Statistik

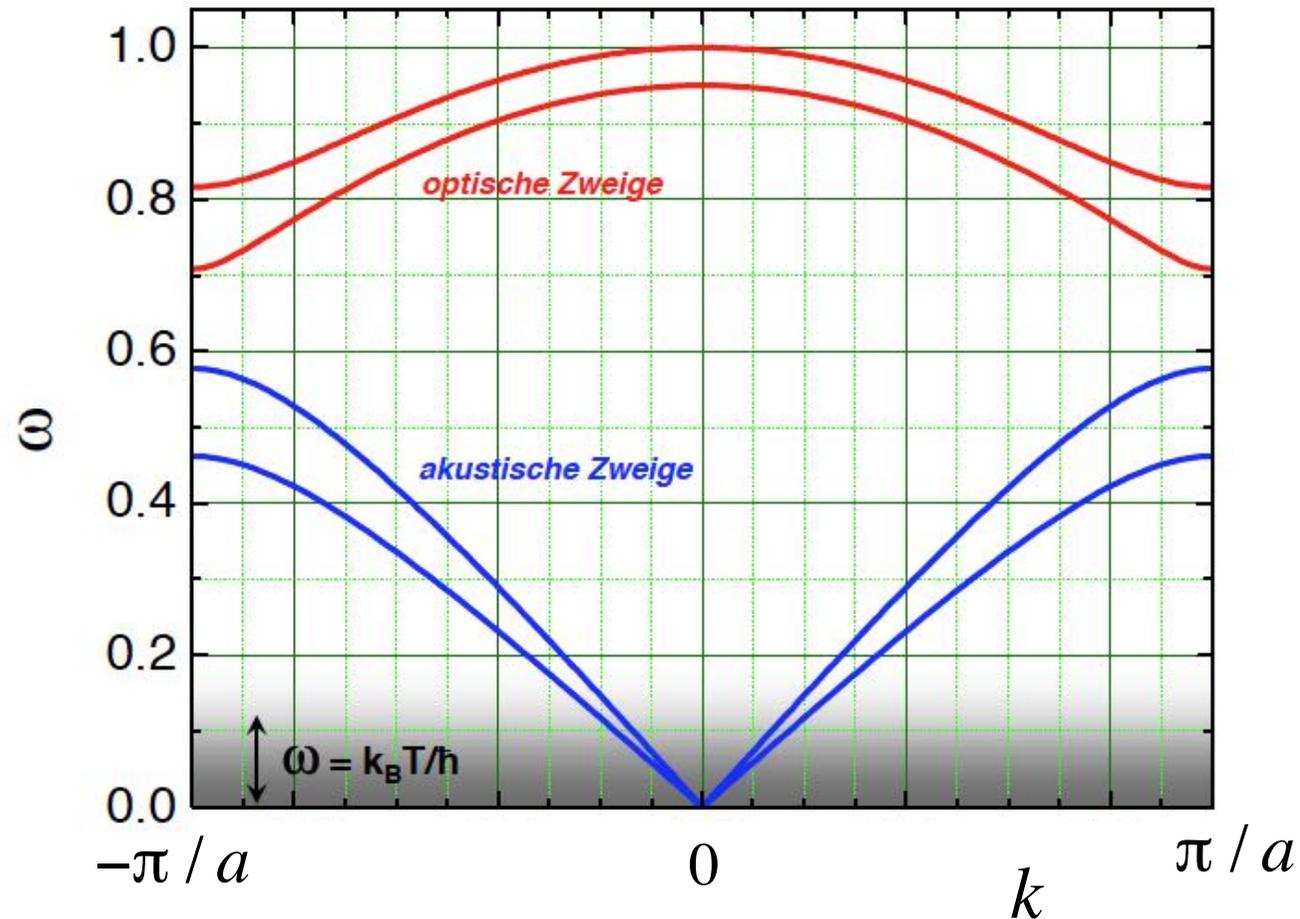
Totale innere Energie *aller* Eigenschwingungen ω

$$U(T) = \int_0^{\infty} \bar{E}_\omega \rho(\omega) d\omega$$

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T}$$

Zustandsdichte $\rho(\omega) = dZ/d\omega$:

Anzahl Eigenschwingungen pro Frequenzintervall $d\omega$



Zur Veranschaulichung der Näherungen bei der Ableitung des Tieftemperaturgrenzfalles der Wärmekapazität. Da $k_B T$ klein ist, können die optischen Moden völlig vernachlässigt und die akustischen Zweige durch lineare Dispersionsrelationen angenähert werden.

Zustandsdichte $\rho(\omega) = dZ/d\omega$:

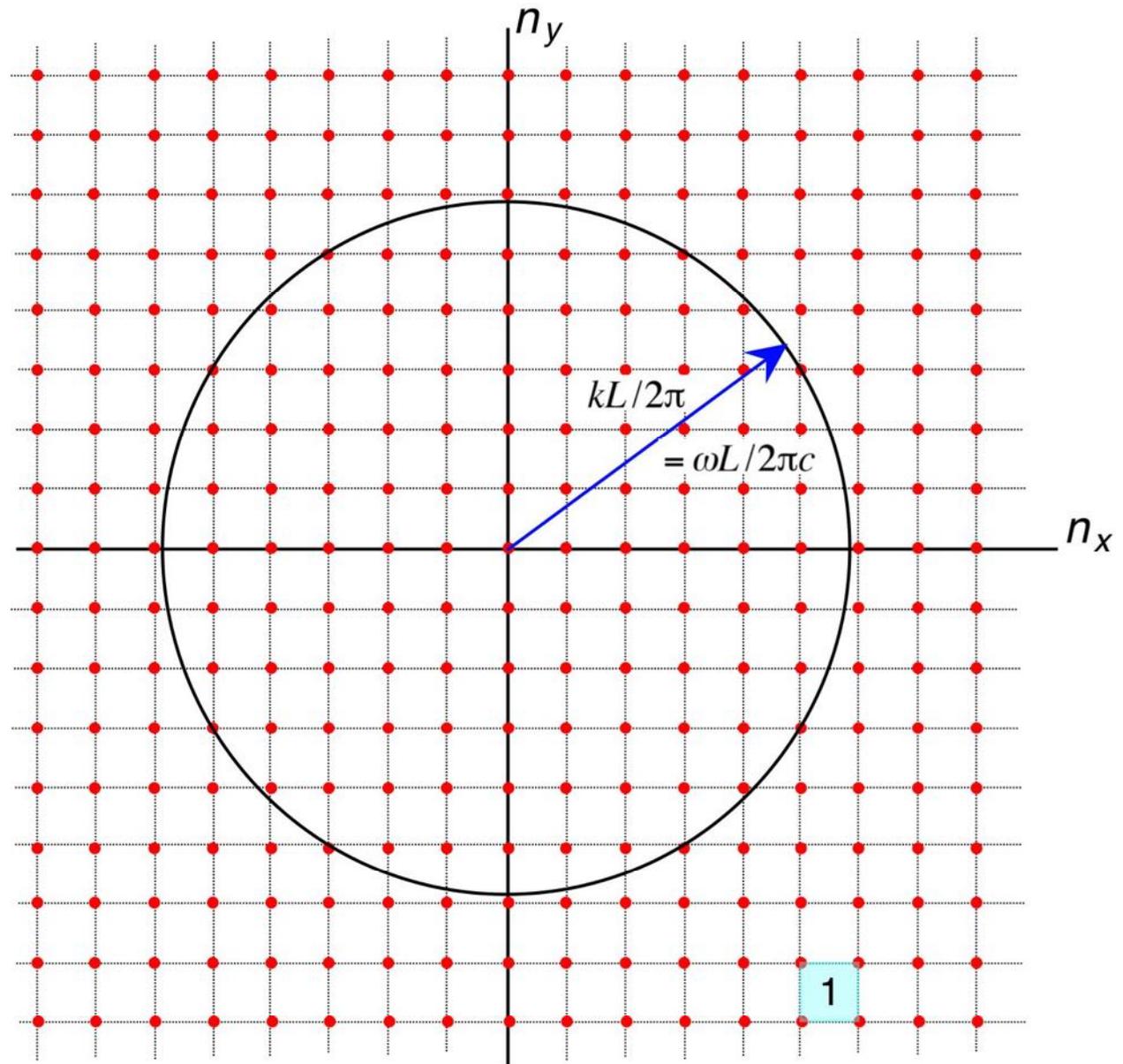
Anzahl Eigenschwingungen pro Frequenzintervall $d\omega$

Eigenschwingungen
im 3D-Zahlenraum

$$3N = 3 \frac{4}{3} \pi n_{\max}^3$$

$\rho(\omega)$

$$= \begin{cases} \frac{3L^3}{2\pi^2 c^3} \omega^2 & \omega \leq \omega_D = \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N c^3}{L^3}} \\ 0 & \omega > \omega_D \end{cases}$$



$$\vec{n} = \vec{k}L/2\pi$$

Zustandsdichte $\rho(\omega) = dZ/d\omega$:

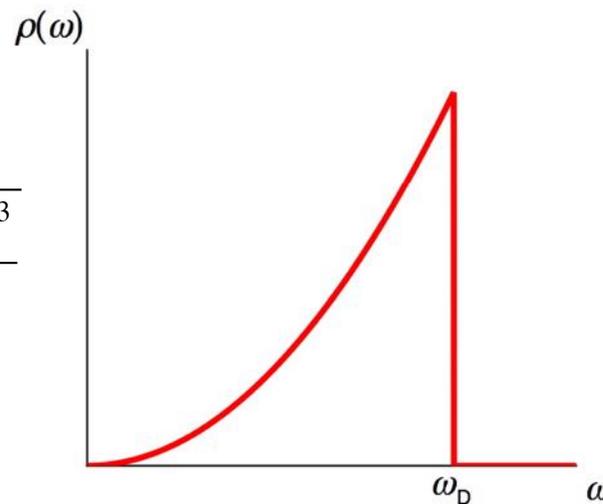
Anzahl Eigenschwingungen pro Frequenzintervall $d\omega$

Eigenschwingungen
im 3D-Zahlenraum

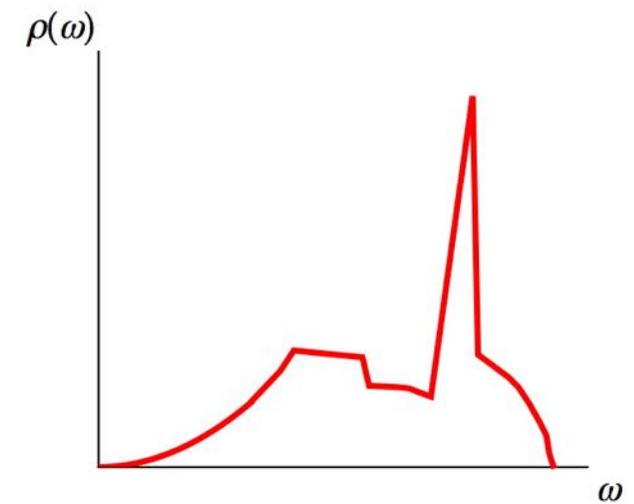
$$3N = 3 \frac{4}{3} \pi n_{\max}^3$$

$$\int_0^{\infty} \rho(\omega) d\omega = 3N$$

$$\rho(\omega) = \begin{cases} \frac{3L^3}{2\pi^2 c^3} \omega^2 & \omega \leq \omega_D = \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N c^3}{L^3}} \\ 0 & \omega > \omega_D \end{cases}$$



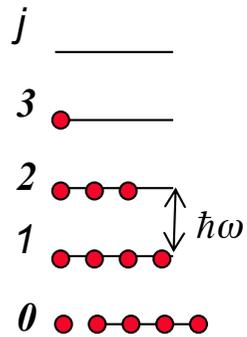
Debye



realer Festkörper

Eine Eigenschwingung mit ω kann, je nach Temperatur T , mit mehr oder weniger Phononen besetzt sein. Die Verteilung der quantisierten Energien $E_j = j\hbar\omega$ ist durch den Boltzmann-Faktor gegeben:

$$1 + x + x^2 + x^3 \dots = \frac{1}{1-x}, \quad x = \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{k_B T}\right)$$



$$w(E_j) = \frac{\exp(-j\hbar\omega / k_B T)}{\sum_{j=0}^{\infty} \exp(-j\hbar\omega / k_B T)} = \exp(-j\hbar\omega / k_B T) (1 - \exp(-\hbar\omega / k_B T))$$

Mittlere Energie der Eigenschwingung ω

Besetzungszahl

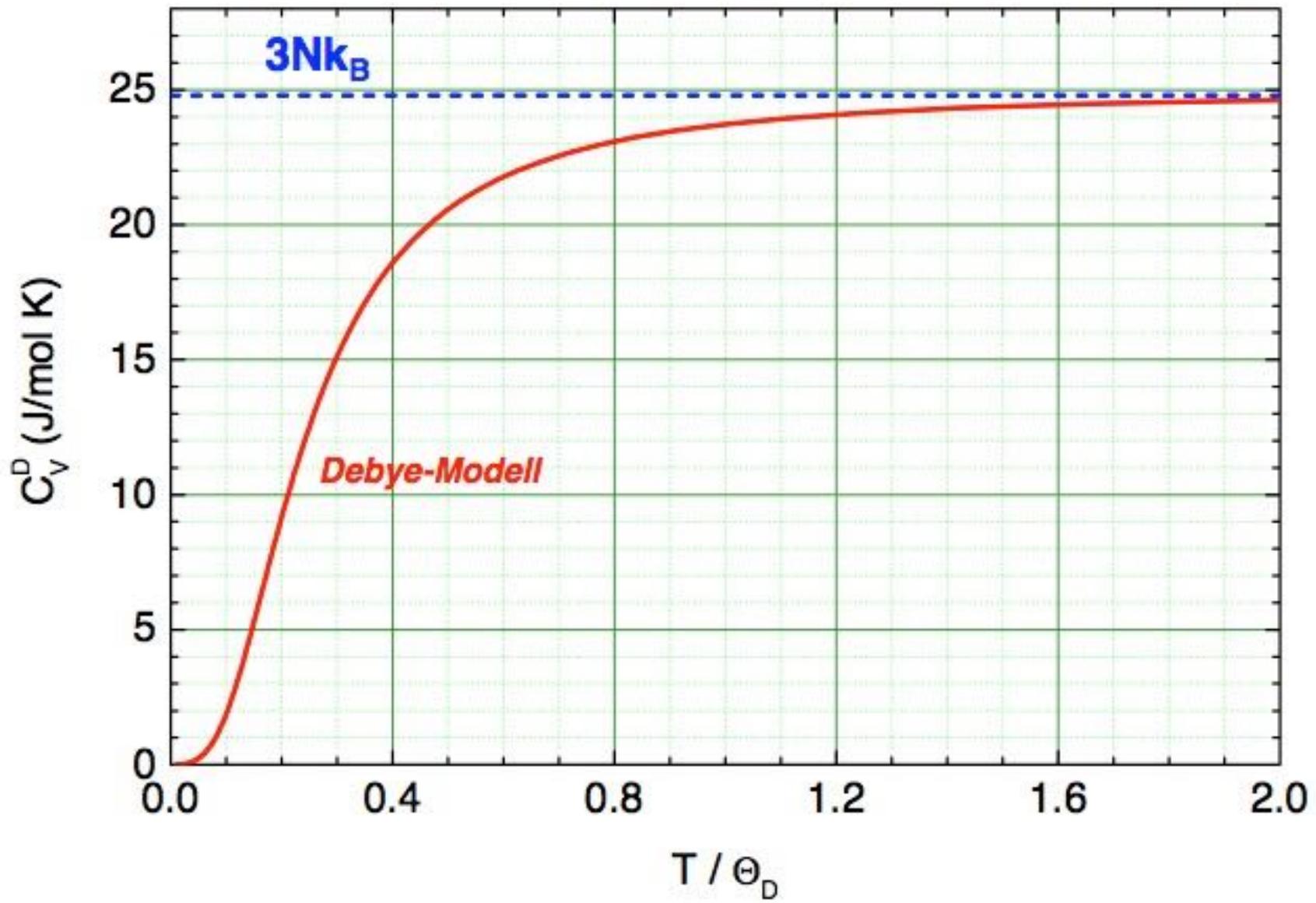
$$\bar{E}_\omega = \sum_{j=0}^{\infty} w(E_j) E_j = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1}$$

$$n(\omega) = \bar{E}_\omega / \hbar\omega = \frac{1}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1}$$

$$1 + 2x + 3x^2 + 3x^3 \dots = \frac{x}{(1-x)^2}$$

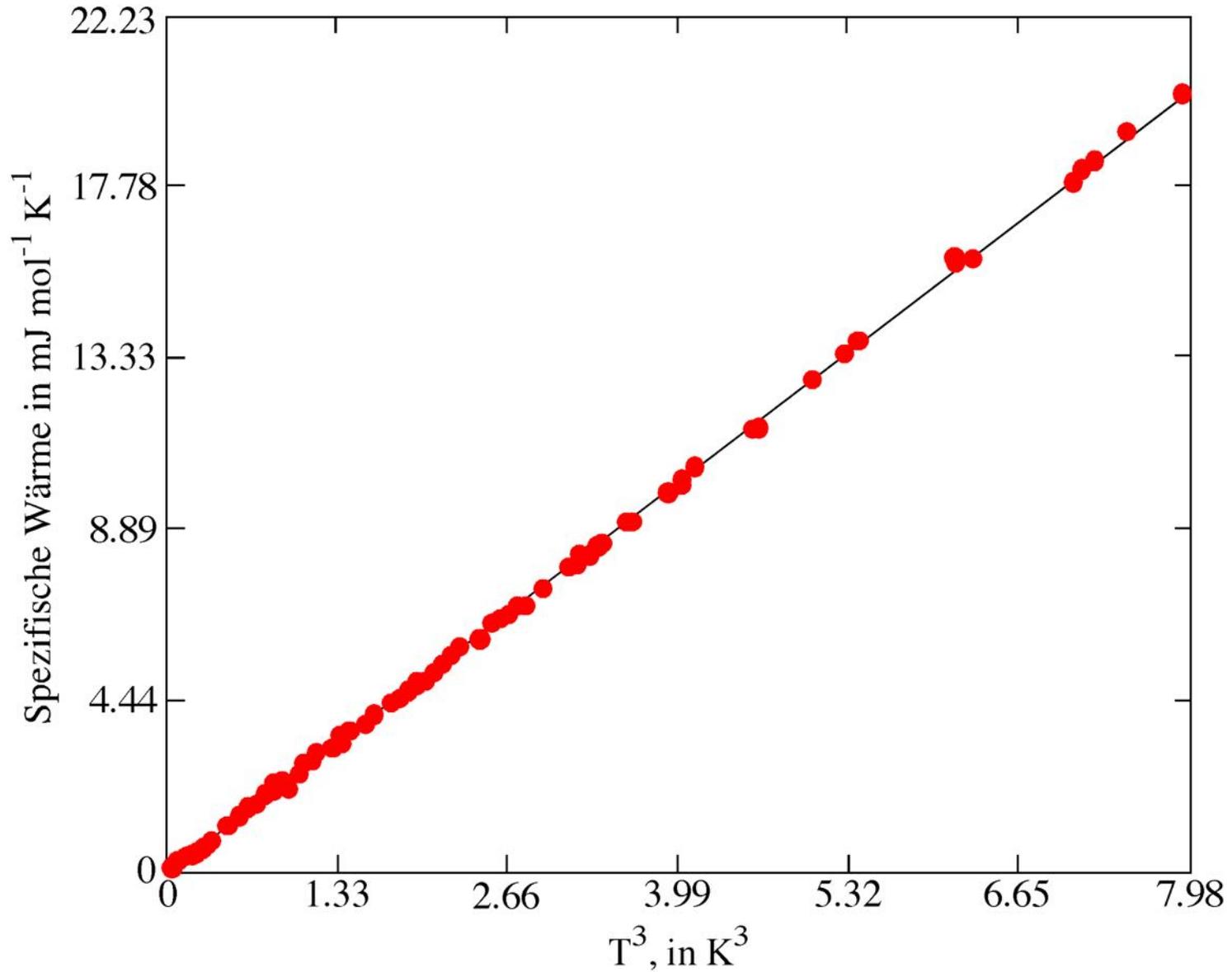
Totaler innere Energie *aller* Eigenschwingungen ω

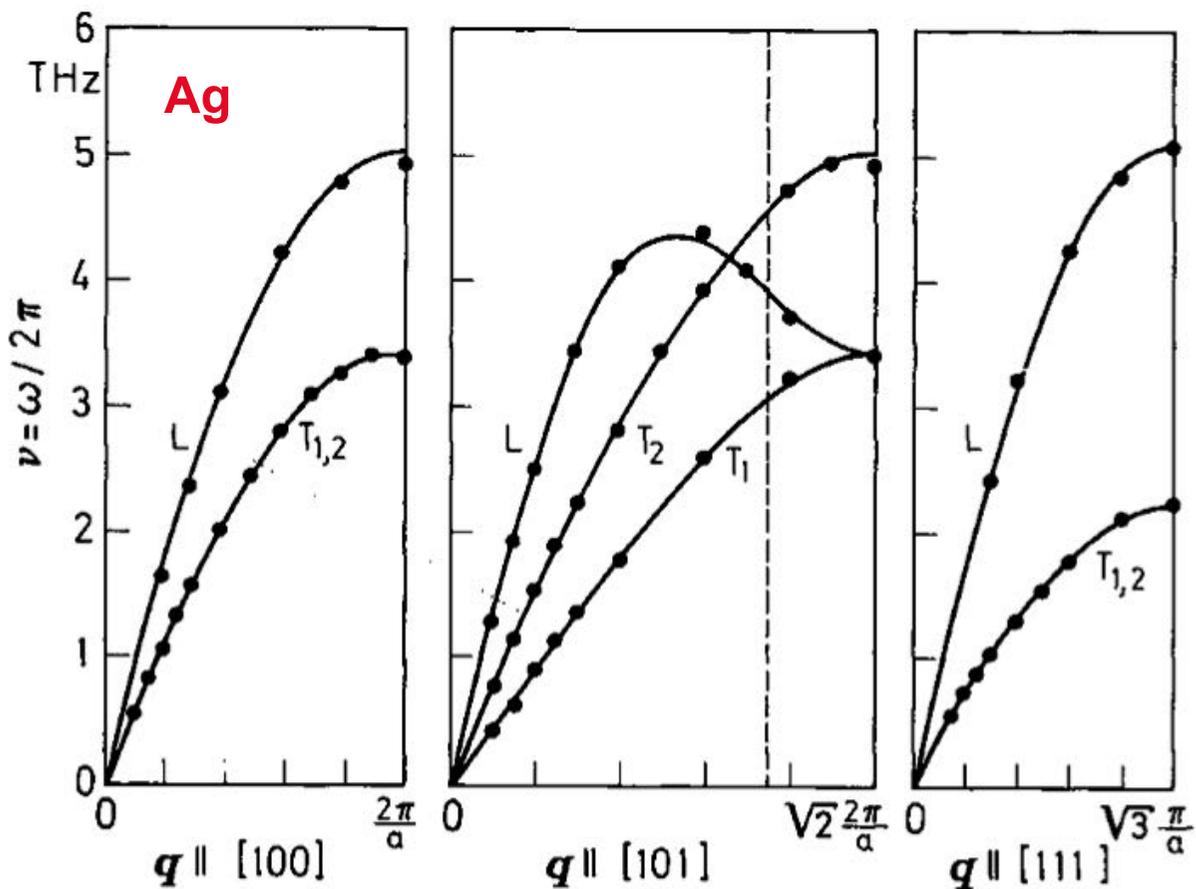
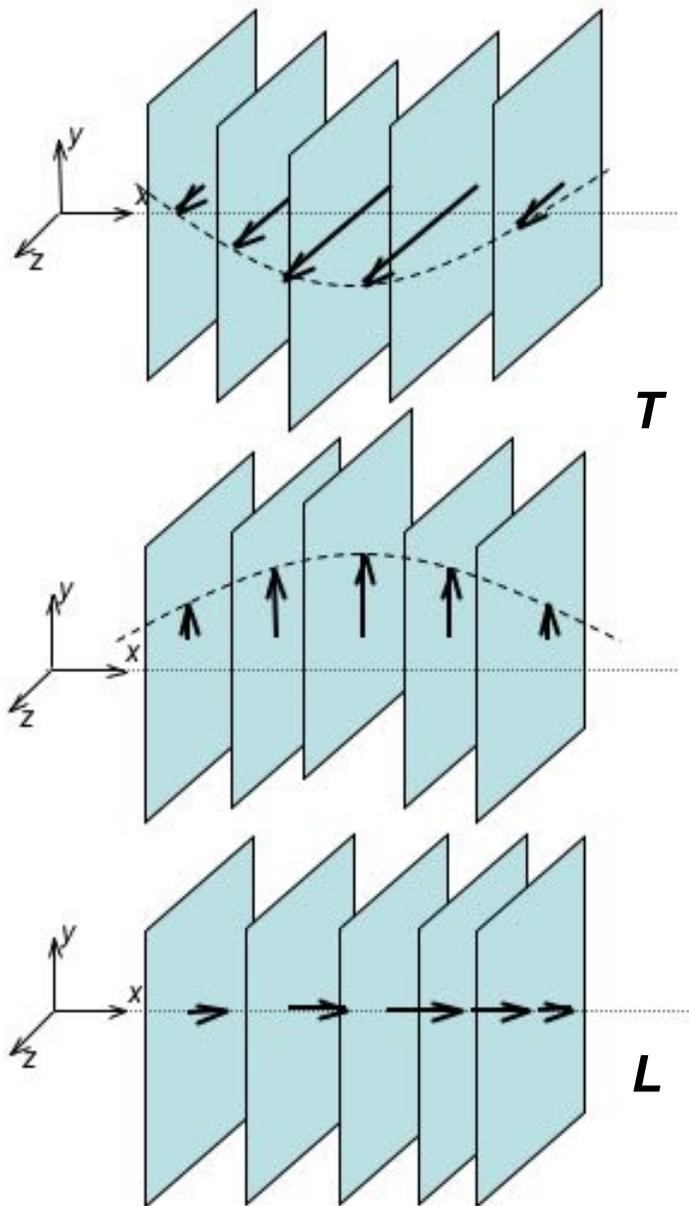
$$U(T) = \int_0^{\infty} \bar{E}_\omega \rho(\omega) d\omega \quad C_v = \frac{\partial U}{\partial T}$$



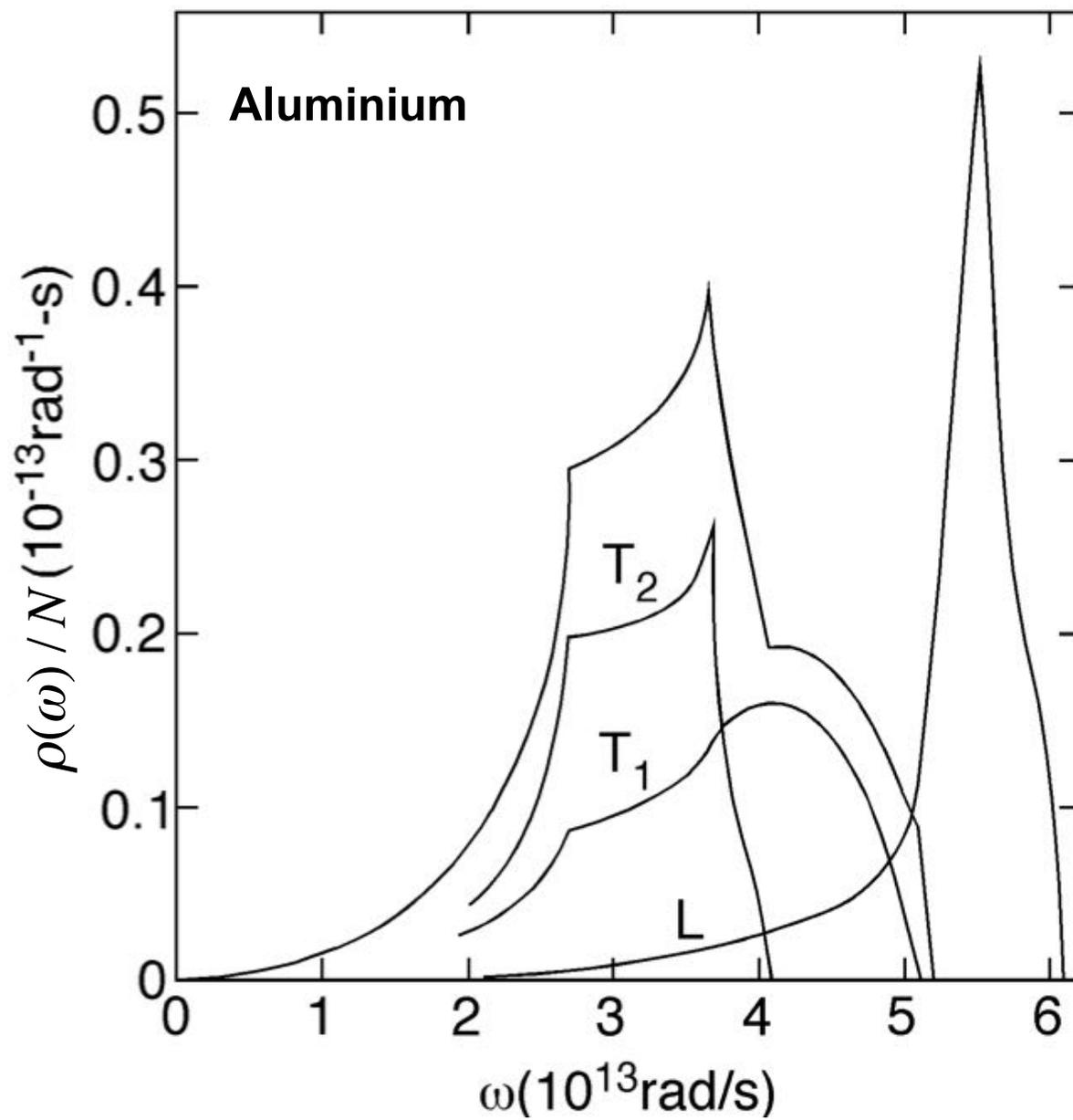
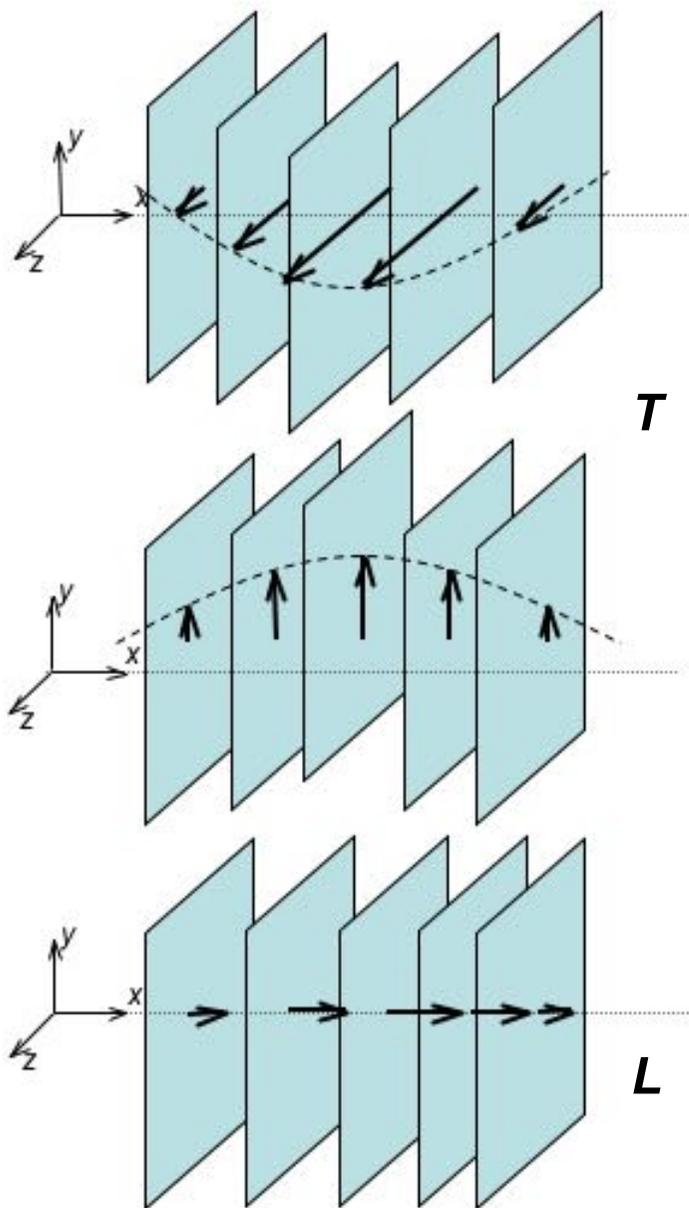
	$\Theta_D(K)$		$\Theta_D(K)$
Li	344	Cu	343
Na	158	Ag	225
Rb	56	Au	165
Be	1440	Fe	470
Ca	230	LiF	620
Al	428	NaCl	280
Diamant	2230	KCl	230
Si	645	KBr	175
Pb	105	RbBr	130

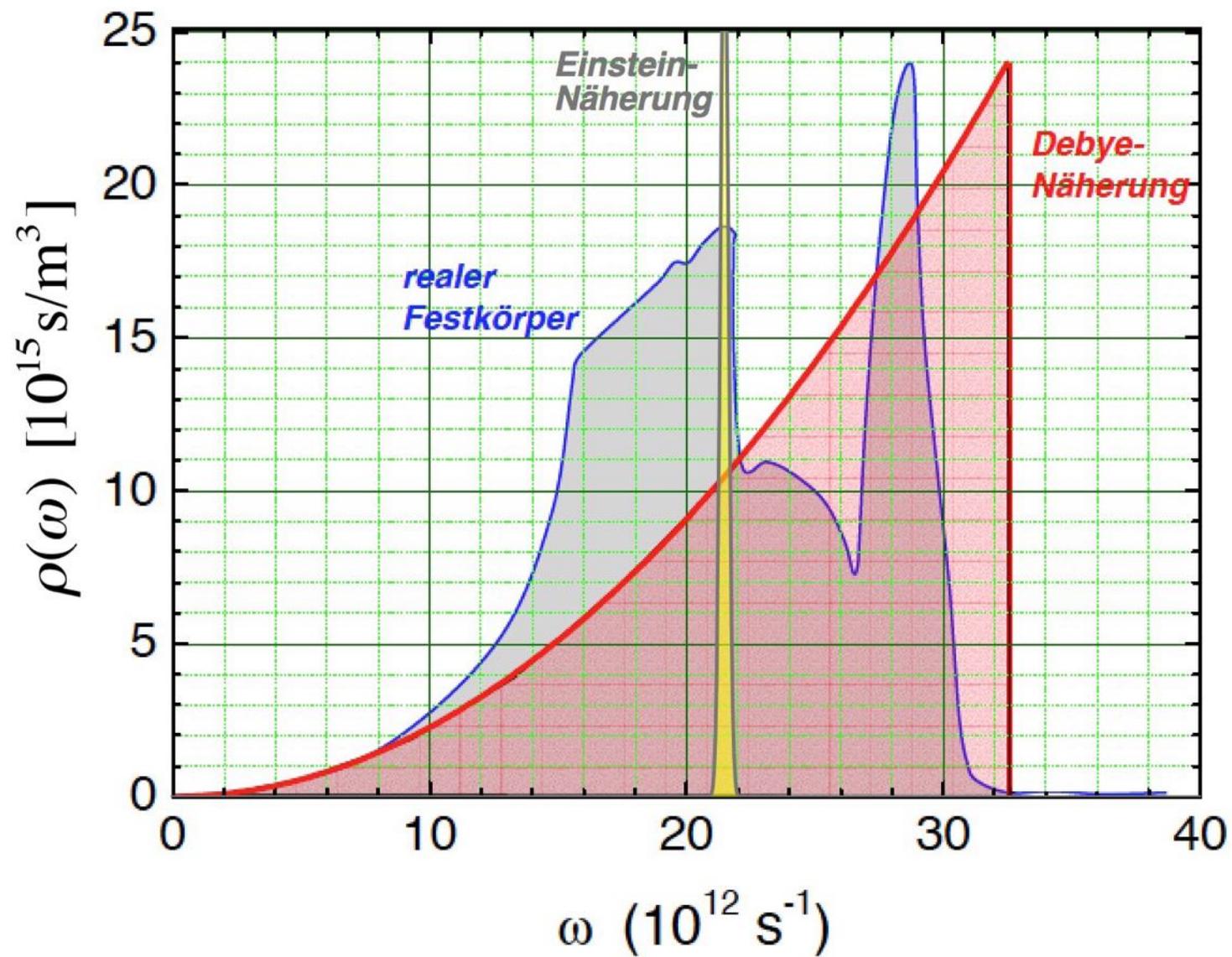
Spezifische Wärmekapazität für festes Argon bei tiefen Temperaturen



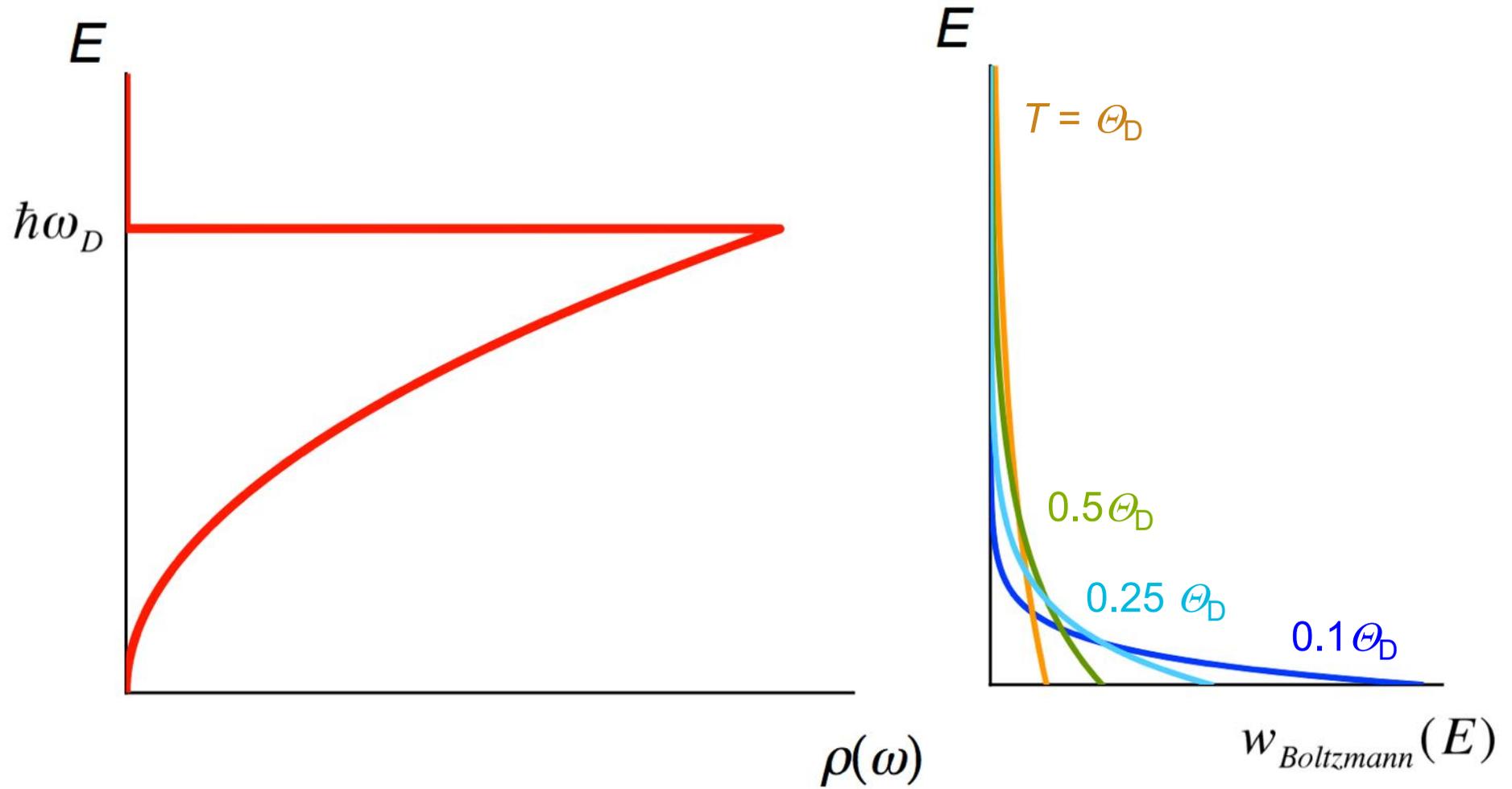


...unterschiedliche Schallgeschwindigkeiten $c = d\omega / dk$
für transversale und longitudinale Schwingungen

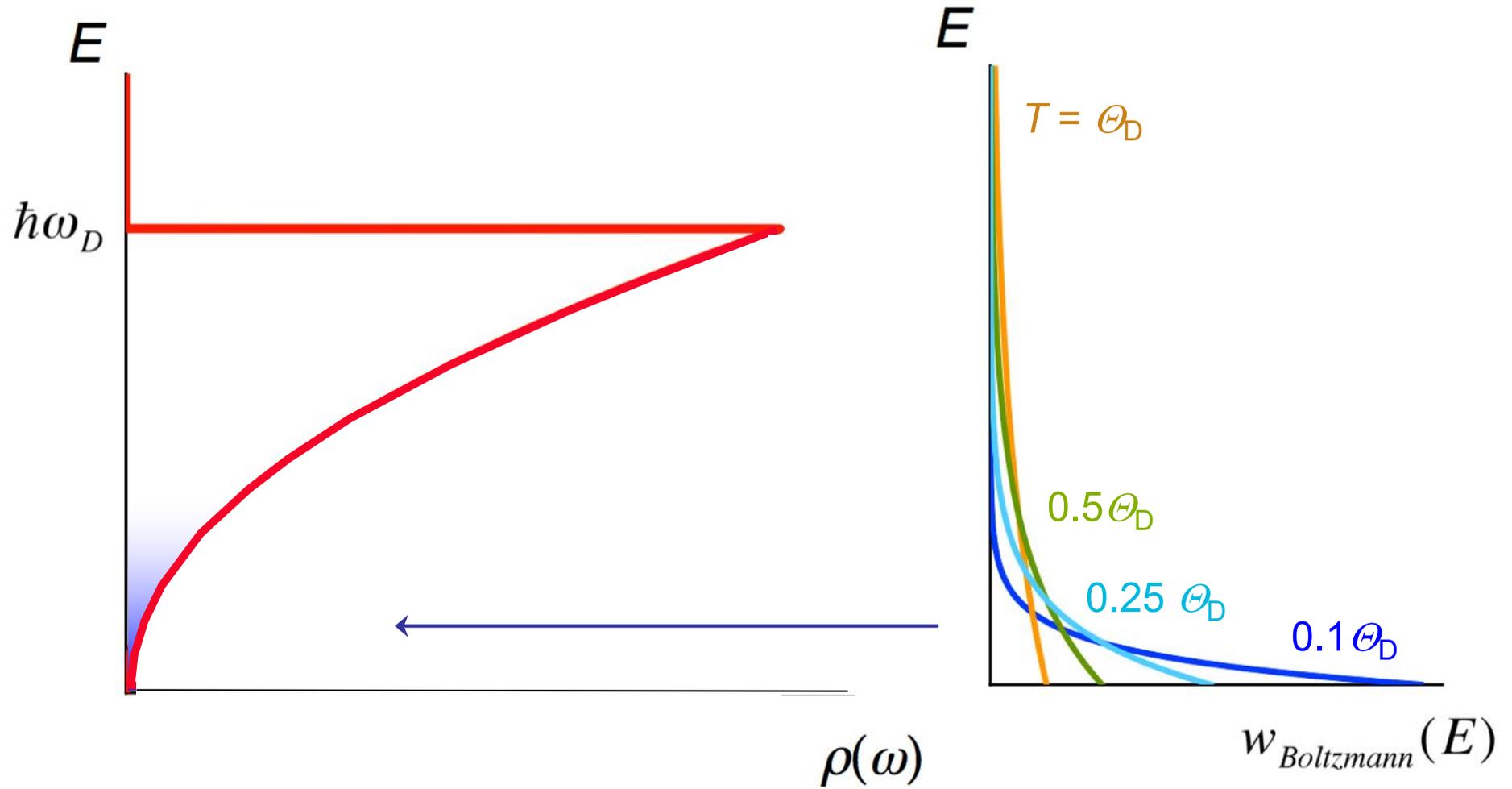




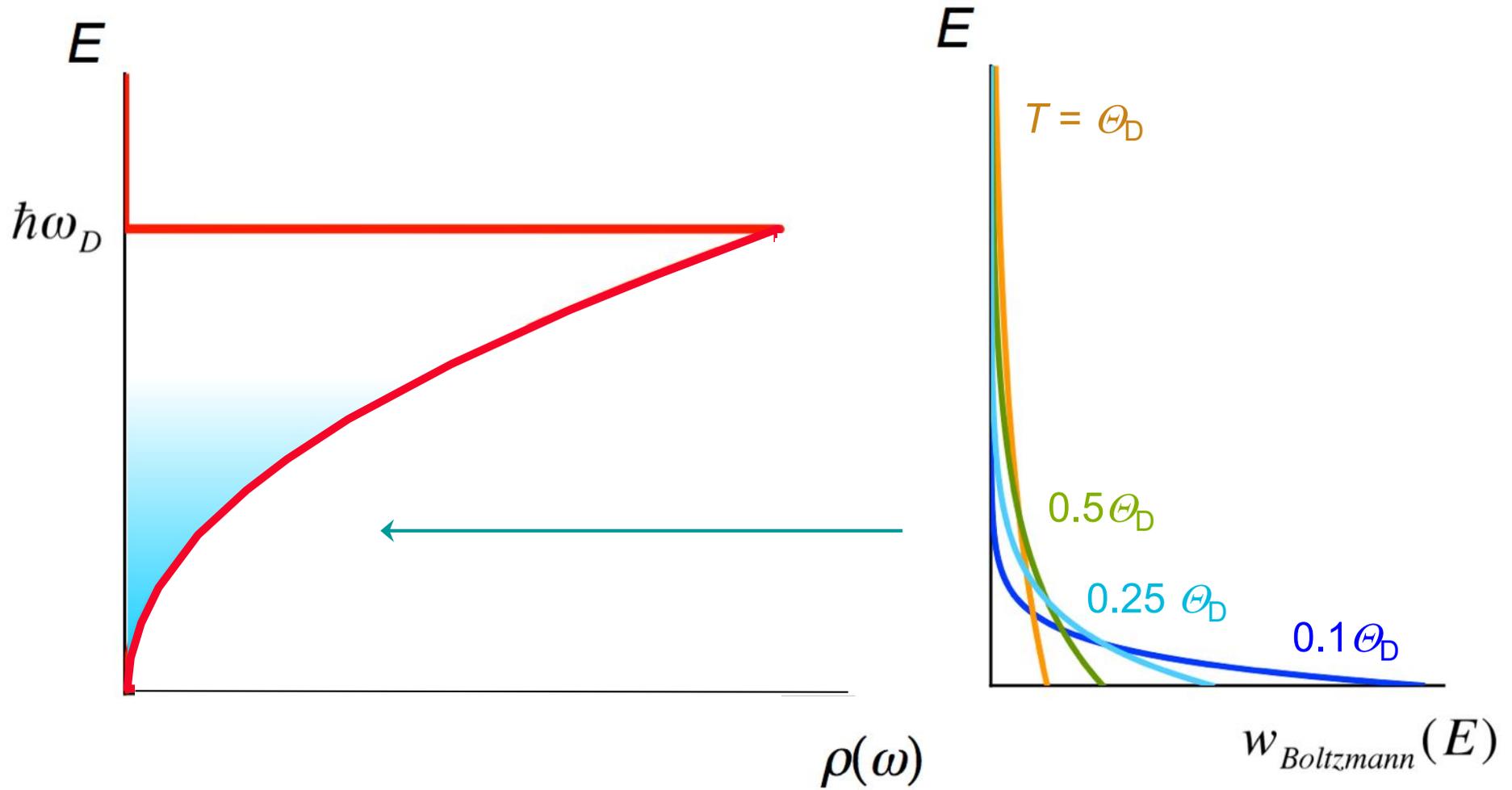
Einfluss der Temperatur auf die Anzahl und die Verteilung der Phononen



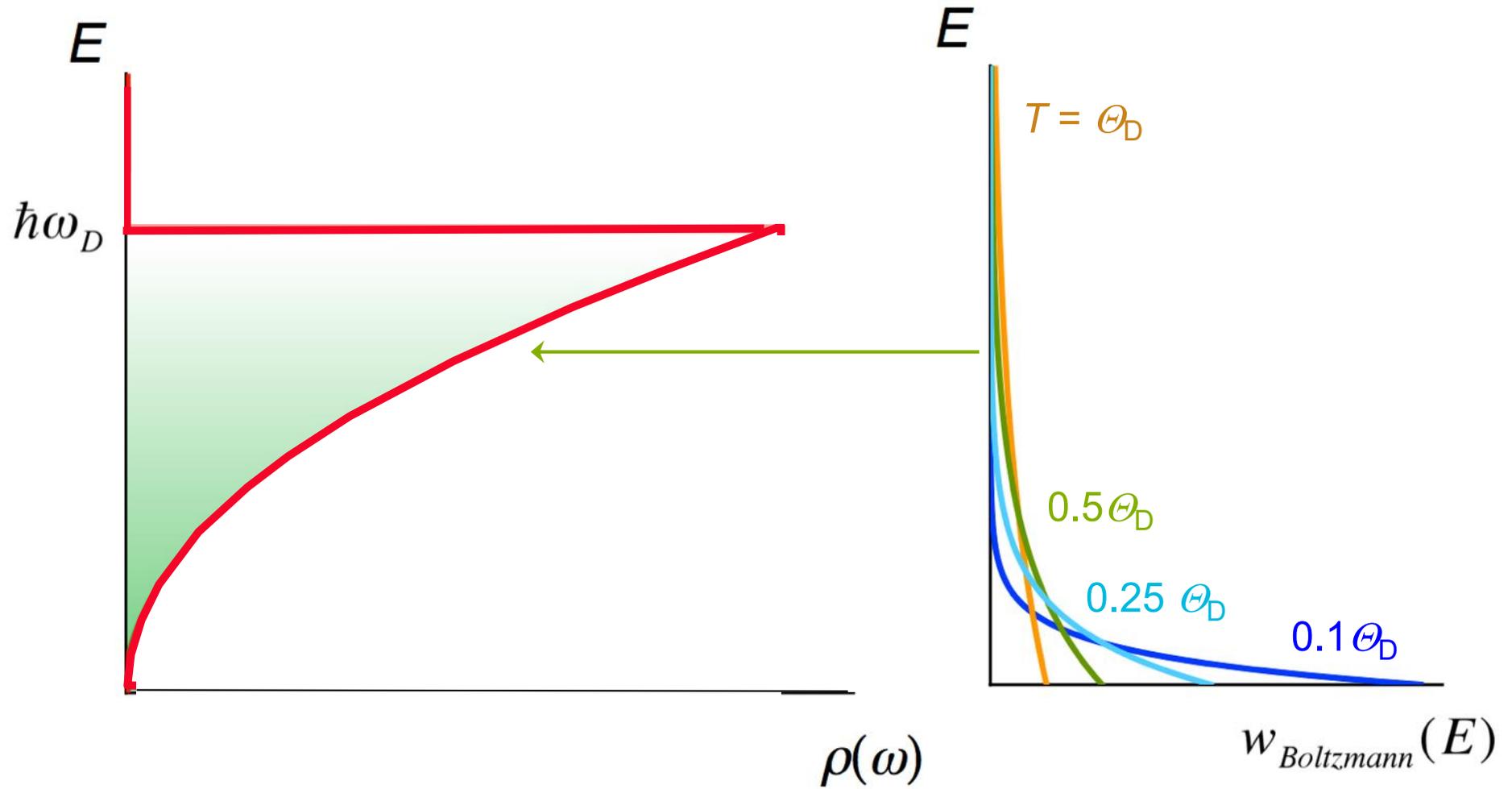
Einfluss der Temperatur auf die Anzahl und die Verteilung der Phononen



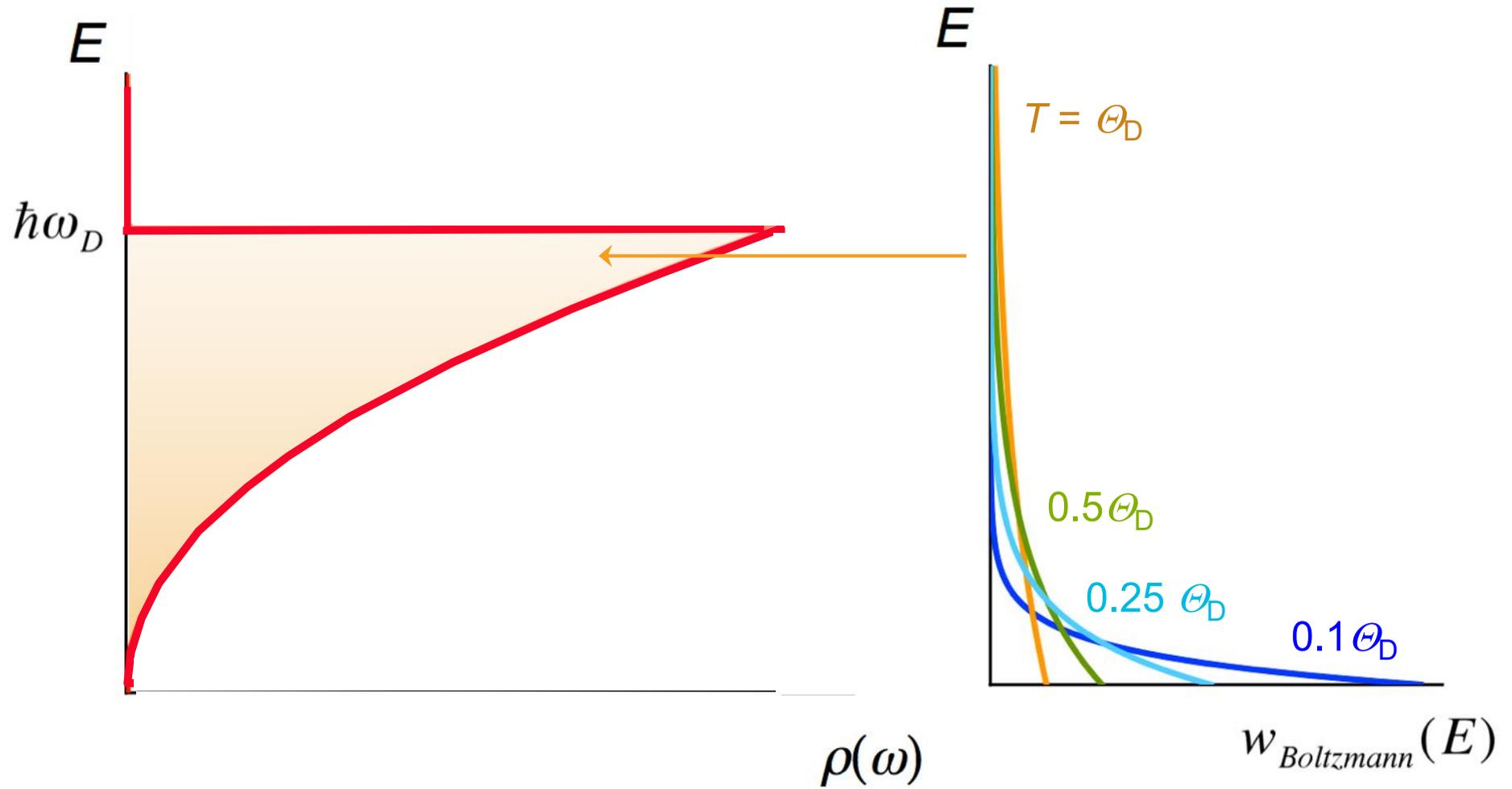
Einfluss der Temperatur auf die Anzahl und die Verteilung der Phononen



Einfluss der Temperatur auf die Anzahl und die Verteilung der Phononen



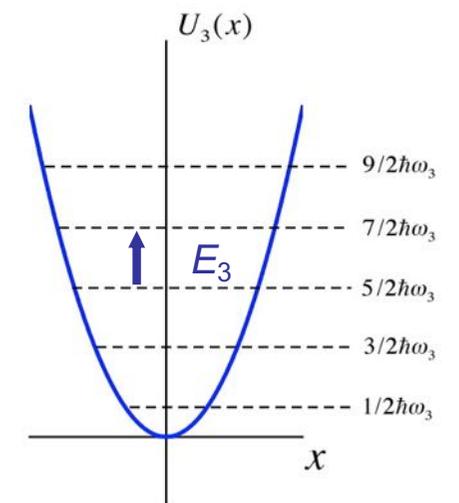
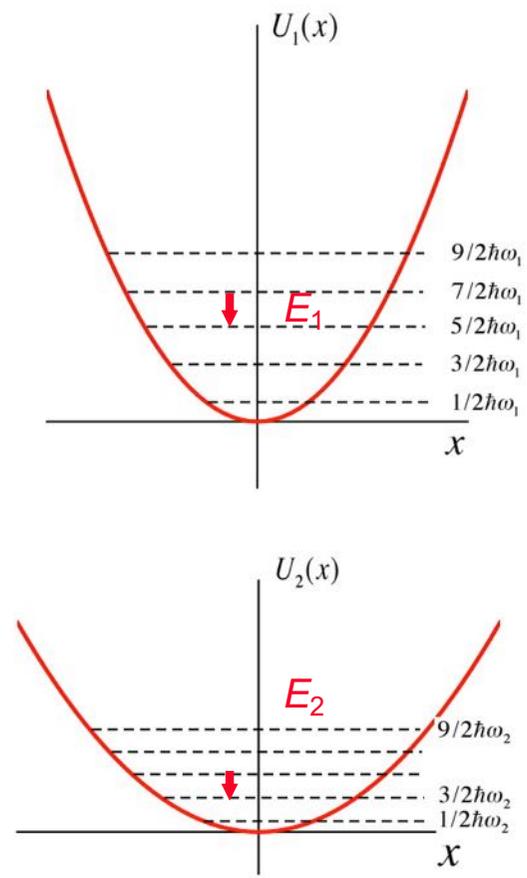
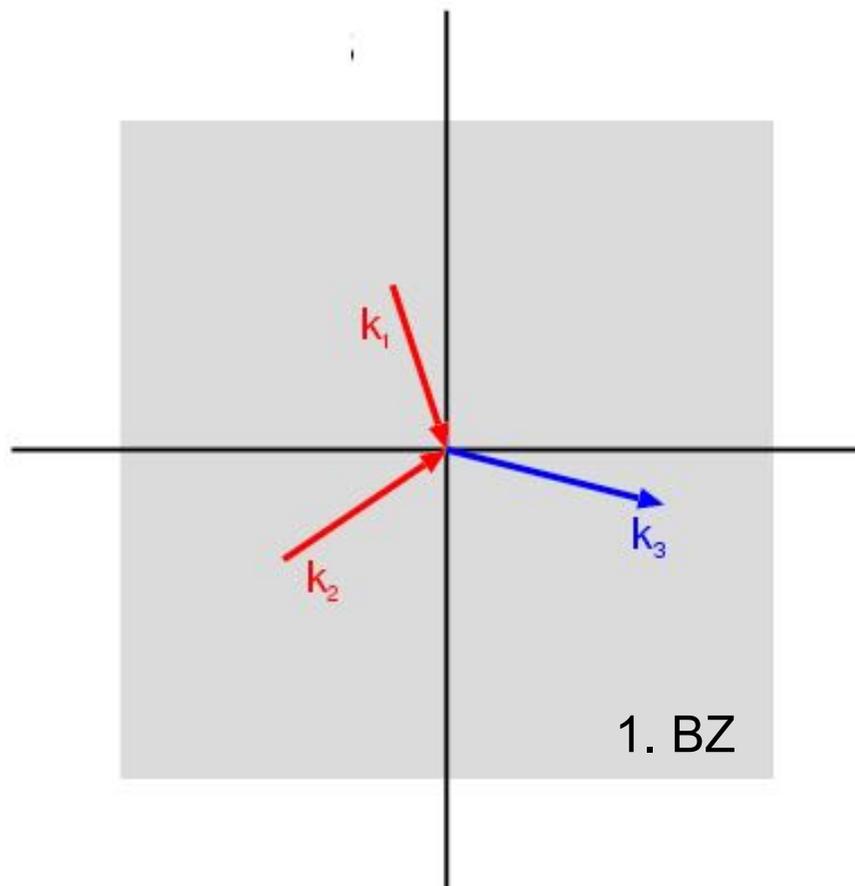
Einfluss der Temperatur auf die Anzahl und die Verteilung der Phononen



Mehr-Phononen-Prozesse:

$$K_1 + K_2 = K_3$$

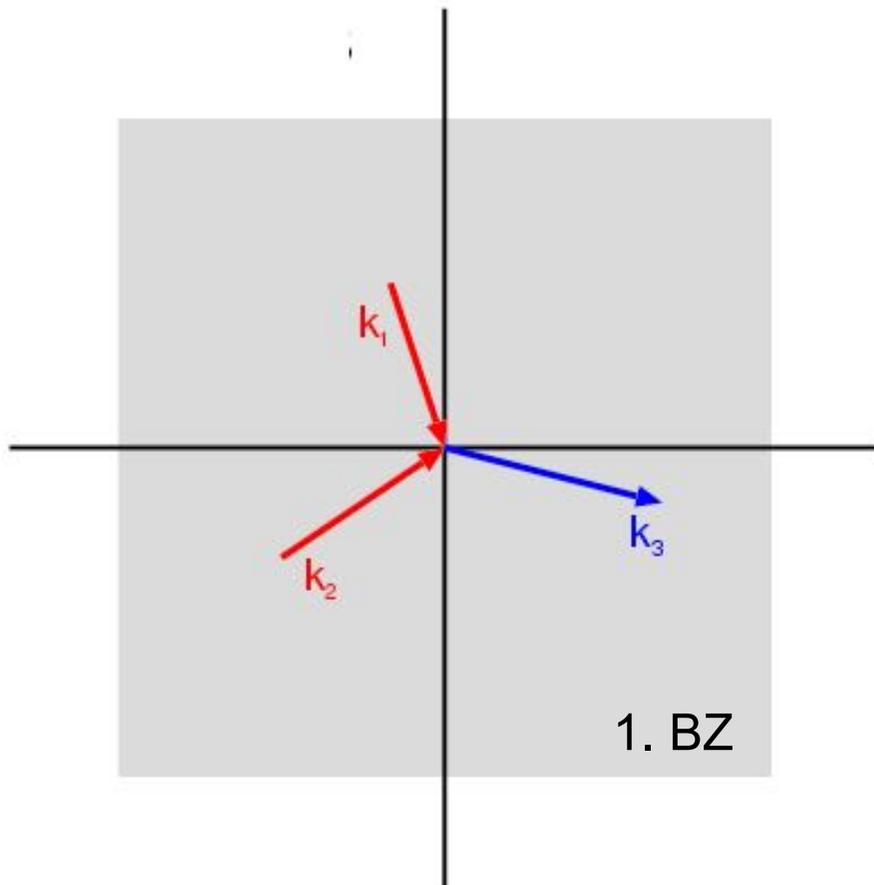
$$E_1 + E_2 = E_3$$



Mehr-Phononen-Prozesse:

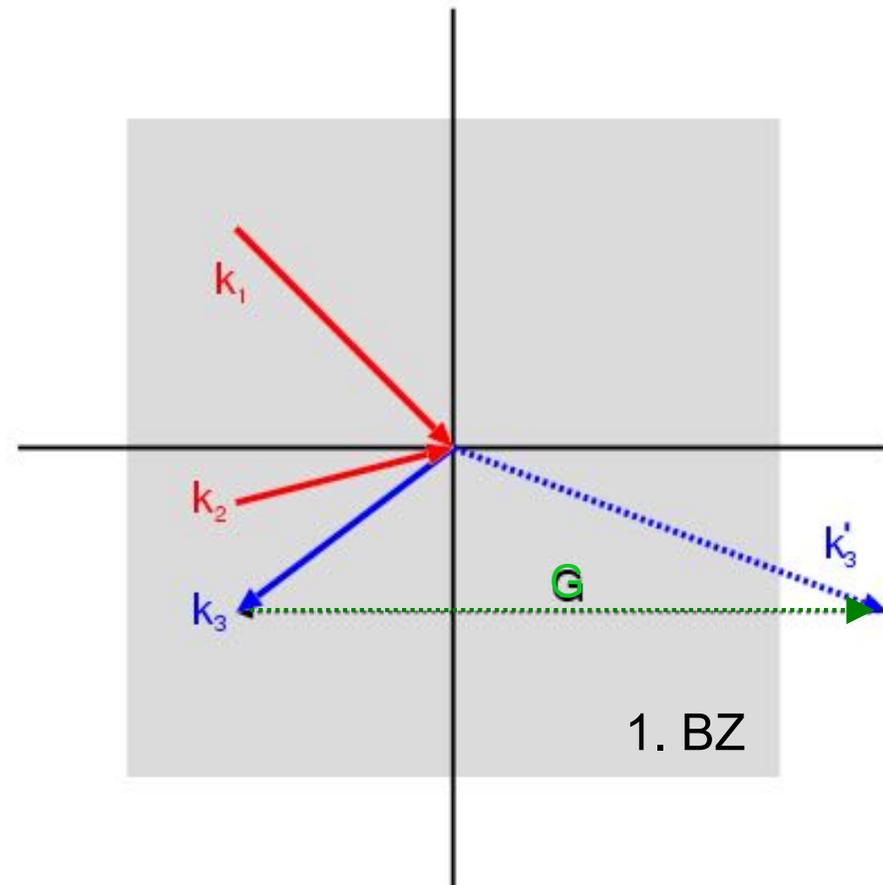
Normalprozess

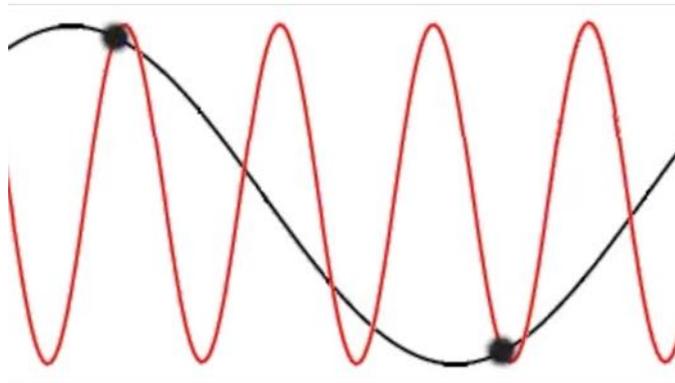
$$K_1 + K_2 = K_3$$



Umklapp-Prozess

$$K_1 + K_2 = K_3 + G$$





K_3'

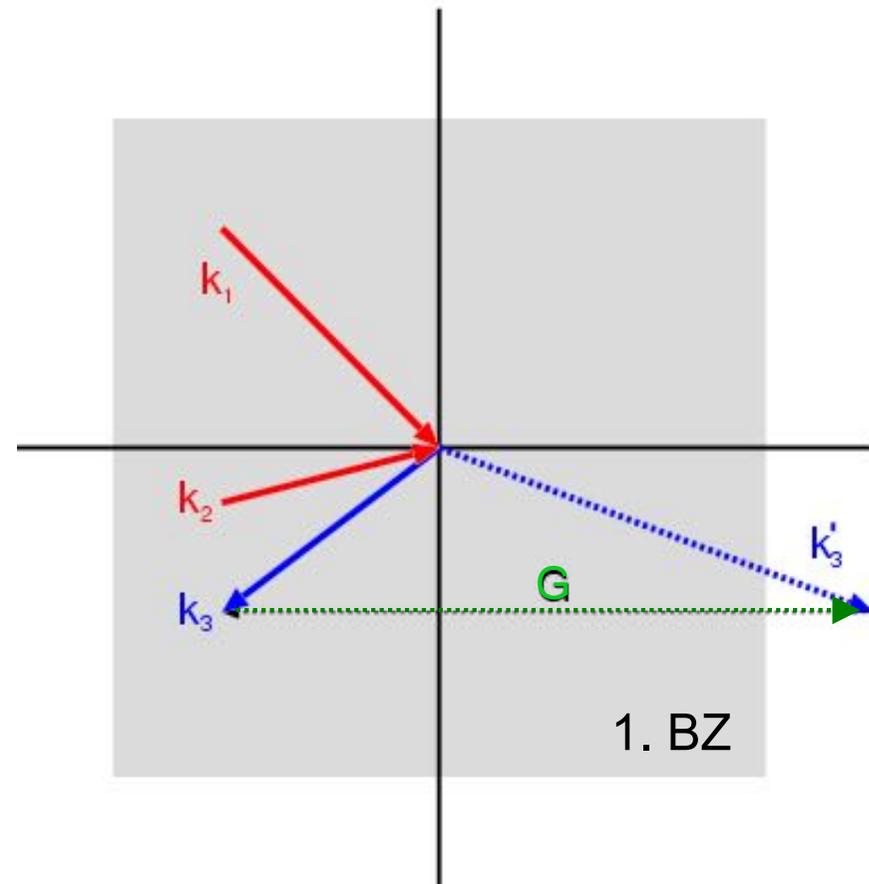
2. BZ

K_3

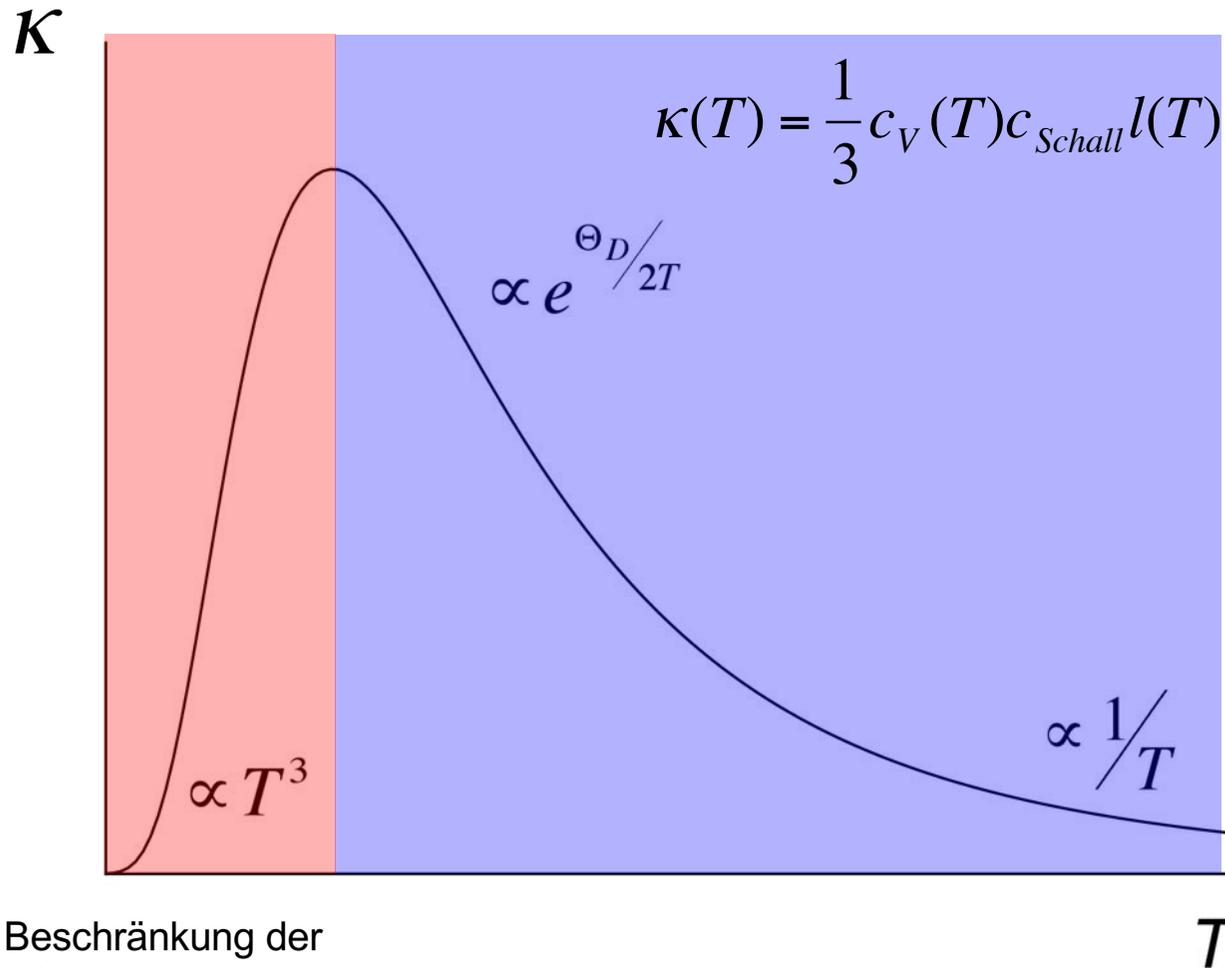
1. BZ

Umklapp-Prozess

$$K_1 + K_2 = K_3 + G$$



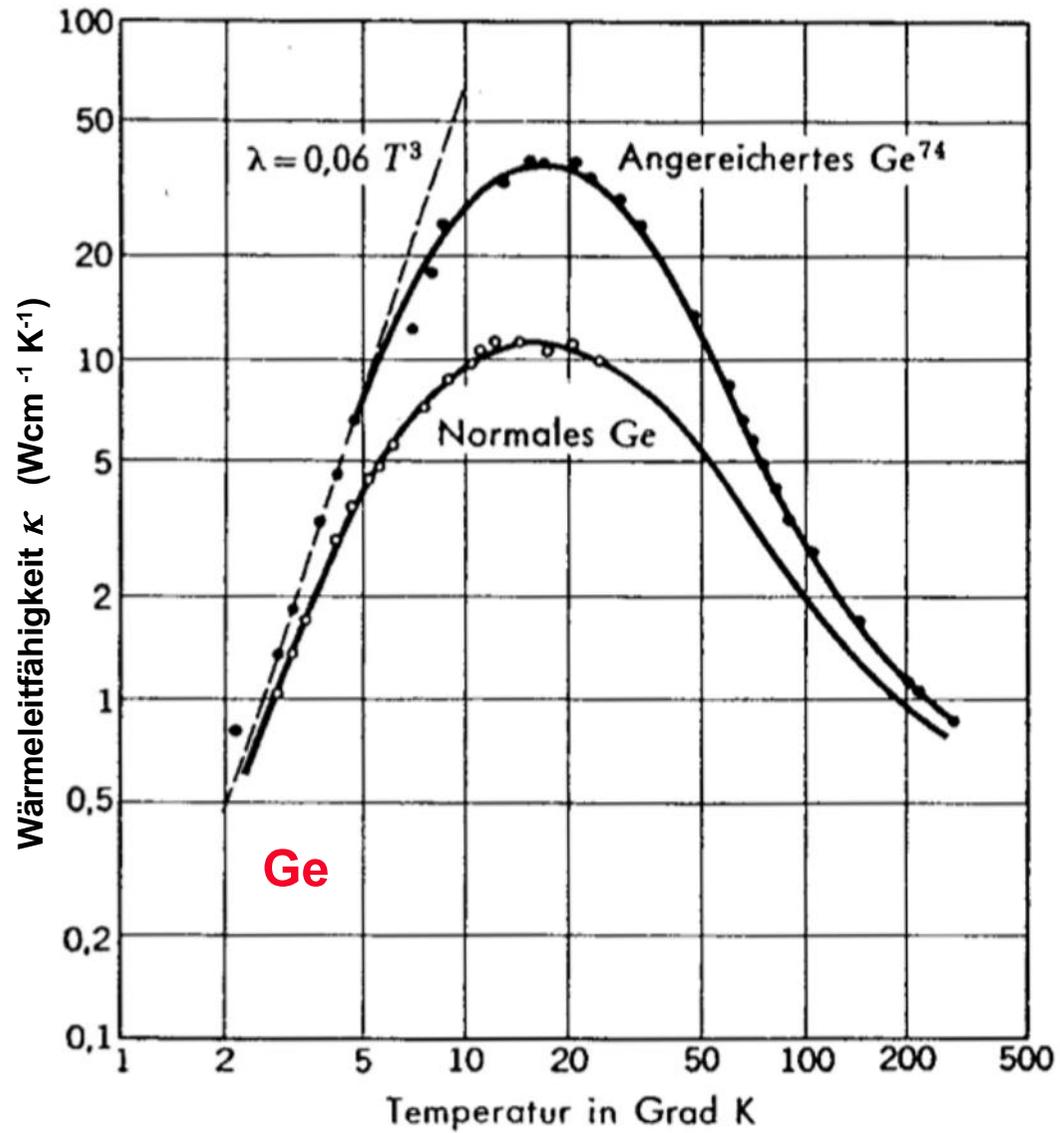
Thermische Leitfähigkeit des Kristallgitters



Beschränkung der
mittleren
freien Weglänge
(Imperfektionen,
Kristallgröße)

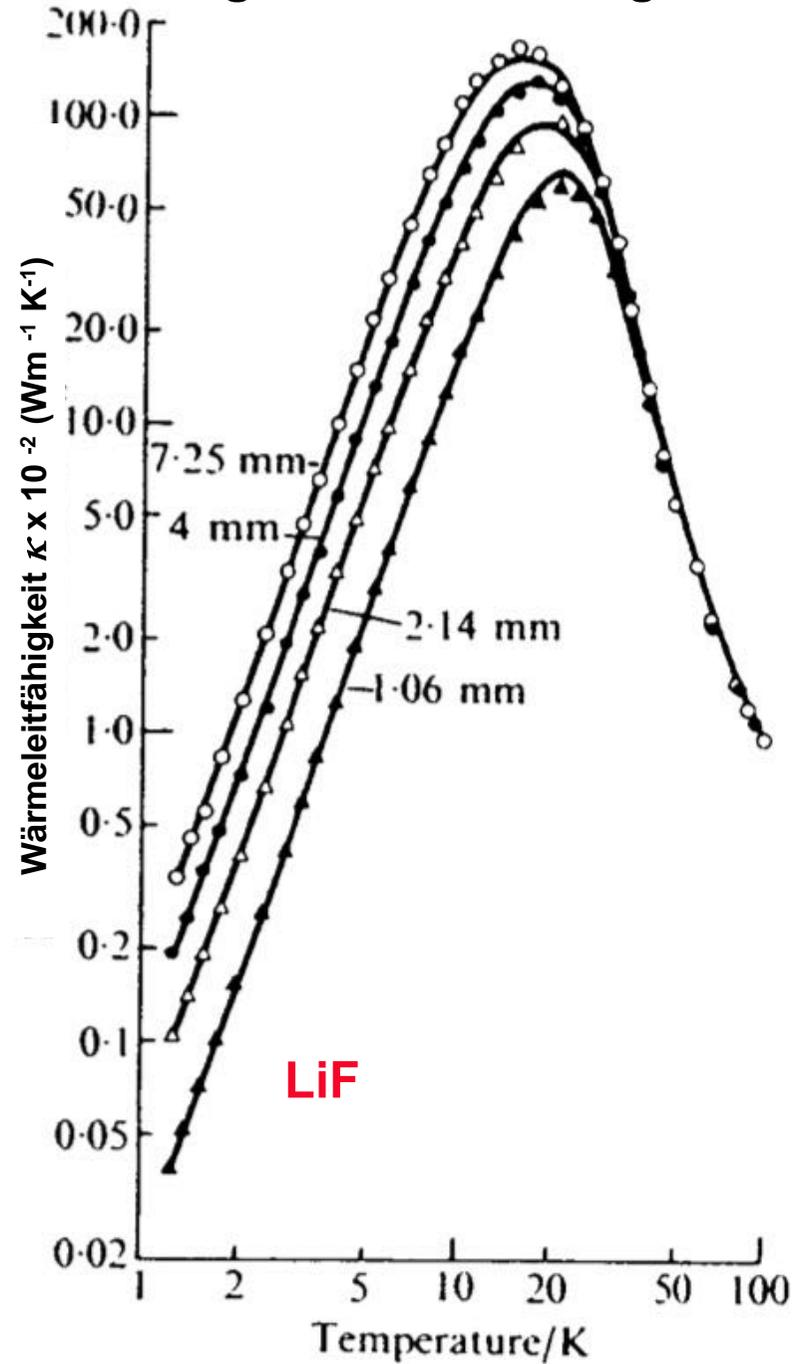
mittlere freie Weglänge bestimmt
durch Mehrphononenprozesse
(Umklappprozesse)

Thermische Leitfähigkeit des Kristallgitters



Reinheit

Thermische Leitfähigkeit des Kristallgitters



Kristallgrösse