

Thermische Eigenschaften von Gitterschwingungen

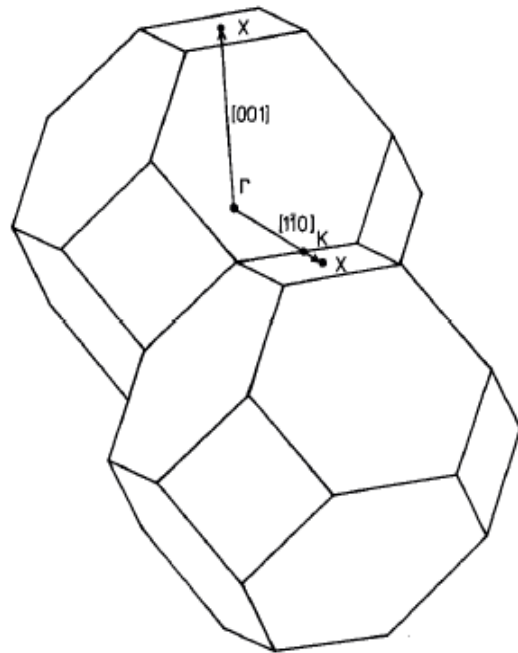
Gitteranteil der spezifischen Wärme

Anharmonische Effekte

(Wärmeleitung, Wärmeausdehnung)

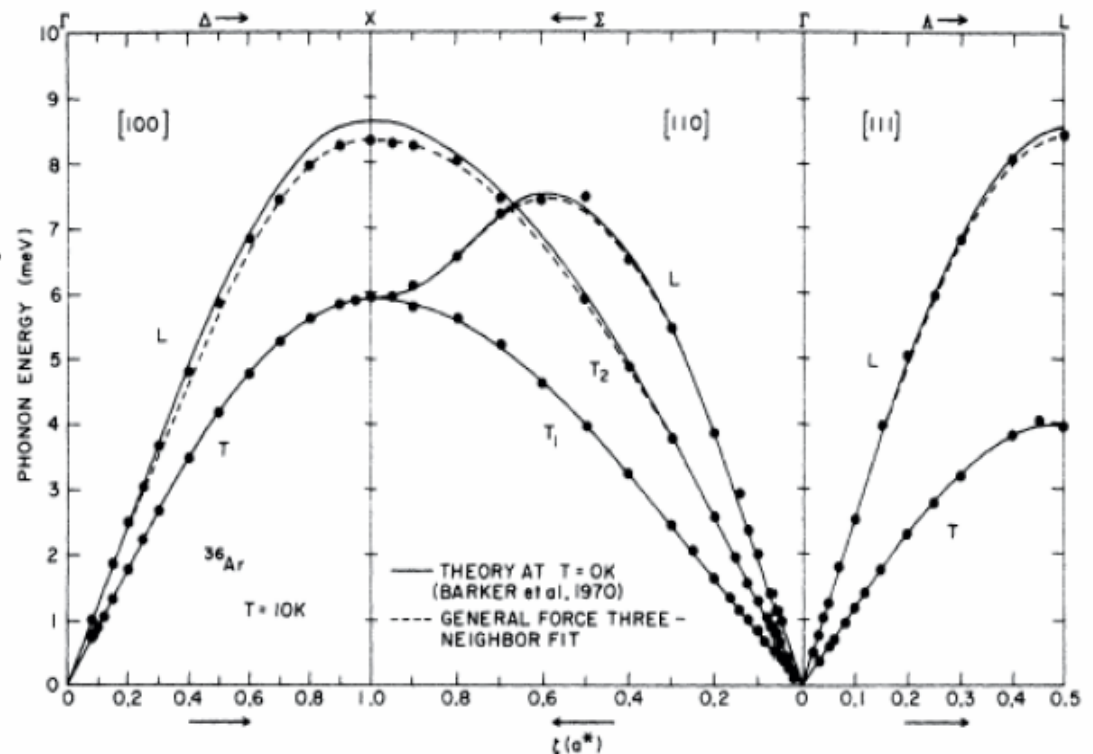
Dispersionsrelation für 3D-Bravaisgitter ohne Basis

91



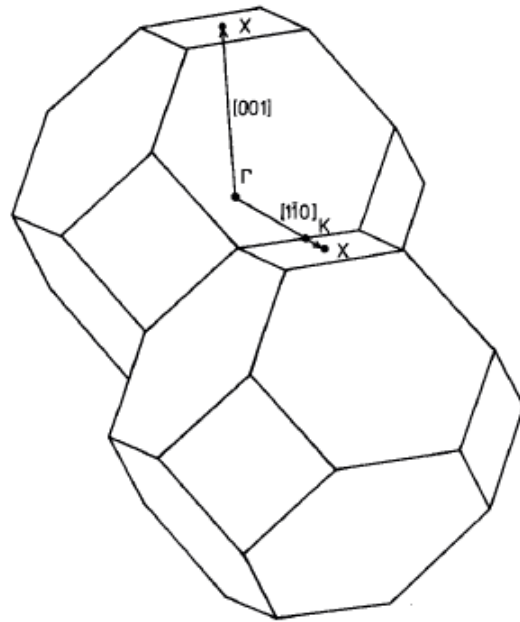
Hauptsymmetrie-
richtungen

festes ^{36}Ar , fcc, Neutronenstreuung



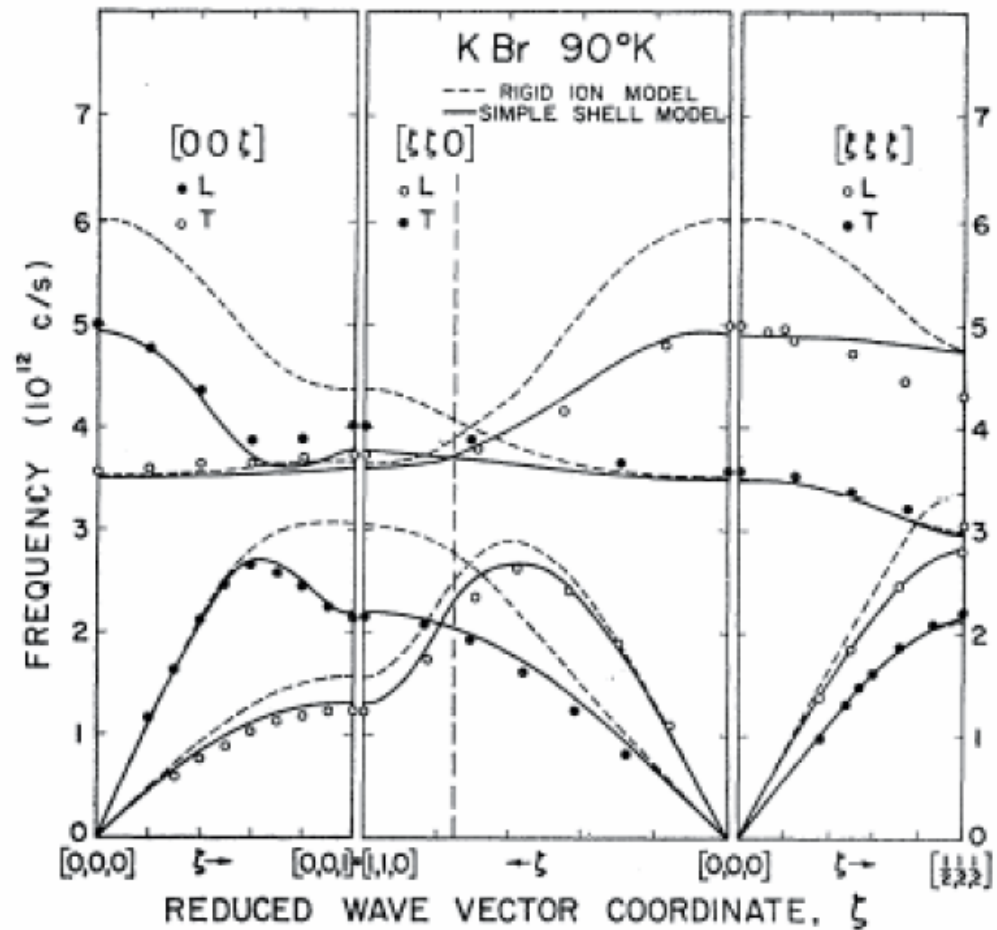
Dispersionsrelation für 3D-Bravaisgitter *mit* Basis

95



Hauptsymmetrie-
richtungen

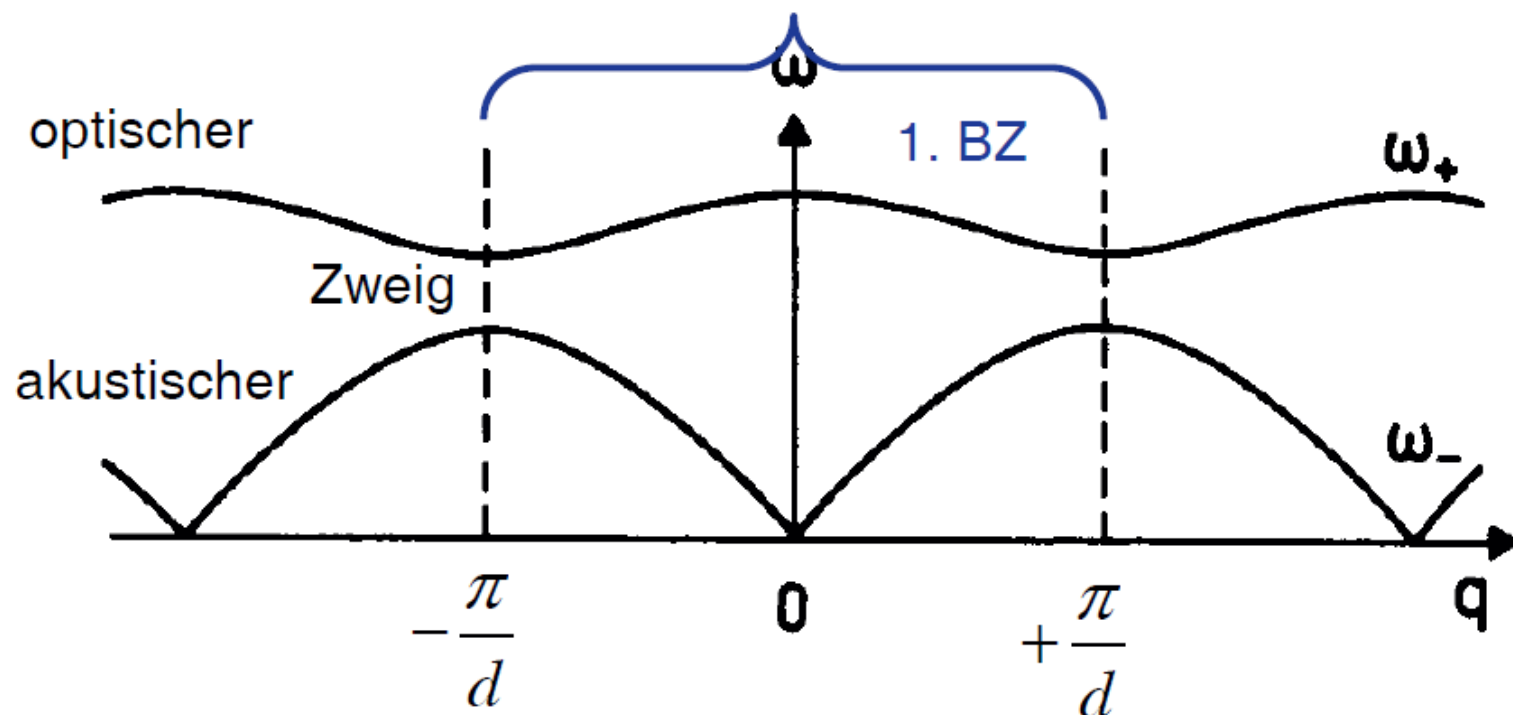
KBr, NaCl-Struktur, Neutronenstreuung



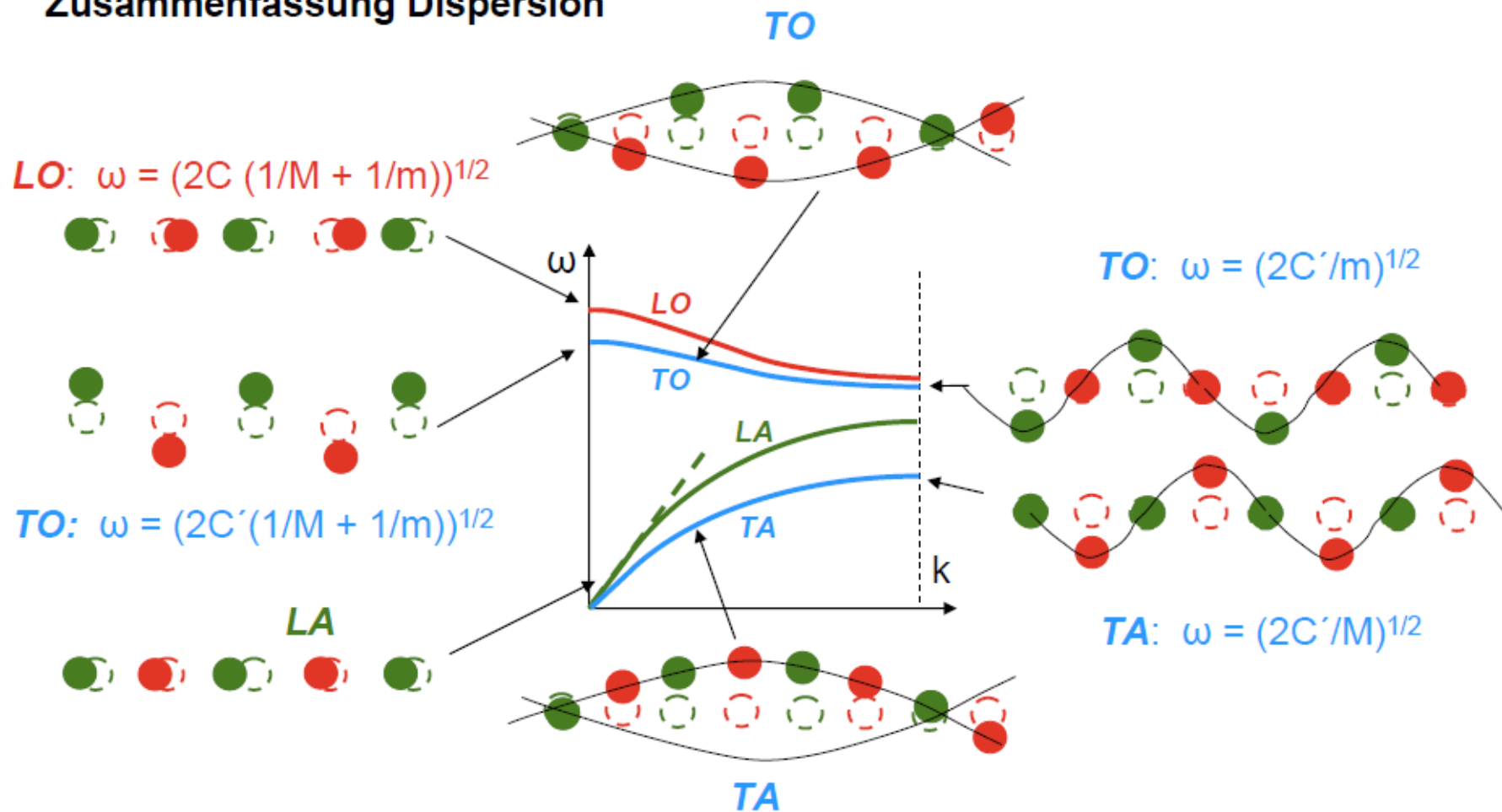
Dispersionrelation: Gitter mit zweiatomiger Basis

93

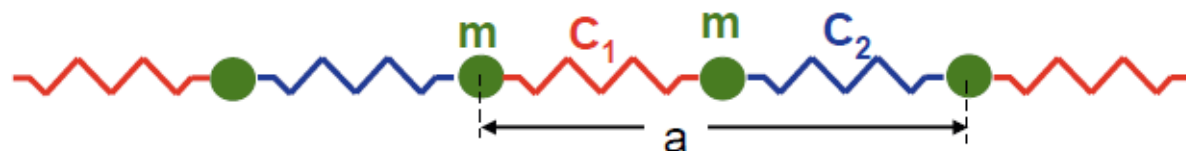
$$\omega^2 = c \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm c \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{qd}{2}}$$



Zusammenfassung Dispersion



bisher: 2 unterschiedliche Massen m, M und feste Federkonstante C
analog: feste Masse m und 2 alternierende Federkonstanten C_1 und C_2



Phononen-Energie

bekannt: „Photon“ = Lichtquant = Energiequant einer Lichtwelle

Quantisierung = **Diskretisierung** der möglichen Amplitudenwerte
des E- und B-Feldes

analog: „Phonon“ = Energiequant einer Gitterauslenkungswelle

Quantisierung = **Diskretisierung** der möglichen Amplitudenwerte
der atomaren Auslenkung,
d.h. der harmonischen Schwingung

Quantenmechanik: für harmonischen Oszillator

$$\text{Energie } E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

↑
Besetzungs-
zahl

↑
Nullpunkts-
energie

Thermische Schwingungen im Festkörper
Elastische Wellen im Festkörper

} Angeregte Phononen

Phononen-Impuls

führt Wellenvektor \mathbf{k} zu einem Impuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$?

Phonon hat **keinen reellen physikalischen Impuls**,

weil Summe der Auslenkungen, bzw. $\partial u / \partial t$, $\partial v / \partial t$ über den gesamten Kristall = 0

(Ausnahme: akustische Phononen für $k \rightarrow 0$, entspricht Translation)

ABER: **Wellenvektor \mathbf{k} bestimmt relative Phase der Atomauslenkungen**

Relevant für Wechselwirkungsprozesse,

z.B. Anregung von Phonon durch Lichtwelle (= Lichtabsorption)

Absorption der Energie aus Lichtwelle (ω, \mathbf{k}) durch Atomauslenkungswelle (ω', \mathbf{k}') funktioniert nur, wenn sowohl die **Frequenz** passt (d.h. $\omega' = \omega$), als auch die **Phasen** von E-Feld und Atomauslenkungswelle **für alle Atome** übereinstimmen, d.h. auch die Wellenvektoren \mathbf{k} und \mathbf{k}' müssen **gleich** sein.

Analogon zur Energie- und Impulserhaltung

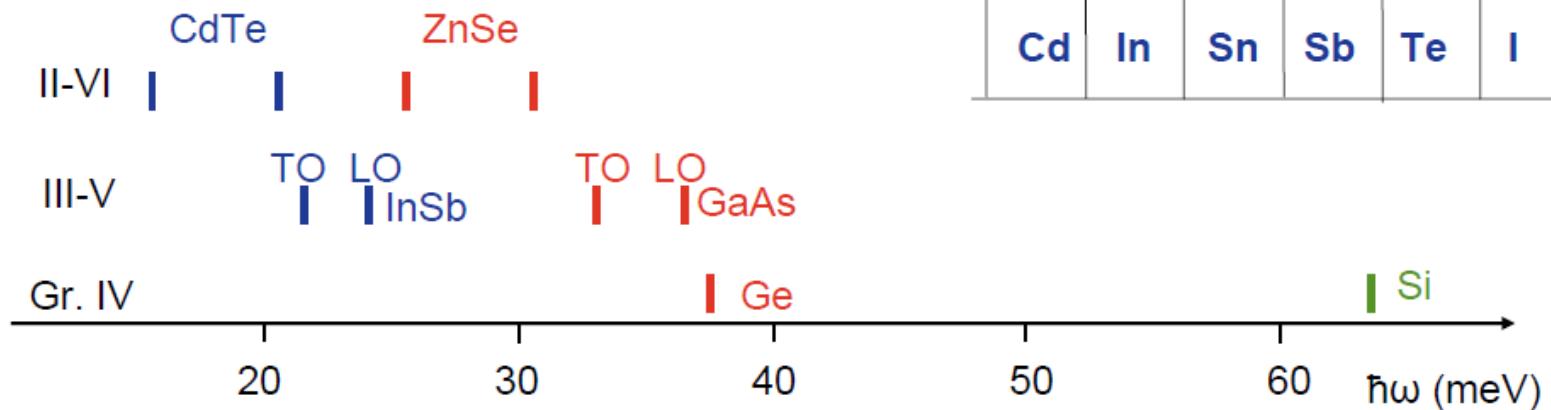
→ sinnvolle Def.: **Quasi-Impuls** = $\hbar \mathbf{k}$

außerdem: weil \mathbf{k} nur eindeutig bis auf $\pm n \cdot 2\pi/a$: $\hbar \mathbf{k} \sim \hbar \mathbf{k} \pm n \cdot \hbar 2\pi/a$

d.h. für **Quasi-Impulserhaltung**: statt $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ ergibt sich: **$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$** .

VI.5.3 Zahlenwerte: Phononfrequenzen

hier: Werte bei $k = 0$, d.h. im Zentrum der BZ
bestimmt mittels IR- und Ramanspektroskopie

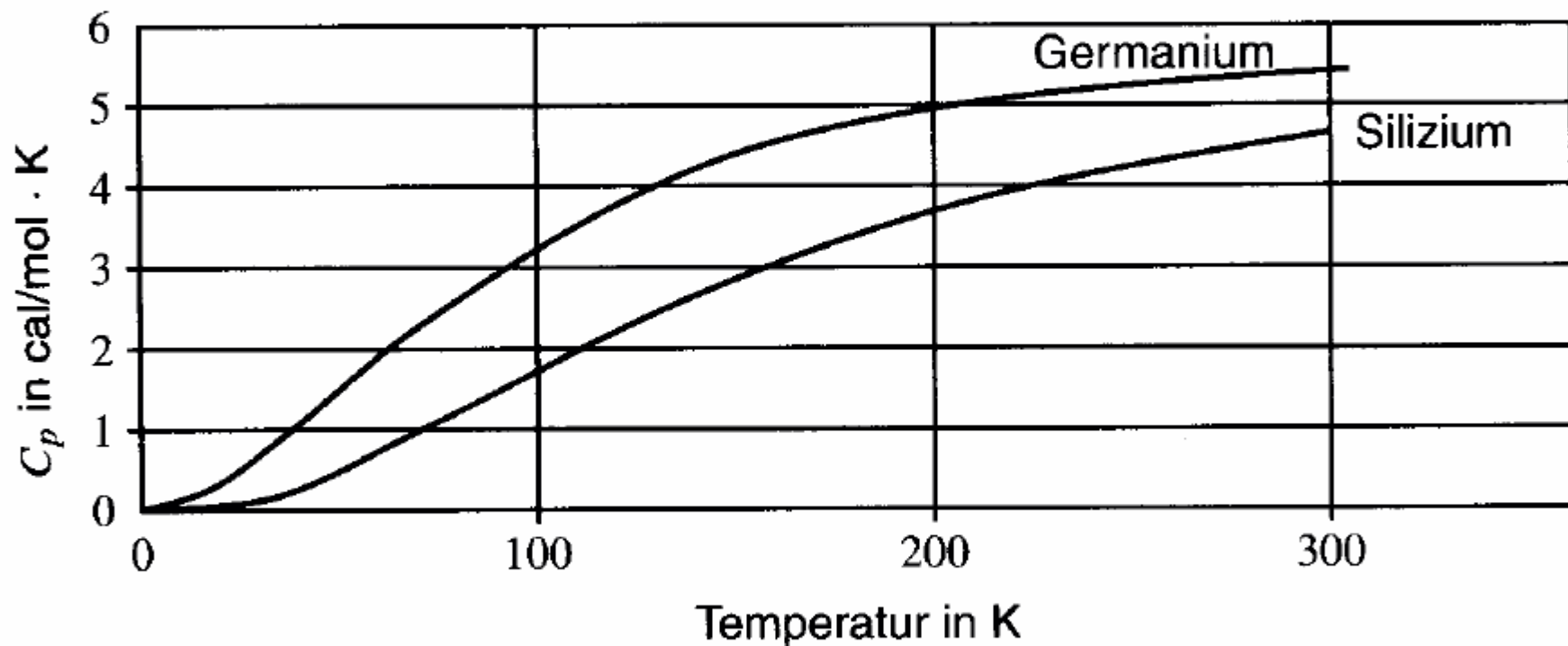


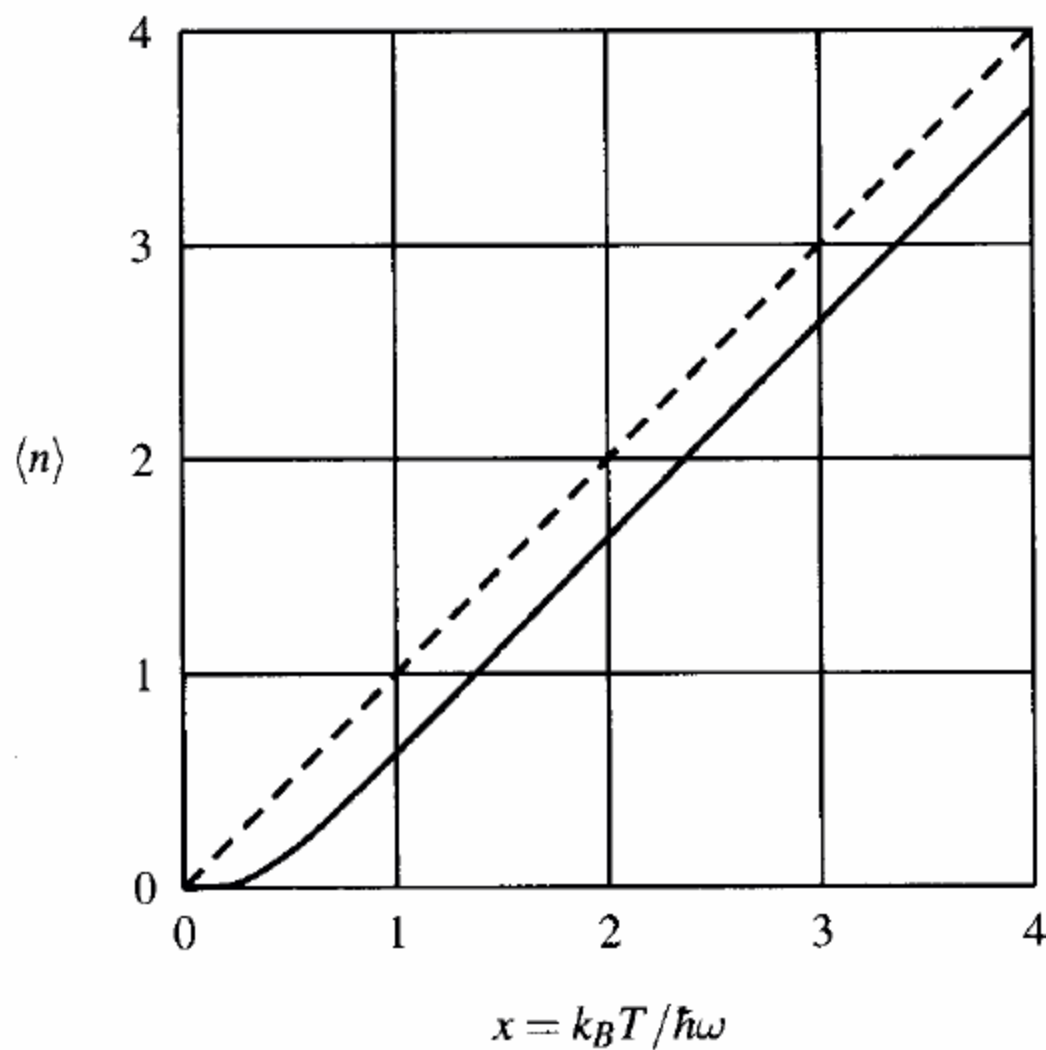
	B	C	N	O	F
	Al	Si	P	S	Cl
Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
Cd	In	Sn	Sb	Te	I

- Trends:
- (i) in Gruppe IV $\omega_{LO} = \omega_{TO}$ wg. kovalenter Bindung
keine zusätzliche E-Feldkräfte für LO
in Verbindungen $\omega_{LO} > \omega_{TO}$
 - (ii) Abnahme der Frequenz mit zunehmender Masse (vgl. $\omega = (k/\mu)^{1/2}$)
 - (iii) mit steigender Polarität (III-V \rightarrow II-VI): Zunahme Abstand $\omega_{LO} - \omega_{TO}$

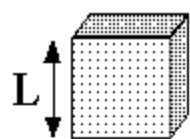
Spezifische Wärme von Ge und Si

109





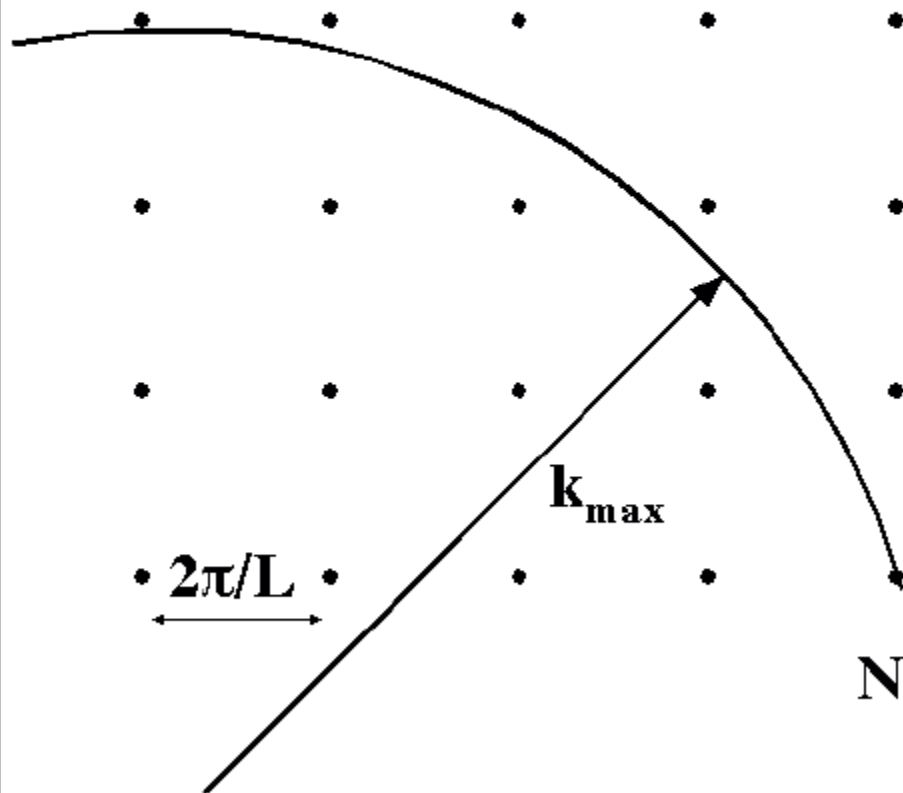
Zustände im k-Raum



Kristall

$$L \gg a$$

periodische Randbedingungen

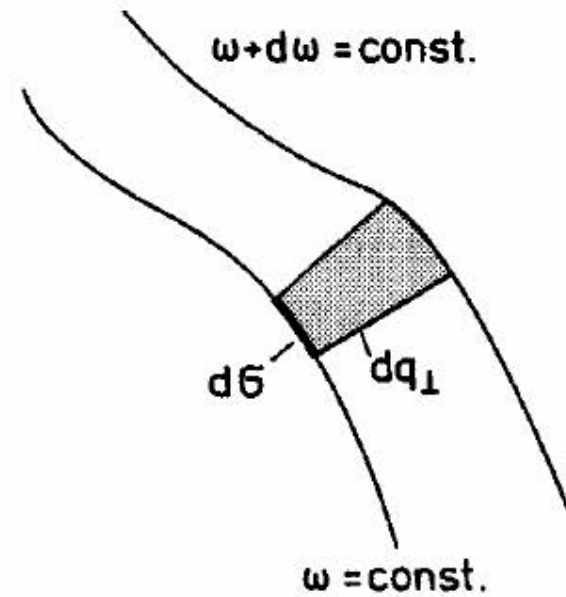
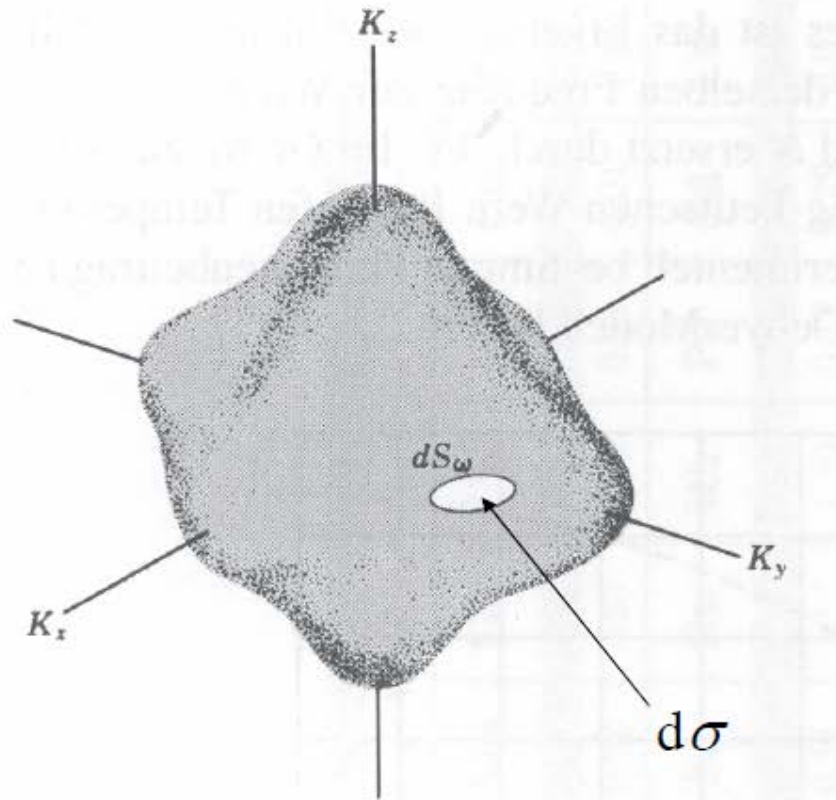


Zustände
mit $k < k_{\max}$

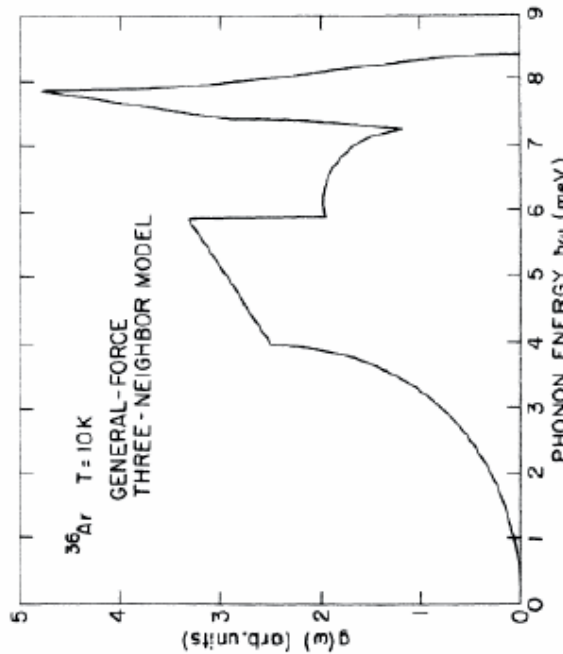
$$N = \frac{4\pi}{3} k_{\max}^3 \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3$$

Dispersionsflächen in 3D

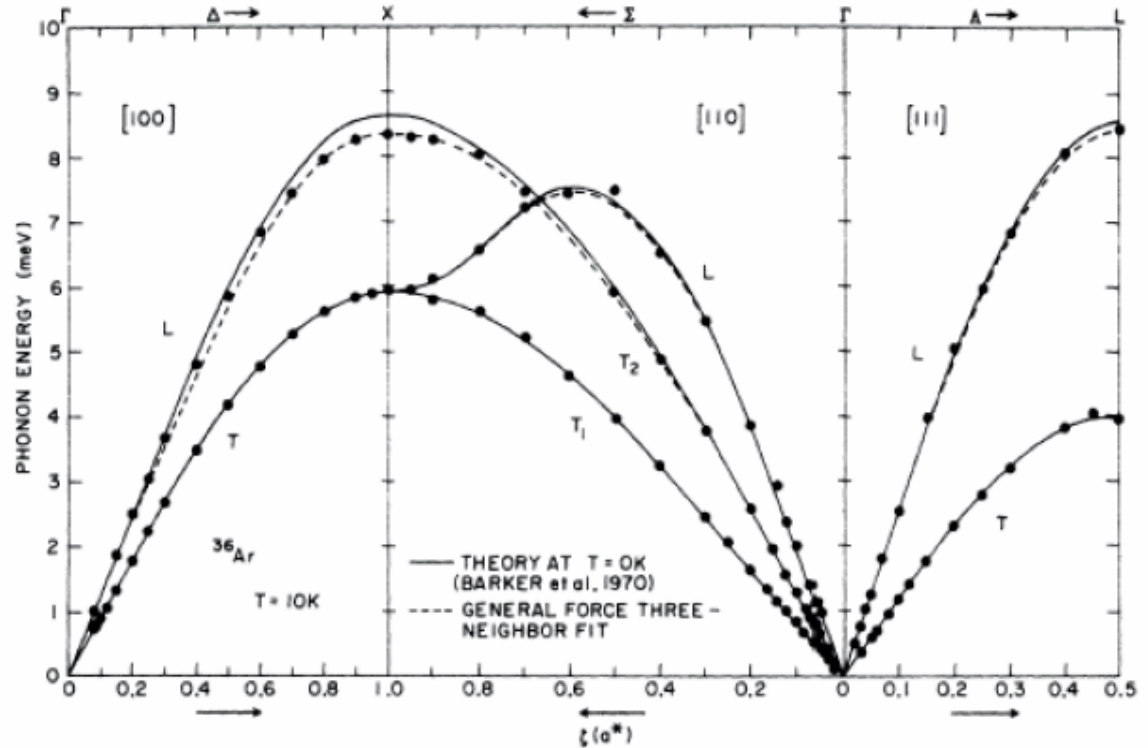
111



festes ^{36}Ar , fcc, Neutronenstreuung



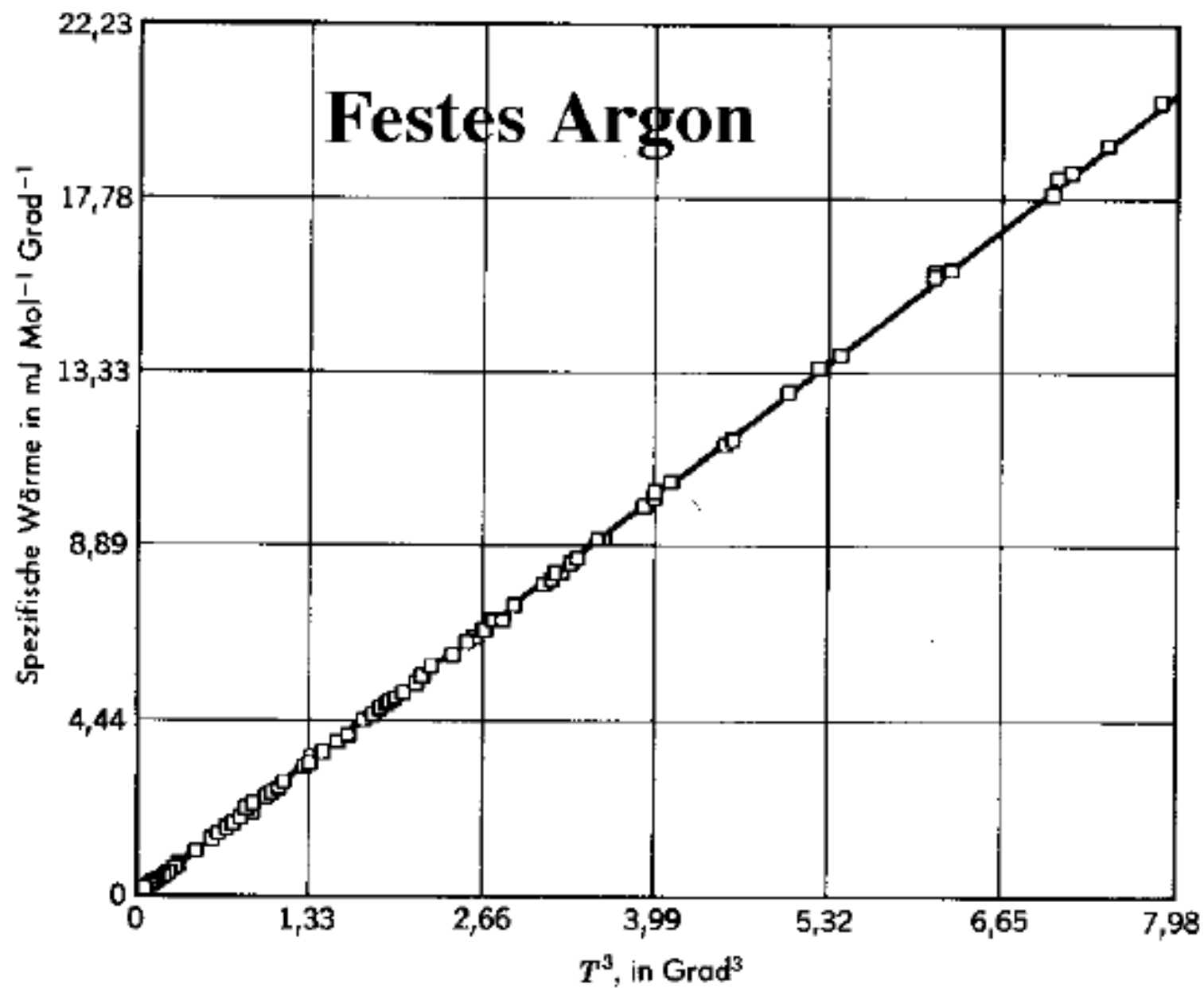
Zustandsdichte



Dispersionsrelation

Y. Fujii *et al.*,
Phys. Rev. B **10**, 3647 (1974)

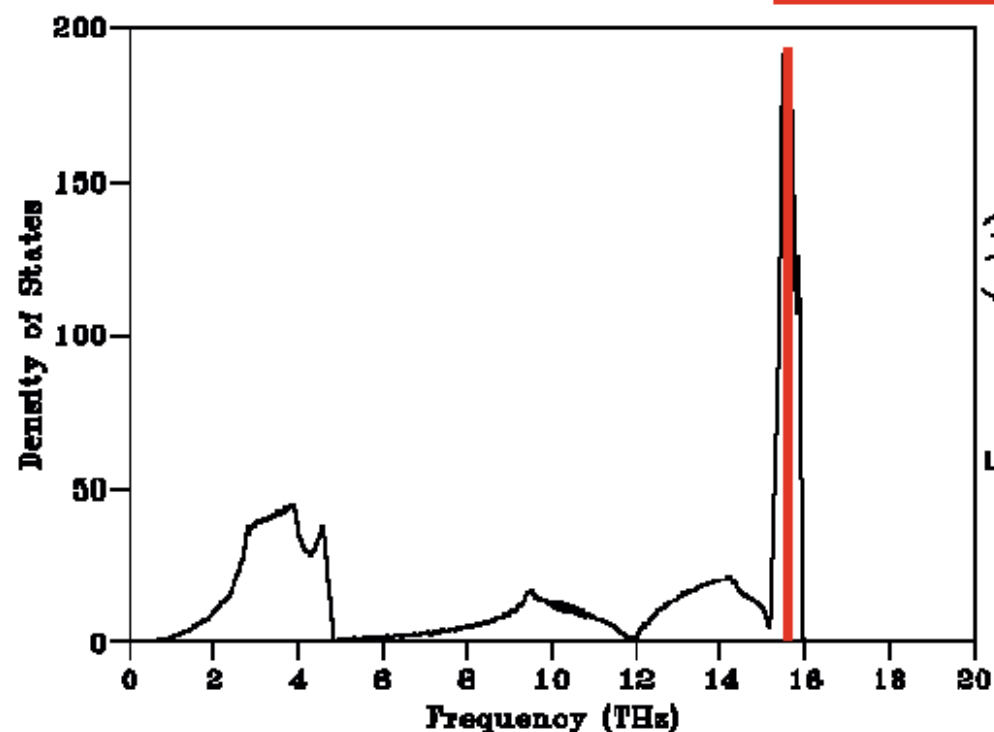
Festes Argon



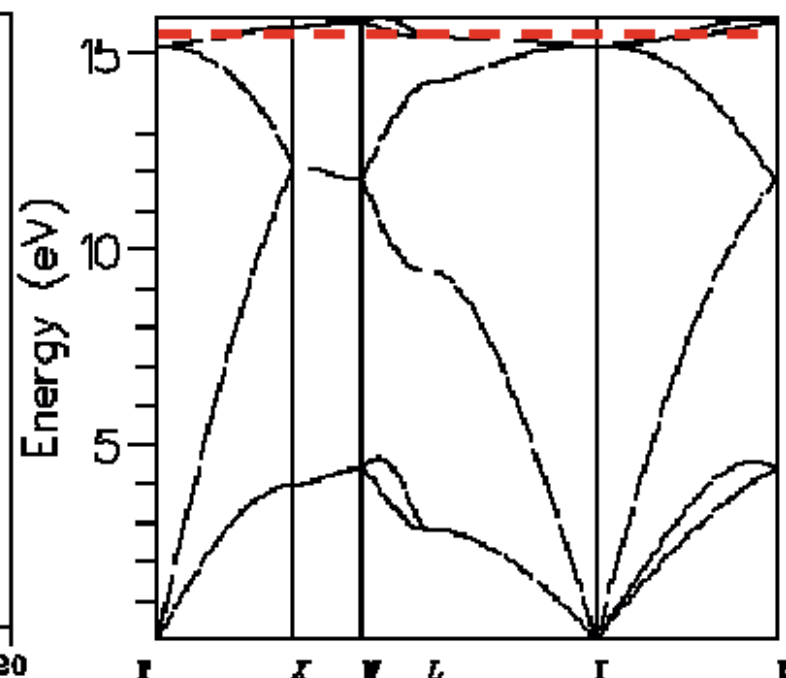
Zustandsdichte von Diamant

113

Einstein-Modell



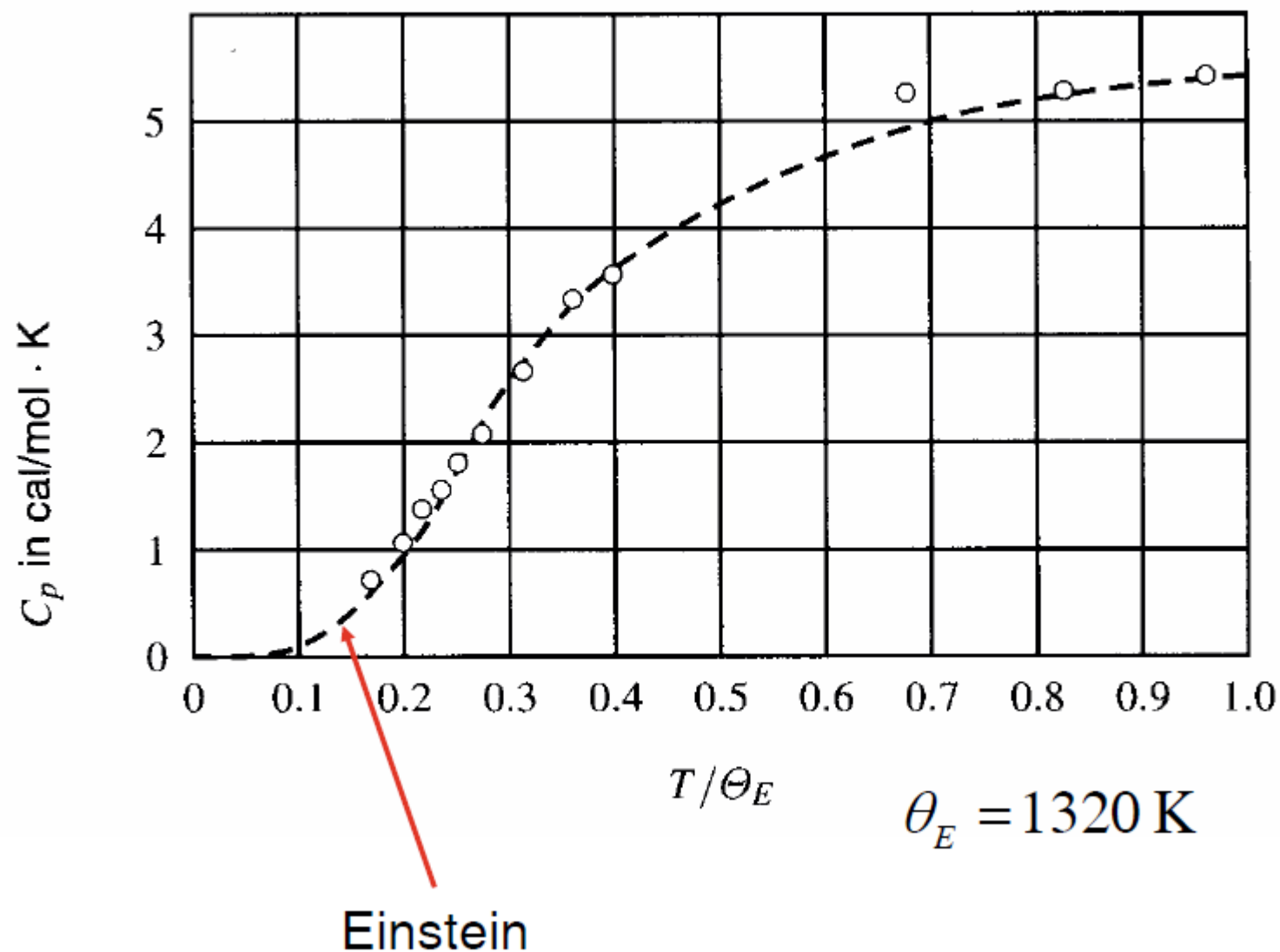
Zustandsdichte

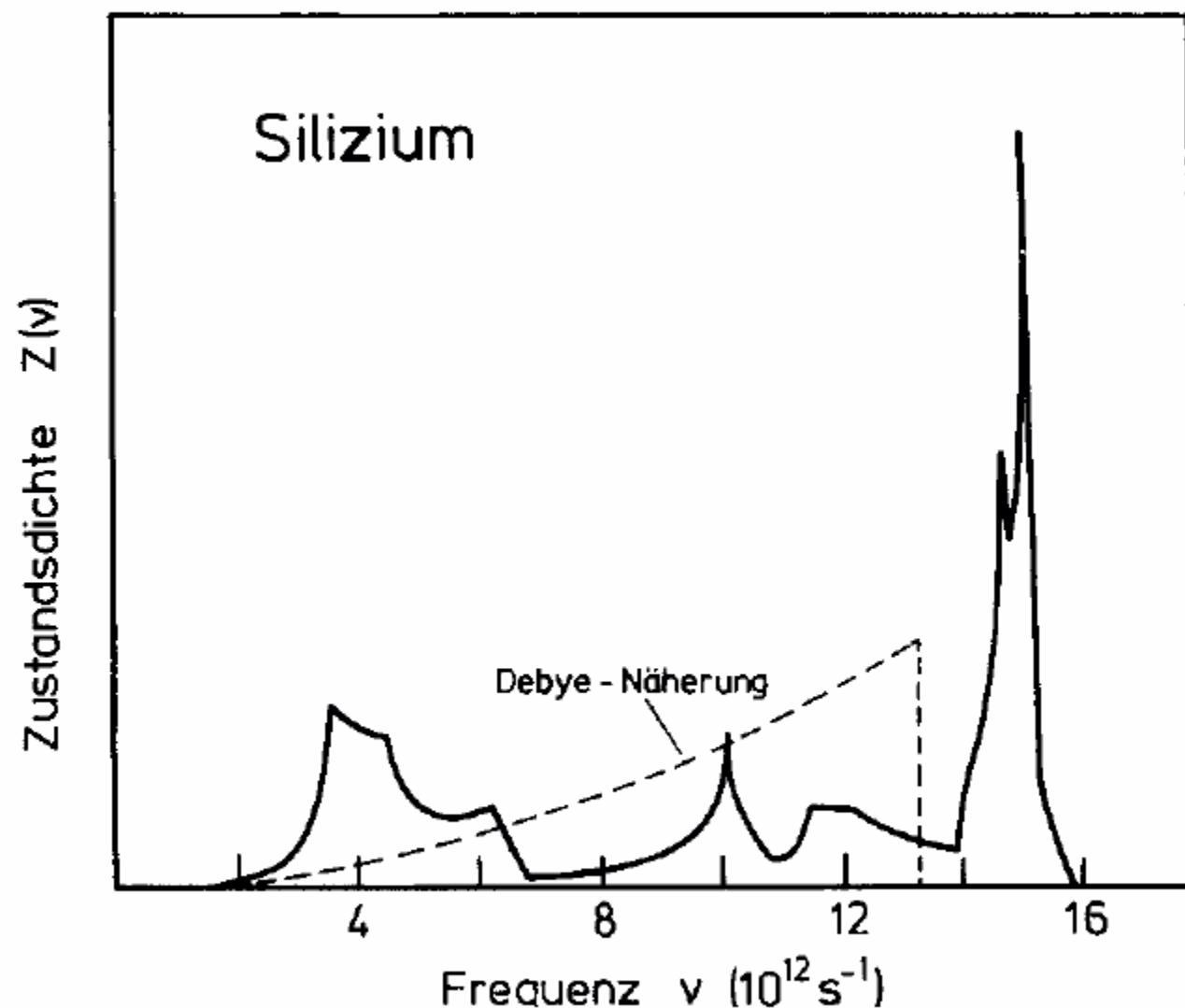


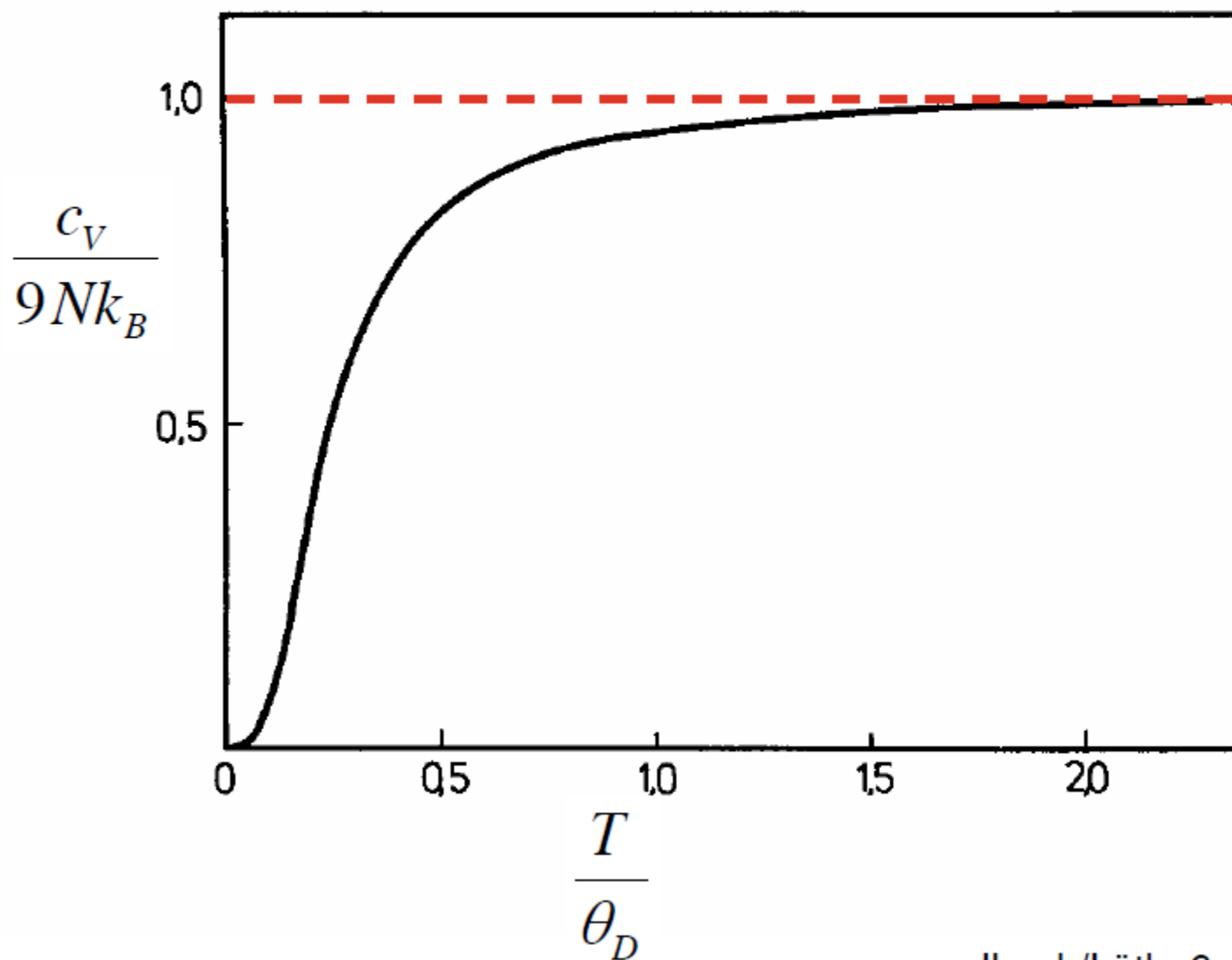
Dispersionsrelation

Spezifische Wärme von Diamant

115







$$c_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1 \right]^2}$$

Einstein-Temperatur $\theta_E = \frac{\hbar \omega_E}{k_B}$

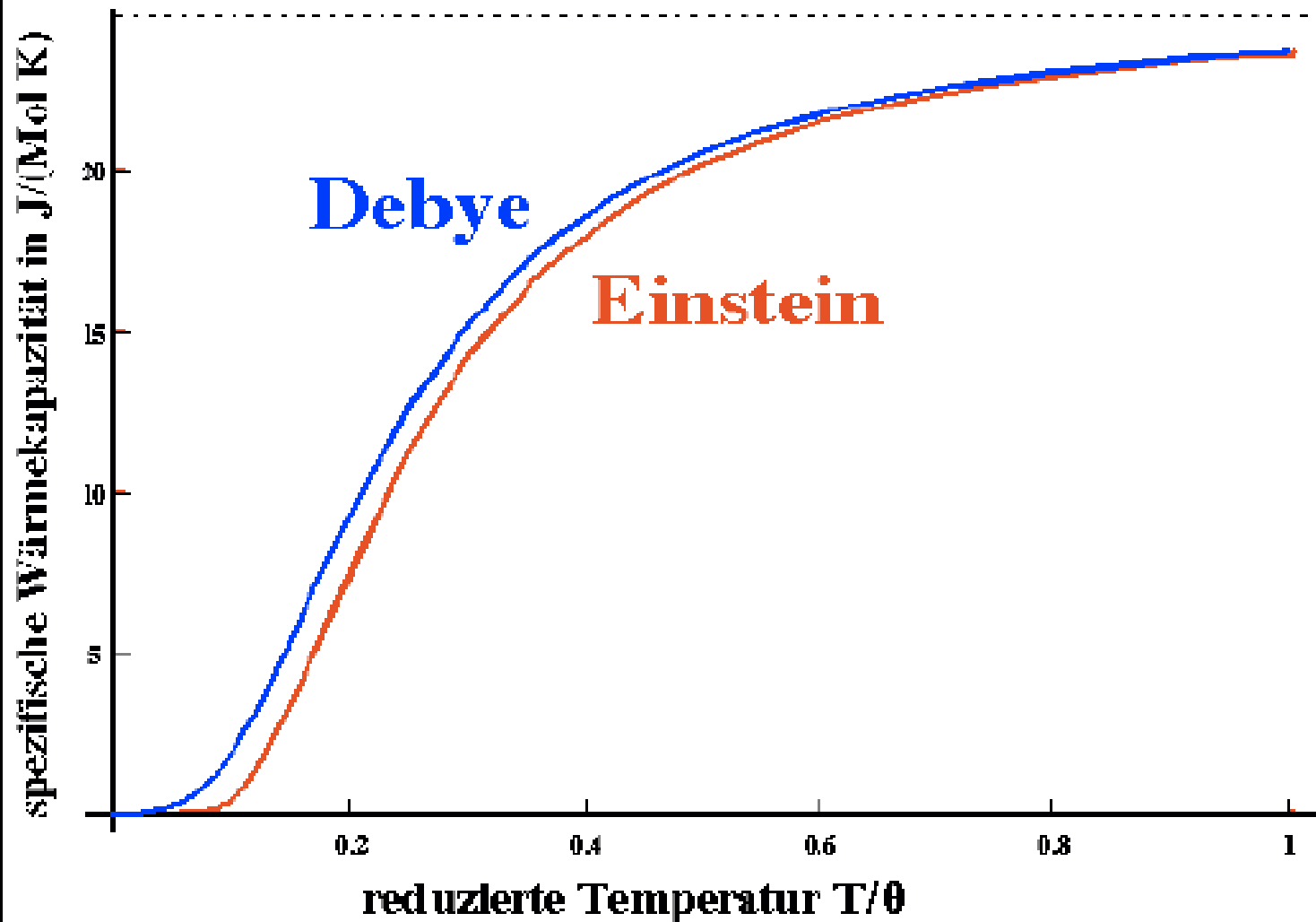
• hohe Temperatur $T \gg \theta_E$

$$\Rightarrow c_V = 3Nk_B$$

• tiefe Temperatur $T < \theta_E$

$$\Rightarrow c_V \propto \exp\left(-\frac{\theta_E}{T}\right) ; \text{ aber Exp. } c_V \propto T^3$$

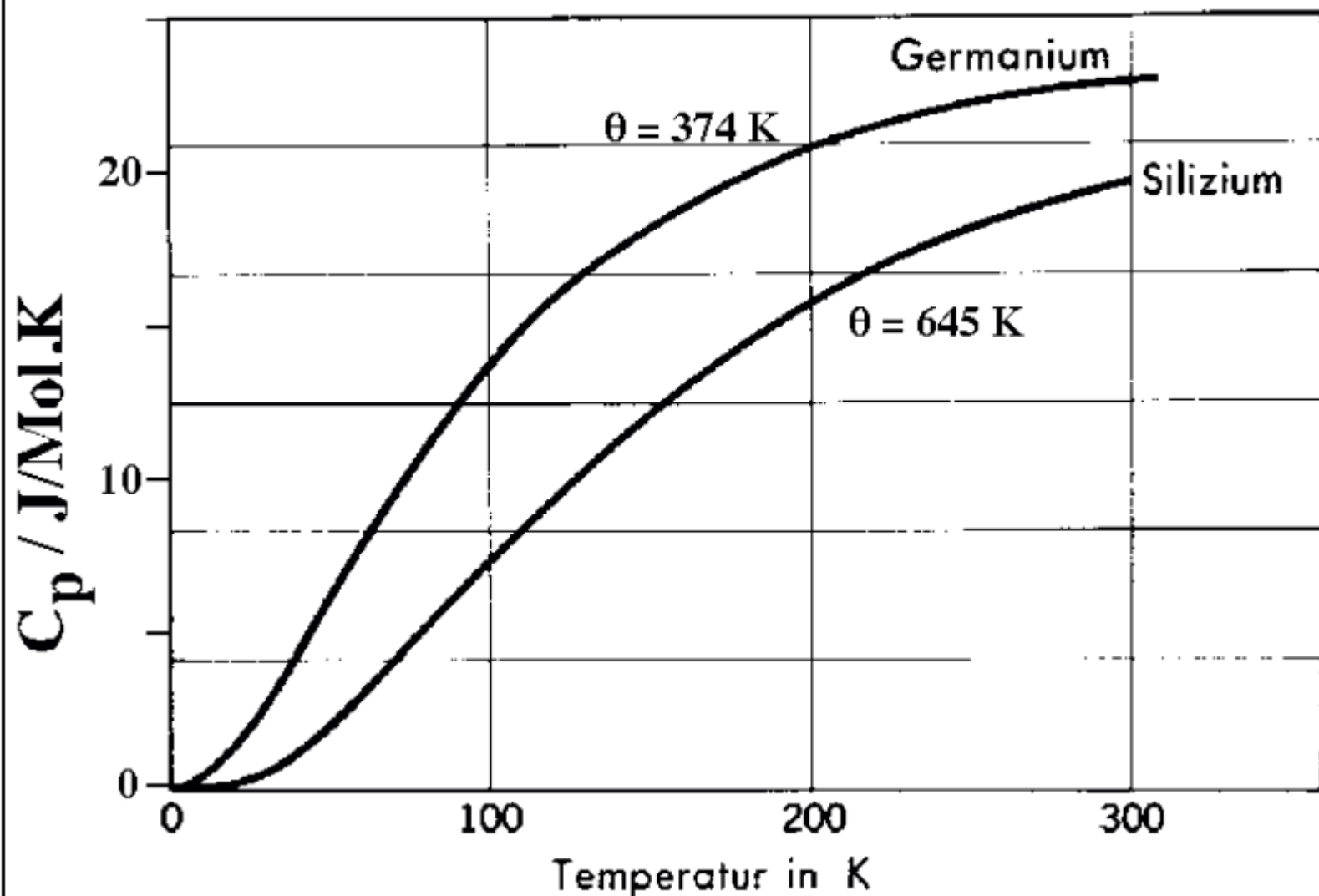
Vergleich Einstein / Debye

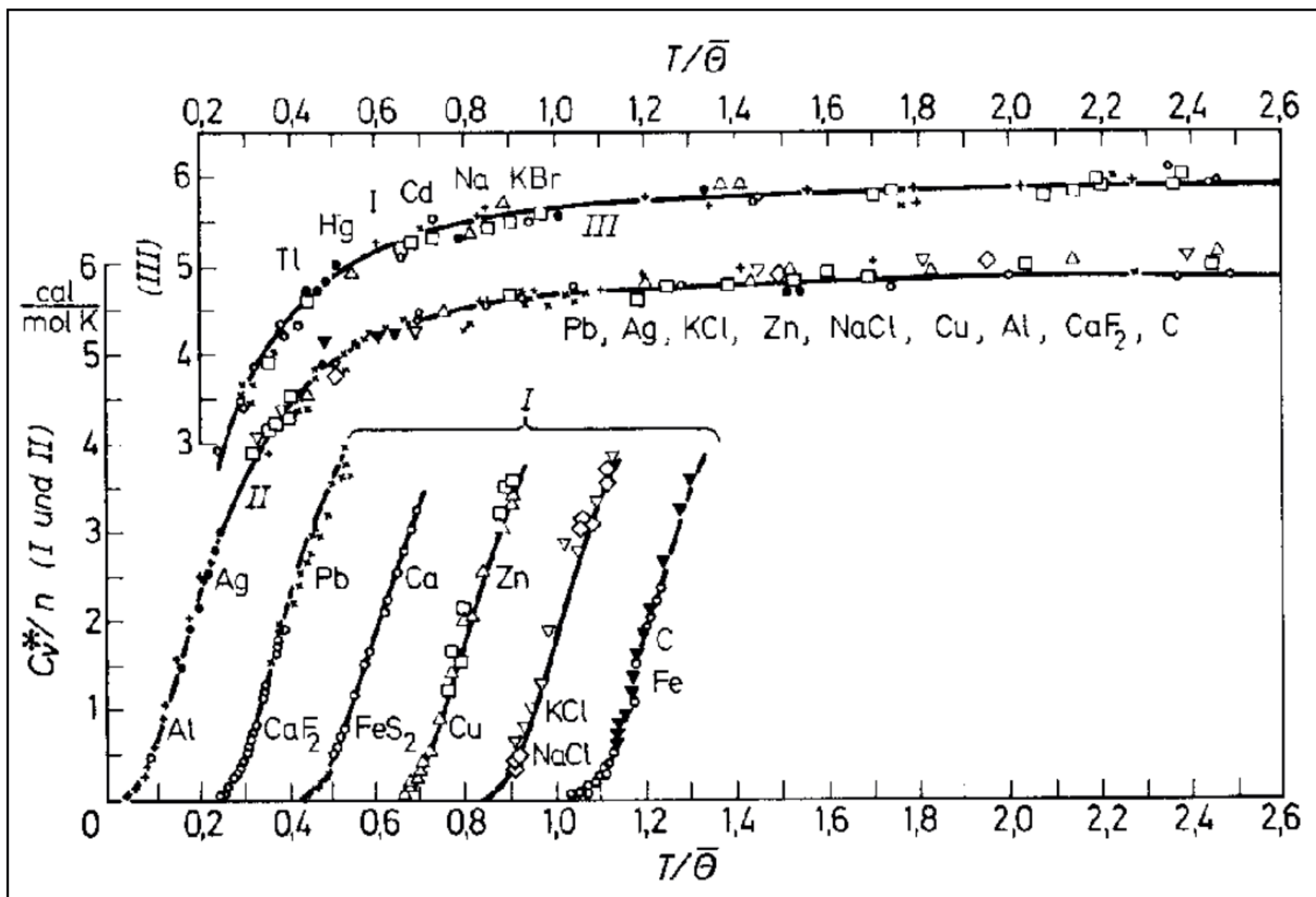


Debye-Temperatur und Wärmeleitfähigkeit

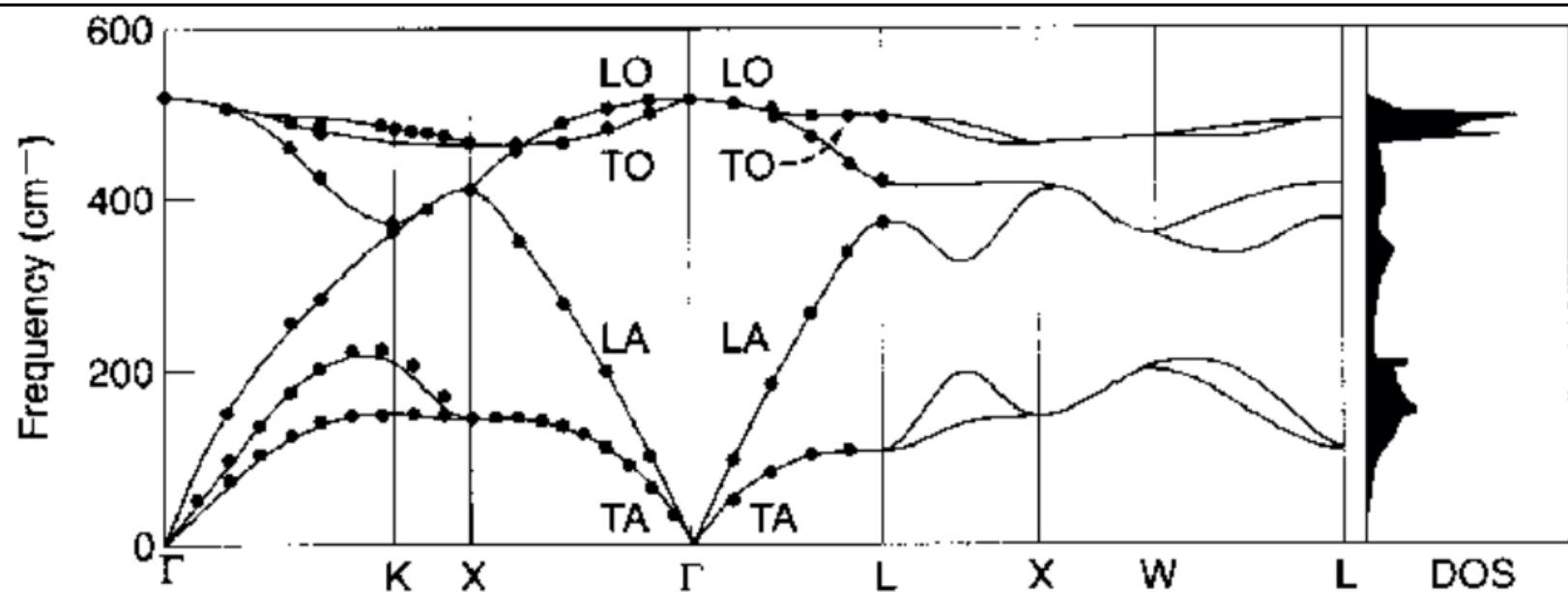
Debye-Temperatur und Wärmeleitfähigkeit												B	C	N	O	F	Ne																												
Li 344 0.85	Be 1440 2.00												2230 1.29				75																												
Na 158 1.41	Mg 400 1.56	Tieftemperaturgrenze von θ , in Kelvin Wärmeleitzahl bei 300 K, in $\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-1}$										428 2.37	645 1.48				92																												
K 91 1.02	Ca 230	Sc 360 0.16	Ti 420 0.22	V 380 0.31	Cr 630 0.94	Mn 410 0.08	Fe 470 0.80	Co 445 1.00	Ni 450 0.91	Cu 343 4.01	Zn 327 1.16	Ga 320 0.41	Ge 374 0.60	As 282 0.50	Se 90 0.02	Br 72	Kr 72																												
Rb 56 0.58	Sr 147	Y 260 0.17	Zr 291 0.23	Nb 275 0.54	Mo 450 1.38	Tc 410 0.51	Ru 600 1.17	Rh 480 1.50	Pd 274 0.72	Ag 225 4.29	Cd 209 0.97	In 108 0.82	Sn _w 200 0.67	Sb 211 0.24	Te 153 0.02	I 64	Xe 64																												
Cs 38 0.36	Ba 110	La β 142 0.14	Hf 252 0.23	Ta 240 0.58	W 400 1.74	Re 430 0.48	Os 500 0.88	Ir 420 1.47	Pt 240 0.72	Au 165 3.17	Hg 71.9	Tl 78.5 0.46	Pb 105 0.35	Bi 119 0.08	Po	At	Rn																												
Fr	Ra	Ac	<table><tr><td>Ce 110 0.11</td><td>Pr 100 0.12</td><td>Nd 100 0.16</td><td>Pm</td><td>Sm 100 0.13</td><td>Eu</td><td>Gd 200 0.11</td><td>Tb 100 0.11</td><td>Dy 210 0.11</td><td>Ho 100 0.16</td><td>Er 100 0.14</td><td>Tm 100 0.17</td><td>Yb 120 0.35</td><td>Lu 210 0.16</td></tr><tr><td>Th 163 0.54</td><td>Pa</td><td>U 207 0.28</td><td>Np 100 0.06</td><td>Pu 100 0.07</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td></tr></table>															Ce 110 0.11	Pr 100 0.12	Nd 100 0.16	Pm	Sm 100 0.13	Eu	Gd 200 0.11	Tb 100 0.11	Dy 210 0.11	Ho 100 0.16	Er 100 0.14	Tm 100 0.17	Yb 120 0.35	Lu 210 0.16	Th 163 0.54	Pa	U 207 0.28	Np 100 0.06	Pu 100 0.07	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
Ce 110 0.11	Pr 100 0.12	Nd 100 0.16	Pm	Sm 100 0.13	Eu	Gd 200 0.11	Tb 100 0.11	Dy 210 0.11	Ho 100 0.16	Er 100 0.14	Tm 100 0.17	Yb 120 0.35	Lu 210 0.16																																
Th 163 0.54	Pa	U 207 0.28	Np 100 0.06	Pu 100 0.07	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																

Wärmekapazität unterhalb der Debye-Temperatur

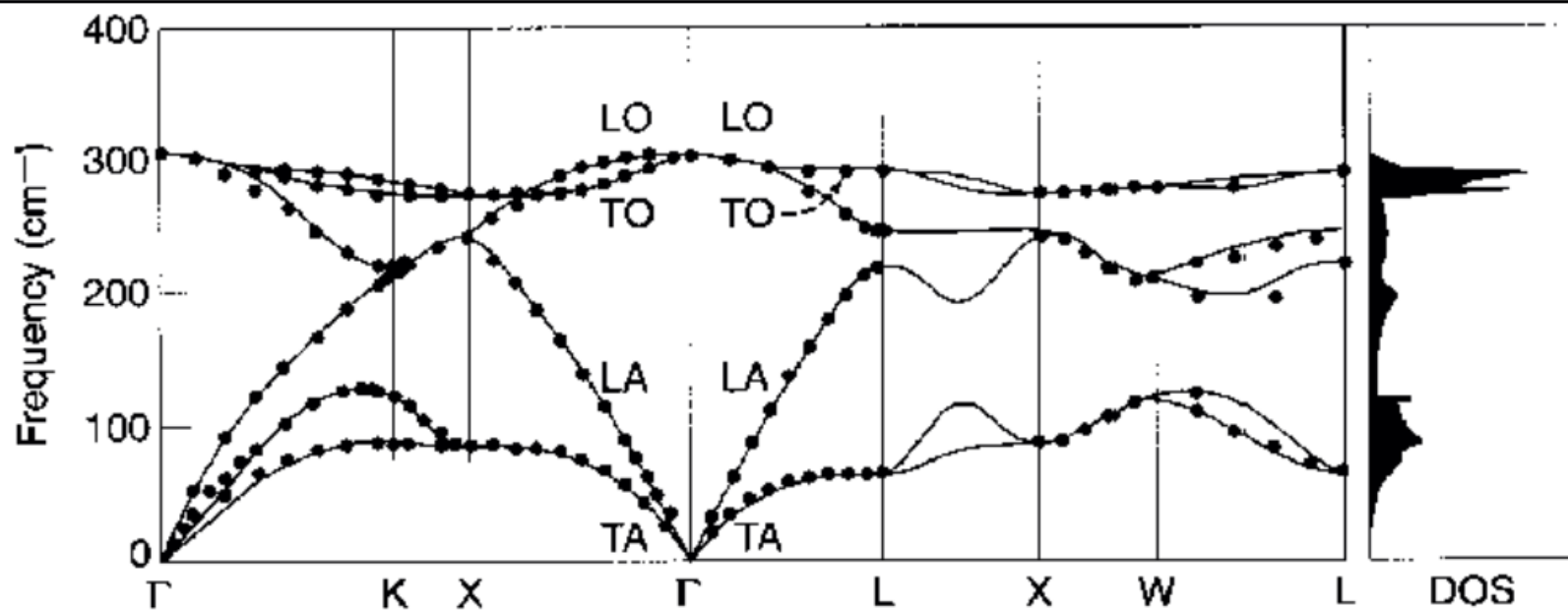


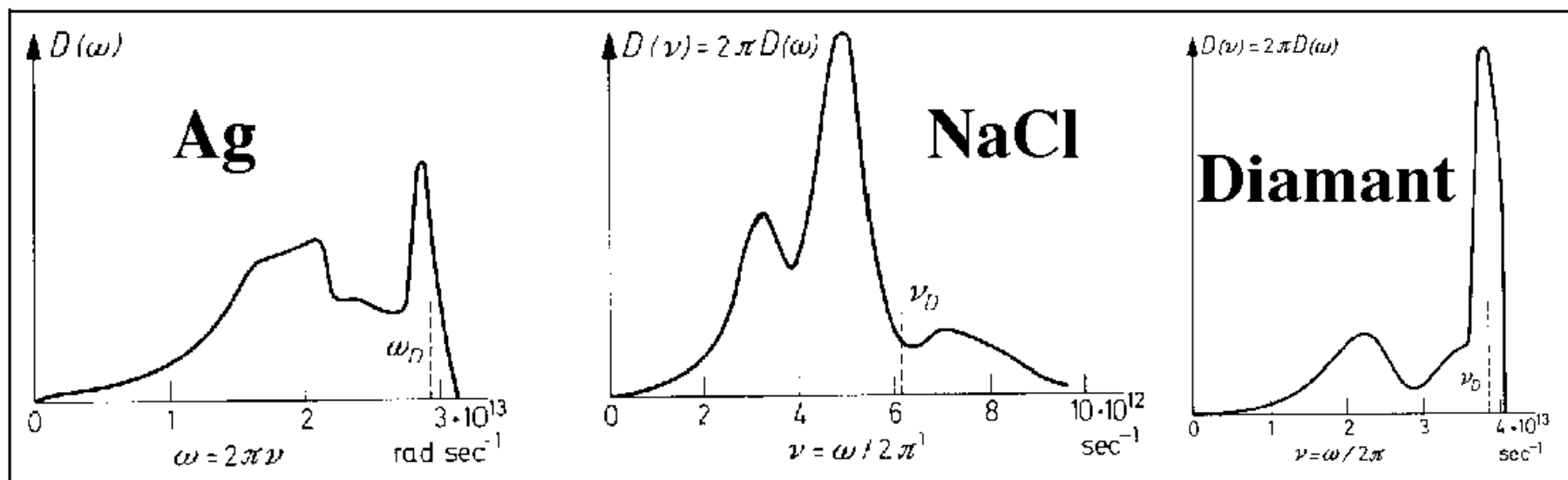


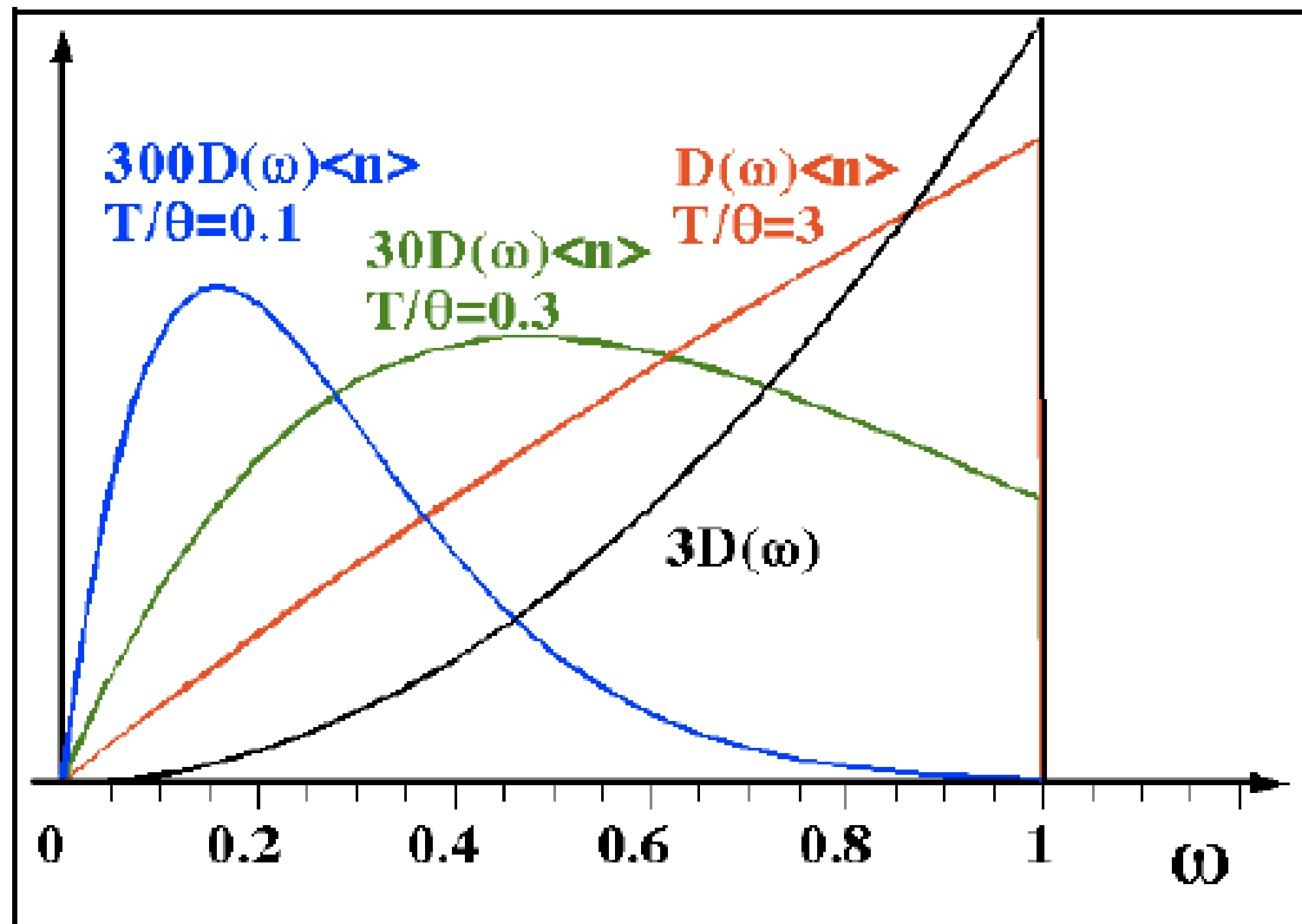
Si



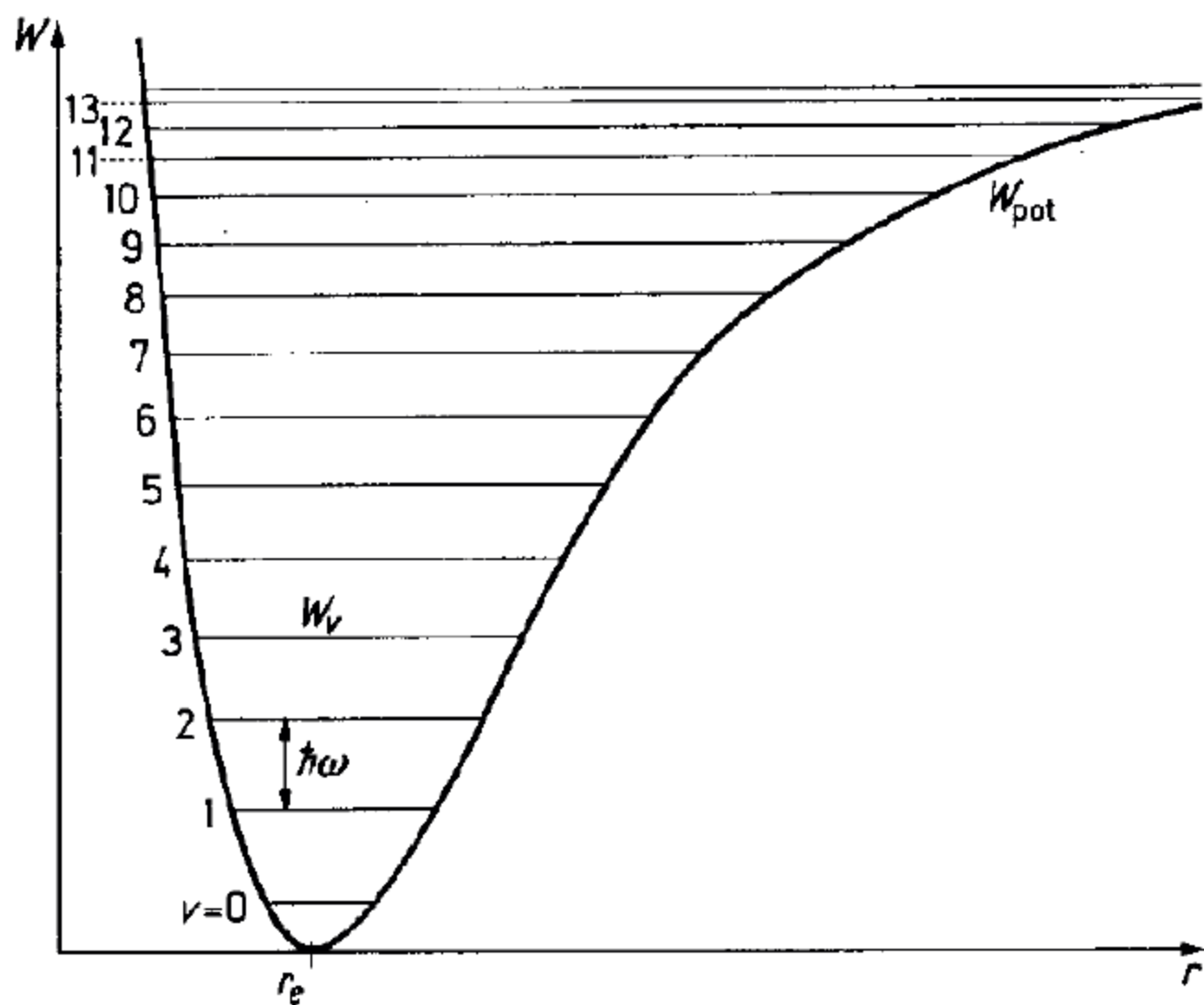
Ge



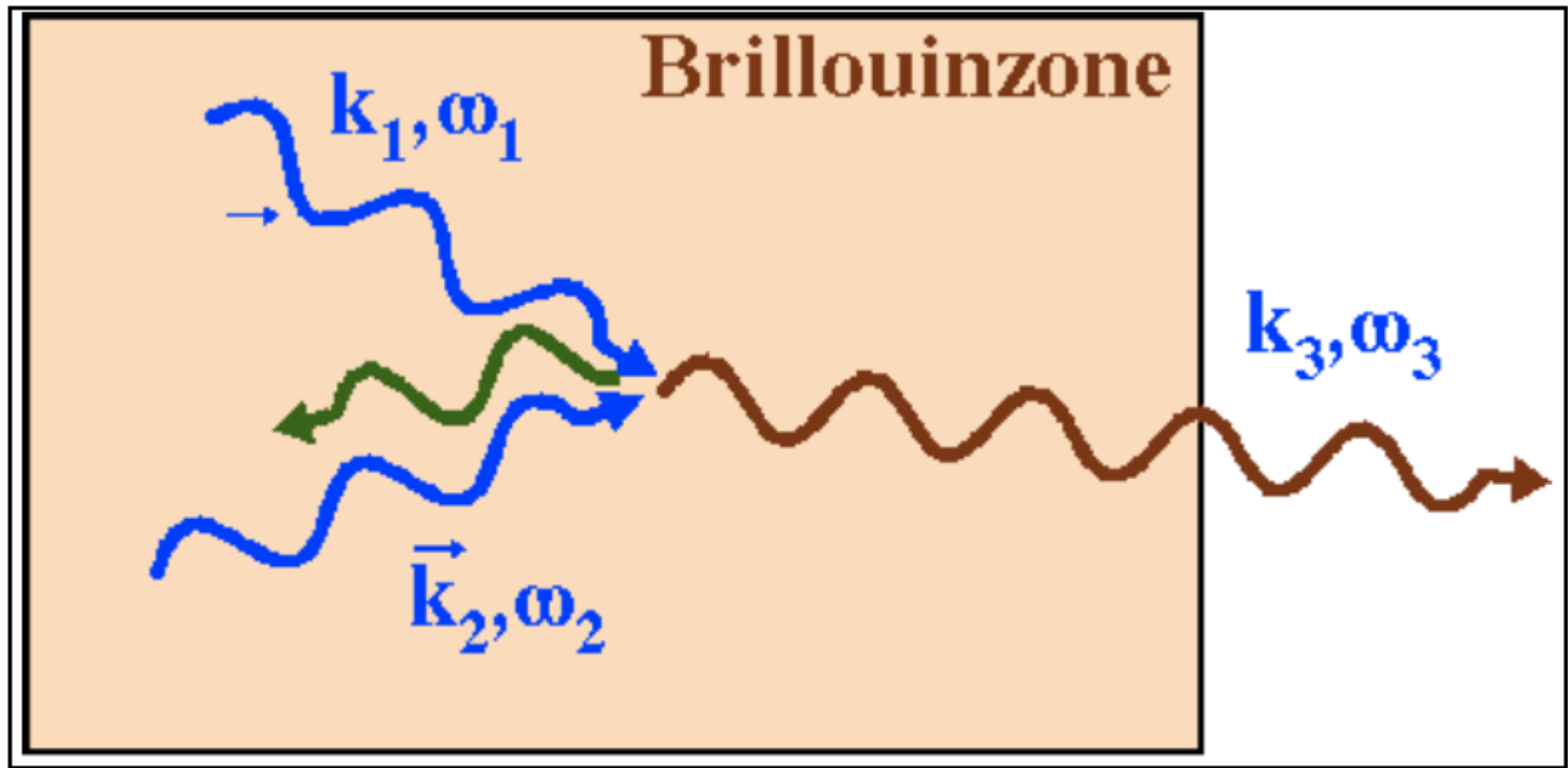




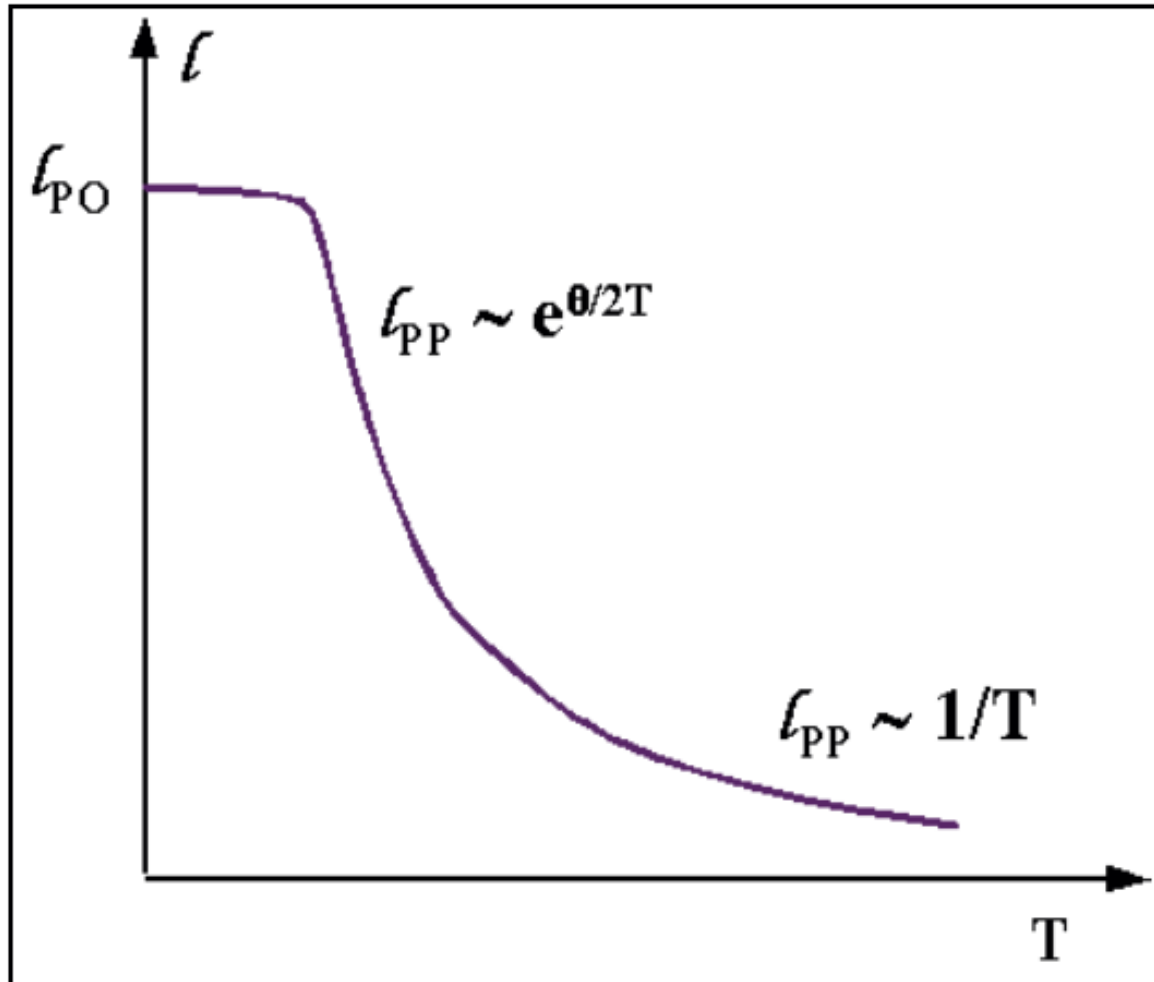
Anharmonisches Potenzial



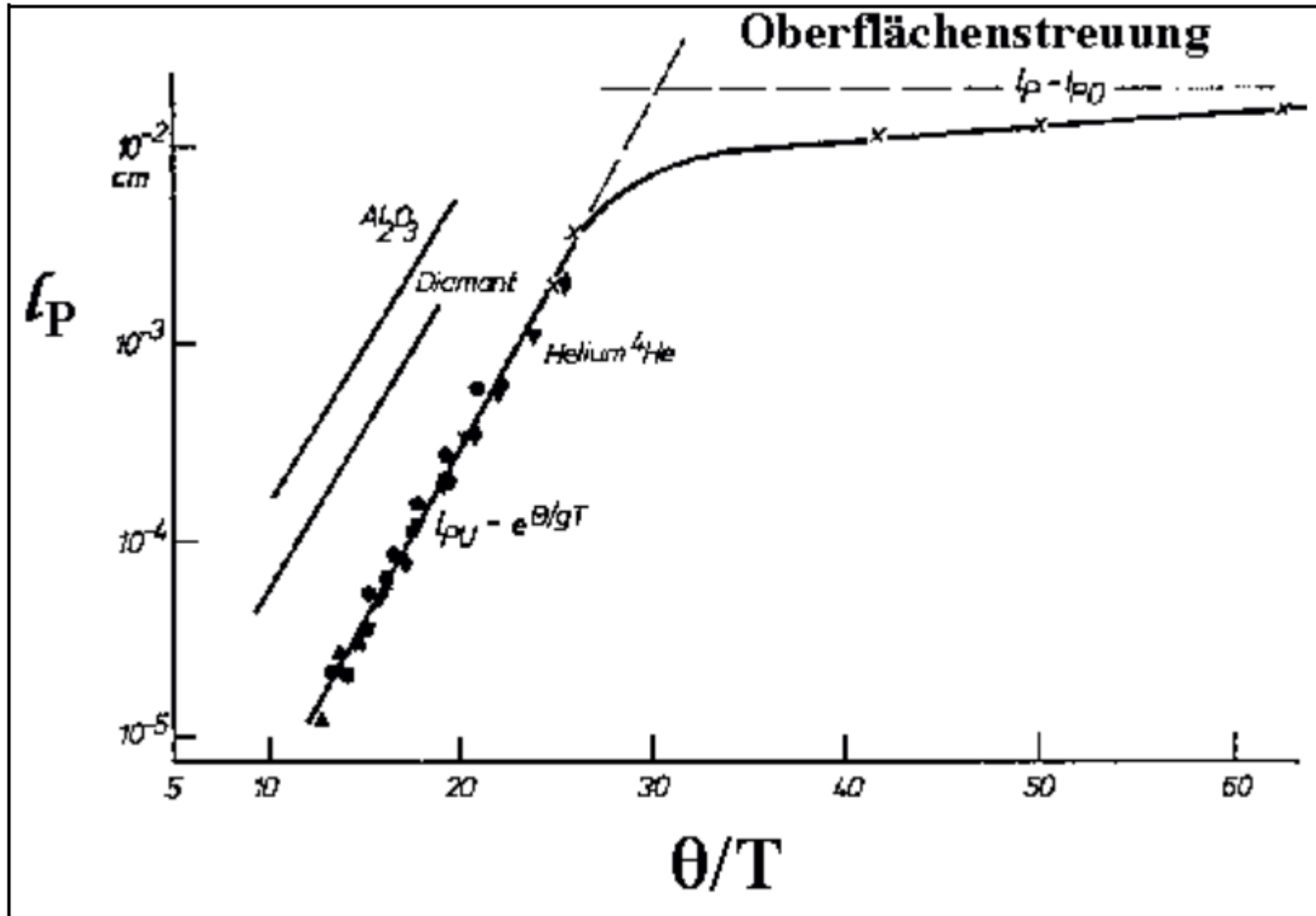
Phononenstreuung und Umklapp-Prozesse



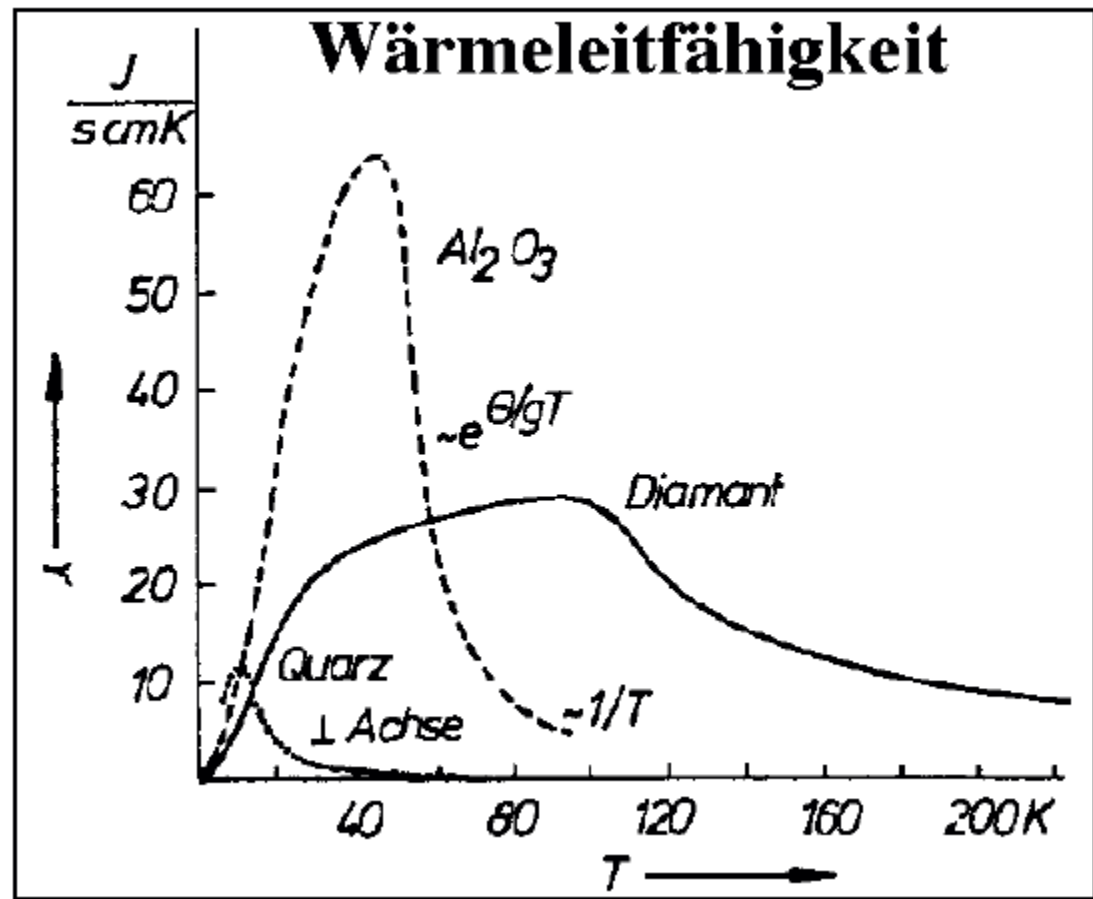
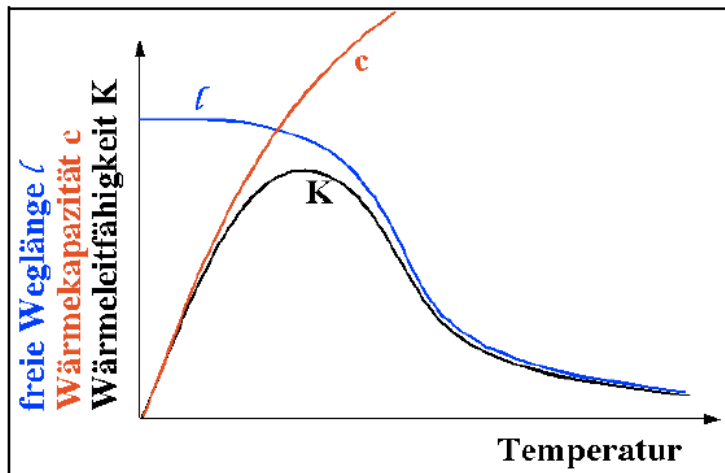
Mittlere Freie Weglänge, T groß



Mittlere freie Weglänge ℓ klein



Wärmeleitfähigkeit



Beiträge zur Wärmeleitung

