

lichkeitsabnahme ist bei symmetrisch vorgespannter Korngrenze größer als bei einseitigem Anlegen einer Vorspannung. Auch Messungen der transversalen magnetischen Widerstandsänderung führen zu dem Schluß, daß mit zunehmender Spannungsdifferenz zwischen Korngrenze und Kristall die Beweglichkeit reduziert wird. Die Meßresultate lassen sich zwanglos deuten, wenn man annimmt, daß die mittlere freie Weglänge der Defektelektronen vorwiegend durch unelastische Zusammenstöße mit der Korngrenze bestimmt wird; durch Anlegen einer Vorspannung wird die mittlere freie Weglänge reduziert. Die experimentellen Ergebnisse lassen sich befriedigend mit Hilfe einer vereinfachten Theorie beschreiben, die die Anwendbarkeit der BOLTZMANN-Statistik voraussetzt. Es war möglich, eine mittlere

Dichte \bar{p} der freien Defektelektronen an der Korngrenze abzuschätzen. Der mittlere Wert von \bar{p} liegt niedriger als ein aus HALL-Effekt-Daten bestimmter. Es erscheint nicht ausgeschlossen, daß der Unterschied wenigstens zum Teil dadurch bedingt wird, daß der Zusammenhang zwischen reduziertem HALL-Koeffizienten und Flächendichte der Ladungsträger komplizierter ist als angenommen wurde.

Ein Teil der hier mitgeteilten Untersuchungen wurde an der University Illinois, Urbana, USA, ausgeführt. Für die Bereitstellung der Einrichtungen des Kälte-laboratoriums der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt danke ich Herrn Dr. W. RÜHL. Den Herren Prof. J. BARDEEN und Prof. M. KOHLER bin ich zu Dank verpflichtet für das Interesse, das sie an dieser Arbeit bekundeten, sowie J. M. DRIVER, R. M. WORK und H. J. ENGELMANN für ihre technische Assistenz.

Die Normalprozesse und ihr Einfluß auf die Gitterwärmeleitfähigkeit in Festkörpern mit Stufenversetzungen

HELMUT BROSS, PETER GRUNER und PETER KIRSCHENMANN

Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart
und Max-Planck-Institut für Metallforschung Stuttgart

(Z. Naturforschg. 20 a, 1611—1625 [1965]; eingegangen am 31. Juli 1965)

Es wird ein Formalismus entwickelt, mit dem man den Einfluß der Wechselwirkung der Gitterschwingungen untereinander auf die Gitterwärmeleitfähigkeit zahlenmäßig behandeln kann. In der niedrigsten Ordnung in der Anharmonizität und der Störungsrechnung werden bei einem Streuprozeß zwei Phononen vernichtet und ein drittes erzeugt oder umgekehrt. Aus den Erhaltungssätzen für Energie und Impuls folgt, daß man zwei Arten von solchen Dreiphononenprozessen unterscheiden kann. Prozesse, bei denen die Energie aller beteiligten Phononen miteinander vergleichbar ist, und solche, bei denen die Energie zweier Phononen wesentlich größer als die des dritten Phonons ist. Es wird gezeigt, daß durch die zuletzt genannten Prozesse bei langen Wellen keine Divergenzen bei der Lösung der BOLTZMANN-Gleichung mehr auftreten können. Zur Lösung des Transportproblems wird ein Variationsverfahren benützt. Die dabei für Dreiphononenprozesse charakteristischen Größen werden berechnet. Dieses Verfahren gestattet in einfacher Weise das Zusammenwirken der Streuung der Gitterwellen aneinander und an statischen Gitterfehlern zu behandeln, das für die Einstellung des thermischen Gleichgewichts wichtig ist. Als Beispiel hierfür wird der Fall gerader Stufenversetzungen untersucht. Alle numerischen Rechnungen werden für Kupfer durchgeführt.

1. Einleitung

Seit den Überlegungen von PEIERLS ist das Zustandekommen der endlichen Gitterwärmeleitfähigkeit in einem Festkörper prinzipiell verstanden. Neben der Wechselwirkung der Gitterschwingungen mit den Leitungselektronen in Metallen führt vor allem ihre Wechselwirkung untereinander, die durch die Anharmonizitäten des Gitterpotentials bedingt ist, zu einem nichtverschwindenden Wärmewiderstand. In der niedersten Ordnung der Anharmonizität können zwei Streumechanismen unterschieden werden: 1. Die Streuung der Gitterschwingungen an statischen

Gitterfehlern, bei der zwischen zwei verschiedenen Gitterschwingungen gleicher Frequenz ein Phonon ausgetauscht wird und 2. Drei-Phononen-Prozesse, bei denen zwei Gitterschwingungen jeweils ein Phonon an eine dritte Gitterschwingung abgeben oder bei denen der umgekehrte Vorgang abläuft. Bei einem solchen Prozeß müssen die Erhaltungssätze für den Quasiimpuls und die Energie

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{k}'' + \mathbf{R}^{(l)}, \quad (1.1)$$

$$\omega_{\mathbf{k}}^j + \omega_{\mathbf{k}'}^{j'} = \omega_{\mathbf{k}''}^{j''} \quad (1.2)$$

erfüllt sein. Hierbei bezeichnet $\omega_{\mathbf{k}}^j$ die Frequenz einer Gitterwelle mit Ausbreitungsvektor \mathbf{k} , j ihre Polari-



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

sation und $\mathfrak{R}^{(l)}$ einen reziproken Gittervektor. Nach PEIERLS¹ ist es üblich, Dreiphononenprozesse mit $\mathfrak{R}^{(l)} = 0$ als Normalprozesse und Prozesse mit $\mathfrak{R}^{(l)} \neq 0$ als Umklappprozesse zu bezeichnen. Da bei einem Normalprozeß der Gesamtimpuls des Systems erhalten bleibt, trägt er nicht unmittelbar zur Einstellung eines neuen stationären Zustands bei, wenn ein äußerer Temperaturgradient vorhanden ist. Ein nichtverschwindender Wärmewiderstand wird in einem unendlich ausgedehnten Kristall ohne Gitterfehler allein durch die Umklappprozesse bedingt. Man überzeugt sich an Hand von Gl. (1.1), daß bei einem Umklappprozeß alle drei Ausbreitungsvektoren größenordnungsmäßig mit einem reziproken Gittervektor vergleichbar sein müssen und daß deshalb die zugehörigen Frequenzen von der Größenordnung der DEBYESchen Grenzfrequenz sein werden. Dies führt dazu, daß bei tiefen Temperaturen der Wärmewiderstand exponentiell abfällt.

In diesem Temperaturgebiet wird der thermische Widerstand im wesentlichen durch die Streuung der Gitterschwingungen an den Fehlstellen und an den Begrenzungen des Kristalls bestimmt. Für diese Streuprozesse ist charakteristisch, daß durch sie der Gesamtquasiimpuls des Systems verändert wird, so daß sich unter dem Einfluß eines Temperaturgradienten ein neuer stationärer Zustand einstellen kann. Hieran sind aber auch Normalprozesse beteiligt, die somit mittelbar beitragen, den thermischen Widerstand zu erhöhen. In der vorliegenden Mitteilung wollen wir uns mit der Frage beschäftigen, wie man den zuletzt erwähnten Effekt besser als bisher^{2,3} berücksichtigen kann.

Durch die Erhaltungssätze (1) wird die Vielfalt der Drei-Phononen-Prozesse erheblich eingeschränkt – ein Problem, das von HERPIN⁴ ausführlich untersucht worden ist. Nach ihm sollen in einem atomistischen Medium, bei dem die Dispersionskurve $\omega(\mathfrak{f})$ in bezug auf die \mathfrak{f} -Achse konkav ist, nur Streuprozesse der Art

$$\begin{aligned} L + T &\rightleftharpoons L, \\ T + T &\rightleftharpoons L \end{aligned}$$

möglich sein, während Übergänge zwischen Wellen gleicher Polarisation ausgeschlossen sind. Die Überlegungen von HERPIN beruhen auf der Annahme, daß die Dispersionskurve eine Kurve im mathematischen Sinne ist, also eine infinitesimale Linienbreite besitzt. Dies ist jedoch in Wirklichkeit nicht der Fall, weil durch die Wechselwirkung der Gitterschwingungen untereinander ihre Lebensdauer begrenzt und damit wegen der HEISENBERGSchen Unschärferelation die Frequenzkurve verbreitert wird. Diese Stoßverbreiterung wirkt der Krümmung der Dispersionskurve vor allem im Gebiet langer Wellen entgegen und es werden dadurch auch Übergänge der Art

$$\begin{aligned} L + L &\rightleftharpoons L \\ T + T &\rightleftharpoons T \end{aligned} \quad \text{für } \omega < \omega_0$$

möglich, wobei der Wert von ω_0 sowohl von der Dispersion als auch von der Lebensdauer der angeregten Gitterschwingungen abhängig wird⁵. Bei der Untersuchung des thermischen Widerstandes im Temperaturgebiet $KT < \hbar \omega_0$ kann also von der Dispersion abgesehen werden und es ist, da $\hbar \omega_0 < K\Theta$ (Θ DEBYE-Temperatur) ist, sicherlich erlaubt, die Dreiphononenprozesse kontinuumstheoretisch zu behandeln. Wenn wir uns zudem auf ein isotropes Kontinuum beschränken, lassen sich sehr leicht Folgerungen aus den Erhaltungssätzen (1) ziehen, worauf wir im Abschnitt 2 weiter eingehen werden. Wir werden sehen, daß die Streuprozesse, durch die eine langwellige Gitterschwingung mit $\hbar \omega_l^i < KT$ mit den übrigen Schwingungen wechselwirken kann, in zwei Gruppen eingeteilt werden können, je nachdem die Frequenz $\hbar \omega_l^j$ des Reaktionspartners beschränkt oder nicht beschränkt ist. Der wesentliche Unterschied wird offenbar, wenn man die für einen Streuprozeß charakteristische Relaxationszeit⁶ ermittelt. Wie schon in einer früheren Arbeit⁵ erwähnt wurde, ergibt sich bei einem energetisch beschränkten Prozeß die Relaxationszeit proportional zu $\omega^{-4} T^{-1}$, während sie bei einem energetisch nichtbeschränkten Prozeß proportional zu $\omega^{-1} T^{-4}$ wird und somit die Größenordnung der effektiven Relaxationszeit be-

¹ R. PEIERLS, Ann. Phys. Leipzig **3**, 1055 [1929]. – Vgl. auch die zusammenfassenden Artikel: R. E. PEIERLS, Quantum Theory of Solids, Clarendon Press, Oxford 1955. – P. G. KLEMENS, in Solid State Physics, Vol. 7, Academic Press, 1955, New York 1958. – J. M. ZIMAN, Electrons and Phonons, Clarendon Press, Oxford 1960. – P. CARRUTHERS, Rev. Mod. Phys. **33**, 92 [1961].

² J. CALLAWAY, Phys. Rev. **113**, 1046 [1959]. – J. CALLAWAY u. H. C. BAEYER, Phys. Rev. **120**, 1149 [1960].

³ P. CARRUTHERS, l. c. ¹.

⁴ A. HERPIN, Ann. Phys. Paris **7**, 91 [1952].

⁵ H. BROSS, Phys. Status Solidi **2**, 481 [1962], im folgenden als I zitiert.

⁶ Unter Relaxationszeit wollen wir jene Zeit verstehen, in der sich eine über das thermische Gleichgewicht angeregte Welle wieder an den Gleichgewichtswert anpaßt.

stimmt. Energetisch unbeschränkte Prozesse sind bei transversalen Gitterschwingungen schon lange bekannt⁷. Bei longitudinalen Gitterschwingungen sind sie jedoch erst durch die vorher besprochene Stoßverbreiterung der Dispersionskurve möglich, die Prozesse der Art $L + L \rightleftharpoons L$ gestattet^{5, 8}.

Energetisch nicht beschränkte Prozesse spielen auch bei der Lösung der BOLTZMANNschen Transportgleichung eine wichtige Rolle. Durch sie wird die stationäre Verteilung bestimmt, die sich unter dem Einfluß eines äußeren Temperaturgradienten und der Streuprozesse der Gitterschwingungen einstellen wird. Wie die Überlegungen von POMERANCHUK⁹ und HERPIN⁴ zeigen, welche bei longitudinalen Gitterschwingungen nur energetisch beschränkte Prozesse zulassen, liefert die BOLTZMANNsche Transportgleichung für diese Polarisierung einen Ausdruck für die gestörte Verteilungsfunktion, der proportional zu ω^{-3} ist, so daß die langwelligen longitudinalen Gitterschwingungen einen divergenten Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit ergeben. Aus diesem Ergebnis folgert POMERANCHUK, daß auch die Glieder höherer Ordnung in der Anharmonizität an der Einstellung des thermischen Gleichgewichts beteiligt sind. Durch die Stoßprozesse $L + L \rightleftharpoons L$ wird eine völlig andere Lage geschaffen. Bei sehr langen Wellen bestimmen nur noch die energetisch nichtbeschränkten Prozesse die Streuung der langwelligen longitudinalen Schwingungen, was zur Folge hat, daß deren Verteilungsfunktion für $\omega \rightarrow 0$ einem konstanten Wert zustrebt und daß weiter bei der Berechnung der Wärmeleitfähigkeit keine Divergenzen auftreten. Dieses Ergebnis ist vor allem auch für das Zusammenspiel von Normalprozessen und der Streuung der Gitterschwingungen an Punktfehlern wichtig, das bisher nur sehr unbefriedigend behandelt werden konnte^{2, 10}. Auch hier sind bei langen Wellen sowohl bei den longitudinalen als auch bei den transversalen Schwingungen allein die energetisch nicht beschränkten Prozesse bestimmend, so daß bei der Berechnung der Wärmeleitfähigkeit keine divergierenden Ergebnisse auftreten können.

Zur Lösung des vorliegenden Problems benützen wir ein Verfahren, das früher ausführlich beschrieben worden ist. Es beruht im wesentlichen darauf,

daß die anharmonische Wechselwirkung der Gitterschwingungen mittels der nichtlinearen Elastizitätstheorie für ein isotropes Kontinuum beschrieben wird, was sicherlich im Gebiet tiefer Temperaturen erlaubt ist. Hierdurch wird es möglich, die Wärmeleitfähigkeit zahlenmäßig auszurechnen, ohne daß unbekannte Parameter angepaßt werden, weil für eine Reihe von Festkörpern die Konstanten der nichtlinearen Elastizitätstheorie experimentell bekannt sind. Zur Lösung der BOLTZMANNschen Transportgleichung wird ein Variationsverfahren benützt, bei dem die Kunst in der Auswahl der Vergleichsfunktionen liegt, durch die die gestörte Verteilungsfunktion angenähert wird. Da, wie wir vorher gesehen haben, in einem Festkörper immer energetisch nichtbeschränkte Normalprozesse vorhanden sind, sind nur solche Vergleichsfunktionen zugelassen, welche bei $\omega \rightarrow 0$ nicht singulär werden — eine Forderung, die des öfteren nicht beachtet worden ist. Als Vorteil des Variationsverfahrens ist noch zu erwähnen, daß, wenn mehrere voneinander unabhängige Streuprozesse an der Einstellung des stationären Zustands beteiligt sind, die in I definierten Matrixelemente $M_{n n'}^{j j'}$ für die einzelnen Streumechanismen einfach addiert werden müssen, wenn man den Gesamtwiderstand erhalten will. Als Beispiel für das Zusammenspiel mehrerer Streumechanismen wird im Abschnitt 5 der thermische Widerstand eines Kristalls berechnet werden, in dem Versetzungen enthalten sind.

2. Folgerungen aus den Erhaltungssätzen der Wellenvektoren und der Energie

Wie wir im vorhergehenden Abschnitt erwähnt haben, wollen wir alle unsere Überlegungen für ein elastisches isotropes Kontinuum durchführen. In ihm können sich die Gitterschwingungen entweder als longitudinale Wellen mit der Phasengeschwindigkeit c^L oder als transversale Wellen mit der Phasengeschwindigkeit c^T ausbreiten, wobei das Verhältnis $\beta = c^T/c^L$ immer kleiner als 1 ist.

In der zweiten Spalte von Tab. 1 sind die verschiedenen — denkbaren — Polarisationszustände der

⁷ L. LANDAU u. G. RUMER, Physik. Z. Sowjetunion **11**, 18 [1937].

⁸ Man beachte, daß die mit $\tau \sim \omega^{-4} T^{-1}$ verbundene Stoßverbreiterung den Effekt der Dispersion nicht kompensieren kann.

⁹ I. POMERANCHUK, J. Phys. USSR **4**, 259 [1941]; **6**, 237 [1942] und Phys. Rev. **60**, 820 [1941].

¹⁰ R. BERMAN, P. T. NETTLEY, F. W. SHEARD, A. N. SPENCER, R. W. H. STEVENSON u. J. M. ZIMAN, Proc. Roy. Soc. London **253**, 403 [1959].

Fall	$j \quad j' \quad j''$	$\cos \Theta(u)$	$u = k'/k$	$v = k/k''$
I	L L L	$\cos \Theta = 1$	$0 < u < \infty$	$0 < v < 1$
II	L L T	unmöglich		
III	L T L	$\cos \Theta = \beta - \frac{1}{2}(1 - \beta^2)u$	$0 < u < 2/(1 - \beta)$	$0 < v < (1 - \beta)/(1 + \beta)$
VI	L T T	unmöglich		
V	T L L	$\cos \Theta = \beta - \frac{1}{2}(1 - \beta^2)/u$	$\frac{1}{2}(1 - \beta) < u < \infty$	$0 < v < 2/(1 + \beta)$
VI	T T L	$\cos \Theta = \beta^2 - \frac{1}{2}(1 - \beta^2)\frac{1+u^2}{u}$	$\frac{1-\beta}{1+\beta} < u < \frac{1+\beta}{1-\beta}$	$\frac{1-\beta}{2\beta} < v < \frac{1+\beta}{2\beta}$
VII	T L T	unmöglich		
VIII	T T T	$\cos \Theta = 1$	$0 < u < \infty$	$0 < v < 1$

Tab. 1. Zur Diskussion der Drei-Phononen-Wechselwirkung.

Gitterschwingungen angegeben, die an einem Drei-Phononen-Prozeß beteiligt sein können. Wegen der Erhaltungssätze für die Wellenvektoren und Energie sind jedoch nicht alle Kombinationen möglich und außerdem wird durch sie der Variabilitätsbereich der verschiedenen Ausbreitungsvektoren eingeschränkt. Dies läßt sich auf folgende Weise einsehen: In der BOLTZMANNschen Transportgleichung, welche die gestörte Verteilungsfunktion für den Modus (j, \mathbf{f}) bestimmt, ist über die beiden Ausbreitungsvektoren \mathbf{f}' und \mathbf{f}'' zu integrieren. Als erstes wird die Integration über \mathbf{f}'' ausgeführt, was wegen der δ -Funktion trivial ist. Die verbleibende \mathbf{f}' -Integration enthält dann nur noch den Erhaltungssatz für die Energie, den wir in der Form

$$c^j k + c^{j'} k' = c^{j''} (k^2 + k'^2 + 2 k k' \cos \Theta)^{1/2} \quad (2.1)$$

schreiben können, wenn wir den von den beiden Vektoren \mathbf{f} und \mathbf{f}' eingeschlossenen Winkel mit Θ bezeichnen. Dieser läßt sich auf folgende Weise durch das Verhältnis $u = k'/k$ ausdrücken:

$$\cos \Theta = \frac{1}{2u} \left[\left(\frac{c^{j'}}{c^{j''}} u + \frac{c^j}{c^{j''}} \right)^2 - 1 - u^2 \right]. \quad (2.2)$$

Bei den Prozessen II, IV und VII ist die rechte Seite von (2.2) für jeden Wert von $u \geq 0$ entweder größer als $(+1)$ oder kleiner als (-1) . Durch die Forderung $|\cos \Theta| \leq 1$ wird bei den Prozessen III, V und VI der Wertevorrat von u eingeschränkt, was in Spalte 4 von Tab. 1 angegeben ist. Aus ihr ist weiter für die verschiedenen Arten von Drei-Phononen-Prozessen die Funktion $\cos \Theta = \cos \Theta(u)$ (Spalte

3) und der Wertebereich von $v = k/k''$ (Spalte 5) zu entnehmen, wobei letzterer durch

$$v = (1 + u^2 + 2 u \cos \Theta)^{-1/2} \quad (2.3)$$

bestimmt ist. Für das Verhalten der Vergleichsfunktionen für die langwelligen Gitterschwingungen, das wir im nächsten Abschnitt untersuchen, ist wichtig, daß bei den Prozessen I, V und VIII k' beliebig groß werden kann.

3. Die Frequenzabhängigkeit der gestörten Verteilungsfunktion im Grenzfall langwelliger Gitterschwingungen

In diesem Abschnitt wollen wir uns mit der Frage beschäftigen, welche Voraussagen wir über die Frequenzabhängigkeit der gestörten Verteilungsfunktion

$$\bar{N}_{\mathbf{f}}^j = N_{\mathbf{f}}^j + \frac{1}{K T} N_{\mathbf{f}}^j (N_{\mathbf{f}}^j + 1) \Psi_{\mathbf{f}}^j \quad (3.1a)$$

$$\text{mit} \quad N_{\mathbf{f}}^j = \left[\exp \left(\frac{\hbar \omega_{\mathbf{f}}^j}{K T} \right) - 1 \right]^{-1} \quad (3.1b)$$

(PLANCKsche Verteilungsfunktion)

im Grenzfall langwelliger Gitterschwingungen machen können, wenn Dreiphononenprozesse an der Streuung der Gitterschwingungen beteiligt sind. Dazu gehen wir aus von der BOLTZMANNschen Transportgleichung in der linearisierten Form

$$\hbar \omega_{\mathbf{f}}^j N_{\mathbf{f}}^j (N_{\mathbf{f}}^j + 1) \frac{1}{K T^2} c_{\mathbf{f}}^j \cdot \text{grad}_{\mathbf{r}} T = \mathcal{L}^j \{ \Psi_{\mathbf{f}}^j \}, \quad (3.2a)$$

wobei der lineare Integraloperator \mathcal{L}^j durch

$$\begin{aligned} -KT \mathcal{L}^j \{ \Psi_i^j \} = & \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{j}, \mathbf{j}''} \{ \Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj''} (\Psi_i^j - \Psi_{i'}^{j'} - \Psi_{i''}^{j''}) \\ & - 2 \Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj''} (\Psi_{i'}^{j''} - \Psi_i^j - \Psi_{i''}^{j'}) \} \\ & + \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{j}'} \Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj'} (\Psi_i^j - \Psi_{i'}^{j'}) \end{aligned} \quad (3.2b)$$

definiert ist. Für die folgenden Überlegungen ist nur wichtig, daß die für die Dreiphononenprozesse charakteristische Größe $\Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj''}$ in der Form

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj''} = & [N_0(\omega_i^j) + 1] N_0(\omega_{i'}^{j'}) N_0(\omega_{i''}^{j''}) \delta(-\mathbf{f} + \mathbf{f}' + \mathbf{f}'') \\ & \cdot \delta(-\omega_i^j + \omega_{i'}^{j'} + \omega_{i''}^{j''}) \omega_i^j \omega_{i'}^{j'} \omega_{i''}^{j''} F_{jj'j''}(\mathbf{f}^0, \mathbf{f}'^0, \mathbf{f}''^0) \end{aligned} \quad (3.2c)$$

mit einer nur von den Ausbreitungsrichtungen \mathbf{f}^0 , \mathbf{f}'^0 und \mathbf{f}''^0 abhängigen Funktion $F_{jj'j''}(\mathbf{f}^0, \mathbf{f}'^0, \mathbf{f}''^0)$ dargestellt werden kann. Durch $\Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj''}$ wird die Streuung der Gitterschwingungen an den statischen Gitterfehlern beschrieben. Sie läßt sich in der Form

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj''} = & [N_0(\omega_i^j) + 1] N_0(\omega_{i'}^{j'}) \delta(\omega_i^j - \omega_{i'}^{j'}) \\ & \cdot \omega_i^j \omega_{i'}^{j'} (\omega_i^j)^p G_{jj'}^{(p)}(\mathbf{f}^0, \mathbf{f}'^0) \end{aligned} \quad (3.2d)$$

schreiben. Die nur von der Richtung der Ausbreitungsvektoren \mathbf{f}^0 und \mathbf{f}'^0 abhängende Funktion $G_{jj'}^{(p)}(\mathbf{f}^0, \mathbf{f}'^0)$ ist für die einzelnen Gitterfehler ebenso wie der Exponent p verschieden. Zum Beispiel ist $p=0$ für punktförmige Gitterfehler und $p=-3$ für Versetzungen. Um die Frequenzabhängigkeit der Funktion ψ_i^j für $\omega_i^j \rightarrow 0$ zu bestimmen, genügt es, in (3.2b) jene Glieder näher zu untersuchen, bei denen über die unbekannte Funktion nicht integriert wird, so daß nur Integrale der Form

$$L_{jj'j''}^{(1)}(\mathbf{f}) = \int \Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj''} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'', \quad (3.3a)$$

$$L_{jj'j''}^{(2)}(\mathbf{f}) = \int \Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj''} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'', \quad (3.4a)$$

$$L_{jj'}^{(3)}(\mathbf{f}) = \int \Omega_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{jj'} d\mathbf{r}' \quad (3.5a)$$

auszuwerten sind¹¹. Beginnen wir am besten mit der Auswertung des Integrals $L^{(2)}$. Unter Berücksichtigung von (1.1) läßt sich die Integration über \mathbf{f}'' sofort ausführen, wodurch

$$\begin{aligned} L_{jj'j''}^{(2)}(\mathbf{f}) = & \int N_0(\omega_i^j) N_0(\omega_{i'}^{j'}) [N_0(\omega_i^j + \omega_{i'}^{j'}) + 1] \omega_i^j \omega_{i'}^{j'} (\omega_i^j + \omega_{i'}^{j'}) \\ & \cdot F_{jj'j''}(\mathbf{f}^0, \mathbf{f}'^0, (\mathbf{f} + \mathbf{f}')^0) \delta(\omega_i^j + \omega_{i'}^{j'} - \omega_{i'+\mathbf{r}}^{j''}) d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (3.4b)$$

entsteht. Zur Durchführung der Integration über \mathbf{f}' führen wir sphärische Polarkoordinaten k' , Θ , Φ ein, wobei der Winkel zwischen \mathbf{f} und \mathbf{f}' mit Θ bezeichnet wird. Wegen der δ -Funktion läßt sich die Integration über Θ sofort bewerkstelligen. Es wird dann

$$L_{jj'j''}^{(2)}(\mathbf{f}) = \frac{c^j}{(c^{j'} c^{j''})^2} N_0(\omega_i^j) \int N_0(\omega') [N_0(\omega_i^j + \omega') + 1] \omega'^2 \cdot (\omega_i^j + \omega')^2 \int_0^{2\pi} F_{jj'j''}(\Phi, \cos \Theta) d\Phi d\omega', \quad (3.4c)$$

wobei im letzten Integral der Wert von $\cos \Theta = \frac{c^j c^{j'}}{2 \omega_i^j \omega_{i'}^{j'}} \left[\left(\frac{\omega_i^j + \omega_{i'}^{j'}}{c^{j''}} \right)^2 - \left(\frac{\omega_i^j}{c^j} \right)^2 - \left(\frac{\omega_{i'}^{j'}}{c^{j'}} \right)^2 \right]$ (3.6)

einzusetzen ist. Bei der weiteren Auswertung des obigen Ausdrucks müssen wir nun zwischen energetisch beschränkten und unbeschränkten Prozessen unterscheiden. Wie wir in Abschnitt 2 gesehen haben, hat bei energetisch beschränkten Prozessen das Verhältnis k'/k und damit auch ω^j/ω^i eine obere Grenze. Führen wir statt ω' die neue Integrationsvariable $z = \omega^j/\omega^i$ ein, so wird

$$L_{jj'j''}^{(2)}(\mathbf{f}) = \frac{c^j (\omega_i^j)^5}{(c^{j'} c^{j''})^2} N_0(\omega_i^j) \int_a^b N_0(z \omega_i^j) [N_0(\omega_i^j + z \omega_i^j) + 1] z^2 (1+z)^2 \int_0^{2\pi} F_{jj'j''}(\Phi, z) d\Phi dz, \quad (3.4d)$$

wobei die oberen und unteren Grenzen nur von dem Verhältnis der Schallgeschwindigkeiten abhängig und aus Tab. 1 zu entnehmen sind. Wir interessieren uns nur für den Fall $\hbar \omega_i^j \ll KT$, so daß $N_0(z \omega) \approx KT/(z \hbar \omega)$ gesetzt werden darf. Für energetisch beschränkte Prozesse wird dann

$$L_{jj'j''}^{(2)}(\mathbf{f}) \approx \frac{KT c^j (\omega_i^j)^4}{\hbar (c^{j'} c^{j''})^2} N_0(\omega_i^j) [N_0(\omega_i^j) + 1] \cdot \int_a^b z (1+z) \int_0^{2\pi} F_{jj'j''}(\Phi, z) d\Phi dz. \quad (3.4e)$$

Bei energetisch nicht beschränkten Prozessen kann die obere Grenze b beliebig groß werden, wenn wir

¹¹ Die hier eingeführten Größen bestimmen nach Summation über j' und j'' die mittlere Lebensdauer eines Zustandes (k, j) .

$\omega_{\frac{1}{2}}^j \rightarrow 0$ rücken lassen¹². Das Integral über z spalten wir dann auf folgende Weise auf

$$\int_a^\infty dz = \int_a^{b^*} dz + \int_{b^*}^\infty dz,$$

wobei $b^* > 1$ sein soll. Im zweiten Integral ist deshalb $z > 1$, so daß $\cos \Theta = c^j/c^{j'}$ angenommen werden kann. Führen wir in ihm außerdem die neue Integrationsvariable $y = \hbar \omega^j z / (KT)$ ein, so wird¹³

$$L_{jj'j''}^{(2)}(\mathbf{f}) \approx N_0(\omega_{\frac{1}{2}}^j) [N_0(\omega_{\frac{1}{2}}^j) + 1] \frac{c^j}{(c^{j'} c^{j''})^2} \cdot \left\{ \frac{KT}{\hbar} (\omega_{\frac{1}{2}}^j)^4 \int_a^{b^*} z(1+z) \int_0^{2\pi} F_{jj'j''}(\Phi, z) d\Phi dz + \frac{(KT)^4}{\hbar^4} \omega_{\frac{1}{2}}^j \int_0^{2\pi} F_{jj'j''}(\Phi, c^j/c^{j'}) d\Phi \int_{b^* \hbar \omega_{\frac{1}{2}}^j / (KT)}^\infty y^4 \frac{e^y}{(e^y - 1)^2} dy \right\}. \quad (3.4f)$$

Der Wert des letzten Integrals ist $4! \zeta(4)$ (ζ : RIEMANNSCHE Zetafunktion), da angenommen wurde, daß $\hbar \omega^j < KT$ ist und deshalb die untere Grenze gleich Null gesetzt werden kann. Energetisch nicht beschränkte Dreiphononenprozesse zeichnen sich also dadurch aus, daß für $\omega \rightarrow 0$ gilt:

$$L_{jj'j''}^{(2)}(\mathbf{f}) \approx N_0(\omega_{\frac{1}{2}}^j) [N_0(\omega_{\frac{1}{2}}^j) + 1] \frac{c^j}{(c^{j'} c^{j''})^2} \frac{(KT)^4 \omega_{\frac{1}{2}}^j}{\hbar^4} 4! \zeta(4) \int_0^{2\pi} F_{jj'j''}(\Phi, c^j/c^{j'}) d\Phi. \quad (3.4g)$$

Ohne weitere Umformung läßt sich der Grenzwert für das Integral $L_{jj'j''}^{(1)}$ für $\omega^j \rightarrow 0$ erhalten. Dazu müssen wir nur beachten, daß in diesem Fall die Erhaltungssätze für Quasiimpuls und Energie sich dadurch von der in Abschnitt 2 zugrunde gelegten Konfiguration unterscheiden, daß (j, \mathbf{f}) und (j'', \mathbf{f}'') miteinander vertauscht sind. Führen wir diese Vertauschung in Abschnitt 2 durch, so erkennen wir aus der letzten Spalte von Tab. 1, daß das Verhältnis k''/k und damit auch das Verhältnis ω''/ω beschränkt ist. Wegen des Erhaltungssatzes der Energie bleibt dann auch das Verhältnis ω'/ω energetisch beschränkt. Das Integral $L_{jj'j''}^{(1)}$ verhält sich also bei kleinen Werten von ω^j durchweg wie

$$L_{jj'j''}^{(1)} \sim (\omega_{\frac{1}{2}}^j)^4 T. \quad (3.3b)$$

Da bei der Streuung der Gitterschwingungen die Energie der Gitterwellen nicht geändert wird, läßt sich die Frequenzabhängigkeit von $L_{jj'j''}^{(3)}$ sofort angeben. Setzt man die Darstellung für $\Omega_{-j'j''}^{(3)}$ in Gl. (3.5a) ein, integriert über k' , dann erhält man

$$L_{jj'j''}^{(3)}(\mathbf{f}) = N_0(\omega_{\frac{1}{2}}^j) [N_0(\omega_{\frac{1}{2}}^j) + 1] \frac{(\omega_{\frac{1}{2}}^j)^{4+p}}{(c^{j'})^3} \cdot \int G_{jj'}^{(p)}(\mathbf{f}_0, \mathbf{f}_0') d\Omega_{f'}, \quad (3.5b)$$

wenn $d\Omega_{f'}$ das Flächenelement im \mathbf{f}' -Raum bezeichnet. Der größte negative Wert, der überhaupt in Frage kommt, ist $p = -4$ für die Streuung der Gitterwellen an den Kristalloberflächen und an Korngrenzen. Sieht man hiervon zunächst ab, so ist für $\omega \rightarrow 0$ die Größenordnung der Koeffizienten von $\Psi_{\frac{1}{2}}^j$ in der BOLTZMANNschen Transportgleichung durch die Größen $L_{jj'j''}^{(2)}$ von energetisch nicht beschränkten Prozessen bestimmt. Dieselbe Größenordnung zeigen auch die von Versetzungen herrührenden Beiträge. Aus der BOLTZMANNschen Transportgleichung (3.2a) bekommen wir dann weiter im Grenzfall langer Wellen die Funktionen $\Psi_{\frac{1}{2}}^j$ als von der Frequenz unabhängig, wenn wir alle jene Glieder vernachlässigen, in denen über das Argument von $\Psi_{\frac{1}{2}}^j$ integriert wird. Man kann sich jedoch leicht davon überzeugen, daß dieses Ergebnis durch die vernachlässigten Glieder nicht verändert wird. Durch die energetisch nicht beschränkten Drei-Phononen-Prozesse oder aber auch durch Versetzungen wird also die Divergenz der Wärmeleitfähigkeit bei langen Wellen vermieden. Noch viel weniger treten divergierende Ergebnisse auf, wenn die Streuung der Gitterwellen an den Kristalloberflächen eine Rolle spielt, weil sich dann für $\omega \rightarrow 0$ die Funktionen

¹² Man beachte, daß in einem Kristall die DEBYESche Grenzfrequenz ω_D nicht überschritten werden darf. Da die bei den vorliegenden Überlegungen zugrunde gelegte Kontinuumstheorie nur für den Grenzfall langer Wellen richtig ist, darf in unserem Fall der wesentliche Beitrag zum Integral nur vom Gebiet $\omega' \ll \omega_D$ herrühren. Trotzdem kann ω'/ω beliebig groß werden, weil wir ω beliebig klein machen können. Natürlich muß durchweg $KT \ll \hbar \omega_D$ sein.

¹³ Der Vollständigkeit halber sei vermerkt, daß bei den energetisch unbeschränkten Prozessen I und VIII bei der Integration über Θ das Ergebnis (3.4f) mit dem Faktor 1/2 zu multiplizieren ist, da die δ -Funktion wegen $\cos \Theta = 1$ an der Grenze des Integrationsgebiets liegt.

$\psi_{\mathbf{f}}^j$ wie $\omega_{\mathbf{f}}^j$ verhalten. Diese Möglichkeit, daß $\psi_{\mathbf{f}}^j \sim (\omega_{\mathbf{f}}^j)^0$ oder $\sim \omega_{\mathbf{f}}^j$ sein kann, ist in der in Abschnitt 4 benützten Entwicklung der Verteilungsfunktionen $\psi_{\mathbf{f}}^j$ nach steigenden aber nur positiven Potenzen von $\omega_{\mathbf{f}}^j$ enthalten.

4. Das Transportproblem bei Normalprozessen

a) Allgemeine Überlegungen zur Lösung der BOLTZMANNschen Transportgleichung

Die durch Gitterschwingungen verursachten Transportvorgänge sind wesentlich komplizierter zu beschreiben als diejenigen durch Elektronen. Dies rührt daher, daß zu dem Ausbreitungsvektor \mathbf{f} auch noch der Polarisationsvektor der Gitterschwingung als weitere charakteristische Größe hinzutritt und daß für jeden Polarisationszustand eine Verteilungsfunktion bestimmt werden muß. In einem isotropen Medium ist jedoch durch die Tatsache, daß die beiden transversalen Gitterschwingungen miteinander energetisch entartet sind, eine gewisse Vereinfachung zu erwarten, weil in diesem Fall das Dreibein der Polarisationsvektoren beliebig um die Ausbreitungsrichtung der Welle gedreht werden kann. Die Übergangswahrscheinlichkeit für einen Dreiphononen-Prozeß ist dann außer vom Betrag der Vektoren \mathbf{f} und \mathbf{f}' nur noch von den von ihnen eingeschlossenen Winkeln abhängig und es ist dann möglich, die exakte Winkelabhängigkeit für die Verteilungsfunktion anzugeben, so daß nur noch eine eindimensionale Integralgleichung für die Energieabhängigkeit zu lösen ist.

Völlig andere Verhältnisse bekommt man jedoch, wenn die Isotropie des Raumes durch Gitterfehler zerstört wird. Haben diese zum Beispiel eine Vorzugsrichtung, so sind die beiden transversalen Gitterschwingungen nicht mehr gleichberechtigt. Die Verteilungsfunktion für die Gitterschwingungen, deren Polarisationsvektoren in der von der Vorzugsrichtung und der Ausbreitungsrichtung aufgespannten Ebene liegen, wird eine andere sein als die Verteilungsfunktion der dazu senkrecht polarisierten Gitterschwingung. Diese Unterscheidung der beiden transversalen Wellen hat bei der Behandlung der Dreiphononen-Prozesse unmittelbare Folgen. Da Gitterfehler mit Vorzugsrichtungen in der Natur oft vorkommen — als Beispiel seien nur gerade, singuläre Versetzungen erwähnt —, wollen wir die Formulierung, mit der wir den Einfluß der Dreipho-

nen-Prozesse auf die Gitterwärmeleitfähigkeit beschreiben, so allgemein fassen, daß wir die durch sie bedingte Auszeichnung der transversalen Gitterwellen von vornherein berücksichtigen können. Ohne Verlust der Allgemeinheit wählen wir die Vorzugsrichtung mit der z -Richtung des \mathbf{f} -Raums zusammenfallend. In Einklang mit der vorher erwähnten Festsetzung der Polarisationsvektoren der transversalen Gitterschwingungen ist dann

$$e_{\mathbf{f}}^1 \triangleq e_{\mathbf{f}}^L = \mathbf{f}/k, \quad (4.1a)$$

$$e_{\mathbf{f}}^2 \triangleq e_{\mathbf{f}}^{T_1} = \frac{1}{k(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}} \begin{Bmatrix} -k_x k_z \\ -k_y k_z \\ k_x^2 + k_y^2 \end{Bmatrix}, \quad (4.1b)$$

$$e_{\mathbf{f}}^3 \triangleq e_{\mathbf{f}}^{T_2} = \frac{1}{(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}} \begin{Bmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (4.1c)$$

b) Das Variationsverfahren zur Lösung des Transportproblems

Durch die soeben getroffene Festsetzung der Polarisationsvektoren wird die Übergangswahrscheinlichkeit selbst für die Drei-Phononen-Prozesse in einem isotropen Medium auch noch von der Orientierung der beiden Vektoren \mathbf{f} und \mathbf{f}' abhängig, so daß es nicht mehr möglich ist, die Winkelabhängigkeit der Verteilungsfunktion einfach zu „erraten“. Wir sind dann gezwungen, die BOLTZMANNsche Integralgleichung sowohl für die Winkel- als auch für die Energieabhängigkeit zu lösen, was nur näherungsweise möglich ist. Hierfür hat sich ein Verfahren (vgl. I) bestens bewährt, bei dem man die BOLTZMANNsche Transportgleichung durch ein ihr äquivalentes Extremalprinzip ersetzt. Dieses wird mit dem RITZschen Verfahren erfüllt, wobei man die Vektorfunktion $\mathcal{X}_{\mathbf{f}}^j$ in dem Ansatz

$$\Psi_{\mathbf{f}}^j = - \frac{1}{T} \mathcal{X}_{\mathbf{f}}^j \cdot \text{grad } T \quad (4.2)$$

durch die Vergleichsfunktionen

$$\mathcal{Z}_{\mathbf{f}}^j = \sum_r \sum_{m,n} \mathcal{Z}_{n,r}^j (\hbar \omega_{\mathbf{f}}^j)^r Y_{nm}(\vartheta, \varphi) \quad (4.3)$$

ersetzt. Der zu einem bestimmten Polarisationszweig j gehörende Ausbreitungsvektor \mathbf{f} wird also durch die zwei sphärischen Polarkoordinaten ϑ, φ sowie durch die Frequenz $\omega_{\mathbf{f}}^j$ festgelegt. Y_{nm} sind normierte Kugelflächenfunktionen, wobei in dem vorliegenden Problem nur die Funktionen mit ungeradem n in Frage kommen. Die Annäherung an

die exakte Lösung \mathfrak{X}_i^j wird um so besser, je mehr Glieder in der Reihe mitgenommen werden, wodurch entweder die Energieabhängigkeit oder die Winkelabhängigkeit oder beides verbessert werden kann. Auf Grund der im vorherigen Abschnitt durchgeführten Überlegungen wissen wir, daß die erste Summe nur über positive Potenzen von $\hbar \omega_i^j$ – beginnend bei $r=0$ – geht. In einem isotropen Medium mit isotropen Gitterfehlern wird die Winkelabhängigkeit der Verteilungsfunktion vollständig durch die Kugelflächenfunktionen mit $n=1$ beschrieben.

Für die Entwicklungskoeffizienten \mathfrak{Z}_n^j liefert das Extremalprinzip das lineare Gleichungssystem

$$\sum_{j', m', n', r'} M_{n' r'}^{j j'} \mathfrak{Z}_{n'}^{j'} = \mathfrak{N}_n^j, \quad (4.4)$$

wobei die Größen $M_{n' r'}^{j j'}$ die ganze Information über

den auf die Gitterschwingungen wirkenden Streumechanismus enthalten, während die Vektoren \mathfrak{N}_n^j allein von Eigenschaften der Gitterschwingungen in der harmonischen Näherung abhängig und in (I) definiert sind. Die Größen $M_{n' r'}^{j j'}$ genügen der Symmetrieeigenschaft

$$M_{n' r'}^{j j'} = M_{n' r'}^{j' j}. \quad (4.5)$$

Der Vorteil dieses Formalismus besteht darin, daß, wenn mehrere voneinander unabhängige Streumechanismen vorhanden sind, die für die einzelnen Mechanismen charakteristischen Größen $M_{n' r'}^{j j'}$ einfach addiert werden dürfen. In diesem Abschnitt wollen wir die Matrixelemente für die Drei-Phononen-Prozesse bestimmen, für die wir in (I) folgenden Ausdruck abgeleitet haben:

$$\begin{aligned} -K T M_{n' r'}^{j j'} = & \delta^{j j'} \sum_{j'', l, l', l''} (\hbar \omega_l^j)^{r+r'} Y_{nm}(\vartheta, \varphi) Y_{n'm'}(\vartheta, \varphi) \{ \Omega_{-l l' l''}^{j j'' j'''} + \Omega_{l -l' l''}^{j j'' j'''} + \Omega_{l l' -l''}^{j j'' j'''} \} \\ & + 2 \sum_{j'', l, l', l''} (\hbar \omega_l^j)^r (\hbar \omega_{l'}^{j'})^{r'} Y_{nm}(\vartheta, \varphi) Y_{n'm'}(\vartheta', \varphi') \{ \Omega_{l l' -l''}^{j j' j''} - \Omega_{l -l' l''}^{j j' j''} - \Omega_{-l l' l''}^{j j' j''} \} \end{aligned} \quad (4.6a)$$

mit den Abkürzungen

$$\Omega_{l l' -l''}^{j j' j''} = (3!)^2 \frac{2\pi}{\hbar^2} \left[\frac{(2\pi)^3 \hbar}{V_0 2 \varrho_0} \right]^3 \frac{|V_{l l' -l''}^{j j' j''}|^2 \delta^2(\mathbf{l} + \mathbf{l}' - \mathbf{l}'')}{\omega_l^j \omega_{l'}^{j'} \omega_{l''}^{j''}} \delta(\omega_l^j + \omega_{l'}^{j'} - \omega_{l''}^{j''}) N_0^j N_0^{j'} (N_0^{j''} + 1) \quad (4.6b)$$

(V_0 : Kristallvolumen, ϱ_0 : Massendichte, $2\pi\hbar$: PLANCKSche Konstante).

Die Größen $V_{l l' -l''}^{j j' j''}$, die in (I) definiert sind, sind ein Maß für die Wechselwirkung der Phononen miteinander. Wie wir in Abschnitt 2 gesehen haben, sind jedoch wegen der Erhaltungssätze für die Energie und den Quasiimpuls zunächst nur Prozesse der Art I, III, V, VI und VIII möglich, wobei jedoch der letztere noch ausscheidet, weil bei ihm die Größe $V_{l l' -l''}^{T T T}$ verschwindet. Durch Vertauschen der beiden letzten Indexpaare von $V_{l l' -l''}^{j j' j''}$ kann zudem der Fall VI auf den Fall V zurückgeführt werden, so daß wir für die folgenden Untersuchungen nur die Größen $V_{l l' -l''}^{L L L}$, $V_{l l' -l''}^{L T L}$ und $V_{l l' -l''}^{T T L}$ benötigen. Für diese finden wir die Ausdrücke

$$(2\pi)^{3/2} V_{l l' -l''}^{L L L} = -(A_1 + A_3) (k + k') k k', \quad (4.7a)$$

$$(2\pi)^{3/2} V_{l l' -l''}^{L T L} = -\frac{1}{12} (4A_1 - A_2 - 2A_4) \frac{[(\mathbf{l} + \mathbf{l}')^2 - k^2][k^2 + \mathbf{l} \cdot \mathbf{l}']}{k |\mathbf{l} + \mathbf{l}'|} (\mathbf{e}_l^T \cdot \mathbf{l}), \quad (4.7b)$$

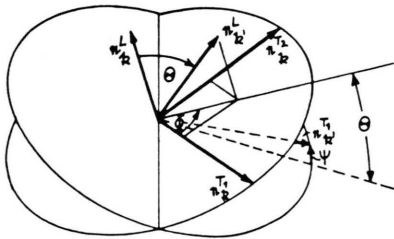
$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} V_{l l' -l''}^{T T L} = & \frac{1}{12} \{ (-4A_1 + A_4) (\mathbf{l} \cdot \mathbf{l}') (\mathbf{l} + \mathbf{l}')^2 + (A_5 - 2A_2) [(\mathbf{l} \cdot \mathbf{l}')^2 - k^2 k'^2] \} \frac{\mathbf{e}_l^T \cdot \mathbf{e}_{l'}^T}{|\mathbf{l} + \mathbf{l}'|} \\ & + \frac{1}{12} \{ (A_2 + A_4) (\mathbf{l} + \mathbf{l}')^2 + (2A_2 - A_5) (\mathbf{l} \cdot \mathbf{l}') \} \frac{(\mathbf{e}_l^T \cdot \mathbf{l}') (\mathbf{e}_{l'}^T \cdot \mathbf{l})}{|\mathbf{l} + \mathbf{l}'|}, \end{aligned} \quad (4.7c)$$

wenn wir die Erhaltungssätze für den Quasiimpuls und die Energie berücksichtigen. A_1 bis A_5 sind die elastischen Konstanten zweiter und dritter Ordnung für ein isotropes Medium.

c) Berechnung der Größen $M_{n n' r}^{j j'}$ für Normalprozesse

Da diese sehr umfangreich ist, können wir aus Platzgründen im einzelnen nicht auf sie eingehen und müssen uns begnügen, die wesentlichen Schritte anzugeben. Zunächst sieht man aus der Definitionsgleichung für die $M_{n n' r}^{j j'}$, daß Integrationen über die Vektoren \mathbf{f} , \mathbf{f}' und \mathbf{f}'' und außerdem noch Summationen über verschiedene Polarisationszustände auszuführen sind. Wegen des Erhaltungssatzes für den Quasiimpuls ist die Integration über \mathbf{f}'' sofort zu bewerkstelligen. Es bleibt dann noch ein sechs-dimensionales Integral übrig, das u. a. auch die δ -Funktion für die Energie enthält. Das Argument dieser δ -Funktion wird besonders einfach, wenn wir den Vektor \mathbf{f}' auf ein Polarkoordinatensystem beziehen mit dem Vektor \mathbf{f} als Polachse. Es wird dann nur von dem Betrag der Vektoren \mathbf{f} und \mathbf{f}' und dem von ihnen eingeschlossenen Winkel Θ abhängig. Messen wir den Azimutwinkel Φ von der \mathbf{e}_T^1 -Richtung aus, so wird (s. Abb. 1)

$$\mathbf{f}'/k' = \cos \Theta \mathbf{e}_T^1 + \sin \Theta \cos \Phi \mathbf{e}_T^2 + \sin \Theta \sin \Phi \mathbf{e}_T^3. \quad (4.8)$$



Auch die Polarisationsvektoren $\mathbf{e}_T^{j'}$ zerlegen wir in Richtung der Vektoren \mathbf{e}_T^j . Dies geschieht durch

$$\mathbf{e}_T^{j'} = \sum_j A_{j'j}(\mathbf{f}', \mathbf{f}) \mathbf{e}_T^j \quad (4.9a)$$

Abb. 1. Die EULERSchen Winkel bei der Koordinatentransformation (4.9).

mit

$$\mathbf{A}(\mathbf{f}', \mathbf{f}) = \begin{Bmatrix} \cos \Theta & \sin \Theta \cos \Phi & \sin \Theta \sin \Phi \\ -\sin \Theta \cos \Psi & -\sin \Phi \sin \Psi + \cos \Theta \cos \Phi \cos \Psi & \cos \Phi \sin \Psi + \cos \Theta \sin \Phi \cos \Psi \\ \sin \Theta \sin \Psi & -\sin \Phi \cos \Psi - \cos \Theta \cos \Phi \sin \Psi & \cos \Phi \cos \Psi - \cos \Theta \sin \Phi \sin \Psi \end{Bmatrix}. \quad (4.9b)$$

Die Matrix $\mathbf{A}(\mathbf{f}', \mathbf{f})$ beschreibt die Drehung um die EULERSchen Winkel (Φ, Θ, Ψ) , wodurch die Orthogonalitätseigenschaften des Dreieins $\mathbf{e}_T^{j'}$ bestimmt erfüllt werden¹⁴. Solange die beiden transversalen Wellen nicht besonders ausgezeichnet sind, kann der Winkel Ψ jeden beliebigen Wert annehmen. In unserem Fall wird er durch die Forderung festgelegt, daß in bezug auf das \mathbf{f} -System die z -Komponente von \mathbf{e}_T^{T2} verschwinden muß. Diese Forderung führt auf

$$\cos \Psi = \frac{\sin \Theta \cos \vartheta - \cos \Theta \sin \vartheta \cos \Phi}{[1 - (\cos \Theta \cos \vartheta + \sin \Theta \sin \vartheta \cos \Phi)^2]^{1/2}}; \quad (4.10a)$$

$$\sin \Psi = \frac{\sin \vartheta \sin \Phi}{[1 - (\cos \Theta \cos \vartheta + \sin \Theta \sin \vartheta \cos \Phi)^2]^{1/2}}. \quad (4.10b)$$

Natürlich müssen auch in den Kugelflächenfunktionen $Y_{nm}(\vartheta', \varphi')$ die neuen Koordinaten eingeführt werden. Wenn wir uns auf $n=1$ beschränken, bereitet dies keine große Schwierigkeit, weil sich die Kugelflächenfunktionen durch Linearkombinationen des Vektors \mathbf{f} ausdrücken lassen, für die die Transformationsbeziehung (4.8) gilt. Eine einfache Zwischenrechnung ergibt, daß sich $Y_{1m}(\vartheta', \varphi')$ in der Form

$$Y_{1m}(\vartheta', \varphi') = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \Pi_1^m(\Theta, \vartheta, \Phi) e^{im\varphi} \quad (4.11a)$$

darstellen läßt, wobei Π_1^m durch

$$\Pi_1^0 = \sqrt{\frac{3}{2}} [\cos \Theta \cos \vartheta + \sin \Theta \sin \vartheta \cos \Phi], \quad (4.11b)$$

$$\Pi_1^1 = -\Pi_1^{-1*} = \sqrt{\frac{3}{4}} [\cos \Theta \sin \vartheta - \sin \Theta \cos \vartheta \cos \Phi - i \sin \Theta \sin \Phi] \quad (4.11c)$$

definiert ist. Weiter benötigen wir $Y_{1m}(\vartheta'', \varphi'')$, das sich wegen der δ -Funktion durch

$$Y_{1m}(\vartheta'', \varphi'') = \frac{k}{|\mathbf{f} + \mathbf{f}'|} Y_{1m}(\vartheta, \varphi) + \frac{k'}{|\mathbf{f} + \mathbf{f}'|} Y_{1m}(\vartheta', \varphi') \quad (4.12)$$

ausdrücken läßt.

¹⁴ G. LEIBFRIED, Handbuch der Physik (S. Flüge), VII/1, S.171, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1955.

Führt man die hier angegebenen Transformationen aus, so ergeben sich die Größen $Q_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{j j'}$ von den Winkeln Θ , Φ , ϑ und von k und k' abhängig, während die φ -Abhängigkeit nur von den Funktionen $Y_{nm}(\vartheta, \varphi)$ und $Y_{n'm'}(\vartheta', \varphi')$ herrührt. Wegen der Beziehung (4.11a) kann die φ -Integration sofort ausgeführt werden und ergibt nur dann einen nichtverschwindenden Beitrag, wenn $m = -m'$ ist. Diese Eigenschaft rührt von der Rotationssymmetrie des Problems in bezug auf die z -Achse her.

Als nächstes wird die vom Erhaltungssatz der Energie herrührende δ -Funktion durch Integration über den Winkel Θ eliminiert, was mit den in Tab. 1 angegebenen Ausdrücken für $\cos \Theta$ leicht durchgeführt werden kann. Auch die über die beiden Winkel Φ (Variabilitätsbereich $0 \leq \Phi < 2\pi$) und ϑ (Variabilitätsbereich $0 \leq \vartheta \leq \pi$) zu erstreckenden Integrale lassen sich geschlossen auswerten. Es bleiben dann nur noch die Integrale über k und $u = k'/k$ übrig, die folgende Gestalt haben

$$I_{r+r'} = \int_{z=0}^{\infty} \int_a^b \frac{e^{z(1+u)} z^{r+r'+7}}{(e^{z(1+u)} - 1)(e^z - 1)(e^{zu} - 1)} dz du \quad (4.13a)$$

mit $r, r' = 0, 1, 2, \dots$,

wenn wir die neue Veränderliche $z = [\hbar c^j / (KT)] k$ einführen. Die oberen und unteren Grenzen a und b rühren daher, daß der Erhaltungssatz der Energie nur in diesem Bereich Werte für $\cos \Theta$ liefert, für

die $|\cos \Theta| \leq 1$ ist. Für die verschiedenen Arten von Drei-Phononen-Prozessen sind die Werte für a und b aus Tab. 1 zu entnehmen. In bekannter Weise wird der Nenner des Integranden (4.13a) in eine Reihe nach Potenzen der Exponentialfunktionen entwickelt. Da der Zähler bei $z=0$ genügend stark verschwindet, ist diese Reihenentwicklung auch für $u=0$ gültig. Nach Durchführung der z -Integration bleibt das Integral

$$I_{r+r'} = (r+r'+7)! \int_a^b S_{r+r'+8}(u) du \quad (4.13b)$$

$$\text{mit } S_{r+r'+8}(u) = \quad (4.13c)$$

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{[(\lambda+\mu+1) + (\lambda+\nu+1)u]^{r+r'+8}}$$

übrig, das nur numerisch ausgewertet werden kann.

d) Zusammenstellung der Größen $M_{nn'}^{jj'}$

Der Einfachheit halber wollen wir uns nur auf den Fall $n=n'=1$ beschränken, der bei vollständiger Isotropie des Problems allein maßgebend ist, und der bei anisotroper Streuung eine sehr gute Näherung darstellen wird. Zur übersichtlichen Darstellung der Größen M führen wir zunächst einige Abkürzungen ein.

$$\alpha = 2\beta / (1 - \beta), \quad (4.14a)$$

$$f(u) = u - \frac{1}{2} (1 - \beta^2) (1 + u)^2, \quad (4.14b)$$

$$F_1(u) = -\frac{1}{12 A_2} \{ (A_5 - 2 A_2) u - [\frac{1}{2} (1 - \beta^2) (A_5 - 2 A_2) + \beta^2 (A_2 + A_4)] (1 + u)^2 \}, \quad (4.14c)$$

$$F_2(u) = -\frac{(1+u)^2}{12 A_2} \{ [(4 A_1 + 2 A_2 - A_4 - A_5) \beta^2 + (A_5 - 2 A_2)] u - \frac{1}{2} (1 - \beta^2) [(4 A_1 + 2 A_2 - A_4 - A_5) \beta^2 + \frac{1}{2} (A_5 - 2 A_2) (1 + \beta^2)] (1 + u)^2 \}, \quad (4.14d)$$

$$F_3(u) = [\alpha^2 (1 + u) - u^2 (1 + \alpha)] [\alpha^2 (1 + u) - 2 u^2 (1 + \alpha)]^2 (1 + \frac{1}{2} u)^2, \quad (4.14e)$$

$$F_4(u) = F_2^2 u^2 + \frac{1}{2} [(F_1 u)^2 - (F_2 + f F_1)^2] (u^2 - f^2), \quad (4.14f)$$

$$J_1(r, r') = \int_0^a S_{r+r'+8} \frac{u^2}{(1+u)^2} F_3 \left\{ (1+u)^{r+r'} + 1 - [(1+u)^{r'} + (1+u)^r] \left[1 - 2 \frac{\alpha+1}{\alpha^2} \frac{u^2}{1+u} \right] \right\} du, \quad (4.15a)$$

$$J_2(r, r') = 2 \int_1^{1+\alpha} S_{r+r'+8} F_4 \frac{(1+u)^{r+r'}}{u^2 (1+u)^2} du, \quad (4.15b)$$

$$J_3(r, r') = \int_0^a S_{r+r'+8} F_3 \frac{u^{r'+2}}{(1+u)^2} \left\{ 1 - (1+u)^r - u [1 + (1+u)^{r-1}] \frac{2(1+\alpha)}{\alpha^2} \right\} du, \quad (4.15c)$$

$$J_4(r, r') = \int_1^{1+\alpha} S_{r+r'+8} F_4 \frac{(1+u)^r}{u^3 (1+u)^2} \{ u(1+u^{r'}) - \frac{1}{2} (1 - \beta^2) u(1+u) (1+u^{r'-1}) \} du, \quad (4.15d)$$

$$J_5(r, r') = \int_0^a S_{r+r'+8} F_3 \frac{u^{r+r'+2}}{(1+u)^2} du, \quad (4.15e)$$

$$J_6(r, r') = \int_1^{1+a} S_{r+r'+8} F_4 \frac{1+u^{r+r'}}{u^2(1+u)^2} du, \quad (4.15f) \quad J_7(r, r') = \int_1^{1+a} S_{r+r'+8} F_4 \frac{u^r+u^{r'}}{u^3(1+u)^2} f du, \quad (4.15g)$$

$$J_8(r, r') = \int_1^{1+a} S_{r+r'+8} \frac{u^r+u^{r'}}{u^3(1+u)^2} \left\{ \ln \left(\frac{2u}{u-f} \right) [(F_2 + (u+f) F_1)^2 f + 2 F_1 u (F_2 + f F_1) (u-f)] 6 u^2 + 3 [F_2 + (u+f) F_1]^2 (f+u) u^2 \ln \left(\frac{u-f}{u+f} \right) + [f(F_2 + (u+f) F_1)^2 - 2 F_1 (F_2 + f F_1) u(4u+f)] (u^2 - f^2) \right\} du, \quad (4.15h)$$

$$J_9(r, r') = \int_1^{1+a} S_{r+r'+8} \frac{u^r+u^{r'}}{u^3(1+u)^2} \left\{ \ln \left(\frac{2u}{u-f} \right) [(F_2 + (u+f) F_1)^2 f + F_1 (F_2 + f F_1) (u-f)^2] 6 u^2 + \frac{3}{2} [F_2 + (u+f) F_1]^2 (f+u)^2 u \ln \left(\frac{u-f}{u+f} \right) - [f(F_2 + (u+f) F_1)^2 + 2 F_1 u (F_2 + f F_1) (2u-f)] (u^2 - f^2) \right\} du, \quad (4.15i)$$

$$G^{r,r'} = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{e^{x+y} (x+y)^2 x^2 y^2}{(e^{x+y}-1)(e^x-1)(e^y-1)} \{ (x+y)^r - x^r - y^r \} \{ (x+y)^{r'} - x^{r'} - y^{r'} \} dx dy, \quad (4.16a)$$

$$G^{0,0} = 205,272. \quad (4.16b)$$

Mit Ausnahme von (4.15c) und (4.15d) sind alle Integrale dieser Aufstellung gegenüber einer Vertauschung von r mit r' invariant. Wenn wir noch den allen Größen $M_{n \atop r \atop r'}^{j \atop m \atop m'}$ gemeinsamen Faktor

$$B_{r+r'} = - \frac{(3!)^2}{(2\pi)^4} \frac{V_0}{\hbar^7 \varrho_0 (c^T)^8} (KT)^{r+r'+7} (r+r'+7)! \quad (4.17)$$

als Abkürzung einführen, lassen sich die M auf folgende Weise darstellen:

$$M_{r \atop r'}^{l \atop m \atop m'} = (-1)^m B_{r+r'} \left\{ \delta_{r,0} \delta_{r',0} \frac{1}{4 \cdot 7!} G^{r,r'} \beta^{12} \left(\frac{A_1 + A_3}{A_2} \right)^2 + \frac{1}{2^6 \cdot 9} \beta^4 (1 - \beta^2) (1 - \beta)^6 \left(\frac{2 A_1 - \frac{1}{2} A_2 - A_4}{A_2} \right)^2 J_1(r, r') + J_2(r, r') \right\}, \quad (4.18a)$$

$$M_{r \atop r'}^{l \atop m \atop m'} = (-1)^m B_{r+r'} \left\{ \frac{1}{2^7 \cdot 9} \beta^5 (1 - \beta^2) (1 - \beta)^6 \left(\frac{2 A_1 - \frac{1}{2} A_2 - A_4}{A_2} \right)^2 J_3(r, r') - \frac{1}{\beta} J_4(r, r') \right\}, \quad (4.18b)$$

$$M_{r \atop r'}^{T_1 \atop 0 \atop 1} = -\frac{1}{2} B_{r+r'} J_8(r, r'), \quad (4.18c) \quad M_{r \atop r'}^{T_1 \atop T_1 \atop 1} = -\frac{1}{2} B_{r+r'} J_9(r, r'), \quad (4.18d)$$

$$M_{r \atop r'}^{T_1 \atop m \atop m'} + M_{r \atop r'}^{T_1 \atop T_2 \atop 1} = (-1)^m B_{r+r'} \left\{ \frac{1}{2^7 \cdot 9} \beta^4 (1 - \beta^2) (1 - \beta)^6 \left(\frac{2 A_1 - \frac{1}{2} A_2 - A_4}{A_2} \right)^2 J_5(r, r') + J_6(r, r') + J_7(r, r') \right\}. \quad (4.18e)$$

e) *Symmetrieeigenschaften der Größen $M_{n \atop r \atop r'}^{j \atop m \atop m'}$*

Außer der schon angegebenen Symmetrieeigenschaft in bezug auf die beiden Indexpalten besitzen die Größen $M_{n \atop r \atop r'}^{j \atop m \atop m'}$, welche für die Drei-Phononen-

Prozesse in einem isotropen Medium charakteristisch sind, noch weitere Symmetrieeigenschaften, die wir kurz zusammenstellen wollen. Zunächst folgt aus der Rotationssymmetrie in bezug auf die z -Achse, daß die $M_{n \atop r \atop r'}^{j \atop m \atop m'}$ ihre Werte bei einem Ersatz von m durch

– m nicht ändern. Zusammen mit (4.5) führt dies auf

$$M_{n \ n'}^{m \ -m} = M_{n' \ n}^{j' \ -j}. \quad (4.19a)$$

Weitere Symmetrieeigenschaften können wir gewinnen, wenn wir die gestörte Verteilungsfunktion betrachten, die sich unter dem Einfluß von Drei-Phononen-Prozessen und der Streuung an statistisch verteilten Gitterfehlern ohne Vorzugsrichtung – z. B. punktförmigen Gitterfehlern – einstellen wird. In diesem Falle ist keine der beiden transversalen Gitterwellen vor der anderen ausgezeichnet, so daß $\mathfrak{Z}_1^{T_1} = \mathfrak{Z}_1^{T_2}$ sein muß. Aus dem Gleichungssystem (4.4) entnehmen wir, daß eine solche Beziehung nur dann gelten kann, wenn die Größen $M_{n \ n'}^{j \ j'}$ sowohl für Drei-Phononen-Prozesse als auch für die Gitterfehler den Beziehungen

$$M_{n \ n'}^{T_1 \ L} = M_{n' \ n}^{T_2 \ L}, \quad (4.19b)$$

$$\text{und} \quad M_{n \ n'}^{T_1 T_1} + M_{n \ n'}^{T_1 T_2} = M_{n \ n'}^{T_2 T_1} + M_{n \ n'}^{T_2 T_2} \quad (4.19c)$$

gehören. Mit den neuen Größen

$$M_{n \ n'}^{T \ L} = \frac{1}{2} \left(M_{n \ n'}^{T_1 L} + M_{n \ n'}^{T_2 L} \right), \quad (4.20a)$$

$$M_{n \ n'}^{T \ T} = \frac{1}{4} \left(M_{n \ n'}^{T_1 T_1} + M_{n \ n'}^{T_1 T_2} + M_{n \ n'}^{T_2 T_1} + M_{n \ n'}^{T_2 T_2} \right), \quad (4.20b)$$

$$\mathfrak{Z}_n^T = 2 \mathfrak{Z}_n^{T_1} = 2 \mathfrak{Z}_n^{T_2} \quad (4.20c)$$

$$\text{und} \quad \mathfrak{N}_n^T = \mathfrak{N}_n^{T_1} = \mathfrak{N}_n^{T_2} \quad (4.20d)$$

läßt sich im Fall vollständiger Isotropie das Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten \mathfrak{Z}_n^i in der Form

$$\sum_{r'} M_{n \ n'}^{L \ -L} \mathfrak{Z}_{r'}^{-L} + \sum_{r'} M_{n \ n'}^{L \ T} \mathfrak{Z}_{r'}^{-T} = \mathfrak{N}_n^L, \quad (4.21a)$$

$$\sum_{r'} M_{n \ n'}^{T \ L} \mathfrak{Z}_{r'}^{-L} + \sum_{r'} M_{n \ n'}^{T \ T} \mathfrak{Z}_{r'}^{-T} = \mathfrak{N}_n^T \quad (4.21b)$$

schreiben. Man kann sich leicht überzeugen, daß bei der Berechnung der hier eingeführten Größen $M_{n \ n'}^{j \ j'}$ nach Gl. (4.6a) die Koeffizienten $\Omega_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{j \ j'}$ in einer solchen Linearkombination auftreten, daß sie nur vom Betrag der Vektoren \mathbf{k} und \mathbf{k}' und dem von

ihnen eingeschlossenen Winkel Θ abhängen. Es liegen dann völlig analoge Verhältnisse wie bei der Streuung der Elektronen an einem isotropen Streuzentrum vor, so daß die Größen $M_{n \ n'}^{j \ j'}$ nur für $m' = -m$ und für $n = n'$ von Null verschieden sind. Diese Eigenschaft wurde bei der Aufstellung des vorhergehenden Gleichungssystems benützt. Die hier eingeführten Größen $M_{n \ n'}^{j \ -m}$ (mit $j = L, T$) tragen der Isotropie des Raumes Rechnung, d. h. die x -, y - und z -Richtungen sind völlig gleichberechtigt. Dies hat weiter zur Folge, daß

$$M_{11}^{jT} = -M_{11}^{jT} \quad \text{für } j = L, T \text{ ist}^{15}. \quad (4.22)$$

Die bisher angeführten Symmetrieeigenschaften sind eine Folge der Isotropie des Raumes und sind deshalb auch für isotrope statische Gitterfehler gültig. Wir wollen noch eine Eigenschaft angeben, die speziell für Drei-Phononen-Prozesse charakteristisch, und die durch die Erhaltungssätze des Quasiimpulses und der Energie bedingt ist. Mit Hilfe der Beziehungen (4.15) kann man zeigen, daß die Größen $M_{11}^{j \ L}$ und $M_{11}^{j \ -m}$ nicht unabhängig voneinander sind, sondern daß zwischen ihnen der Zusammenhang

$$M_{11}^{j \ L} + \frac{1}{\beta} M_{11}^{j \ -m} \quad (j = L, T) \quad (m = 0 \text{ oder } 1) \quad (4.23)$$

besteht. Hierdurch wird die Koeffizientendeterminante des Gleichungssystems (4.21) identisch Null. Da die Zählerdeterminante für die Koeffizienten \mathfrak{Z}_1^L und \mathfrak{Z}_1^T nicht verschwindet, wird die Wärmeleitfähigkeit unendlich groß. Die eingangs erwähnte Tatsache, wonach Drei-Phononen-Prozesse zu keinem thermischen Widerstand führen, wird also von unserem Formalismus richtig wiedergegeben.

5. Das Zusammenwirken von Drei-Phononen-Prozessen und der Streuung von Gitterwellen an geraden Versetzungslinien

Wie wir im vorherigen Abschnitt explizit gesehen haben, können Drei-Phononen-Prozesse nur zusammen mit der Streuung der Gitterschwingungen an

¹⁵ Die aus Gl. (4.18 c–d) zu entnehmende Eigenschaft

$$M_{11}^{T_1 T_2} = M_{11}^{T_1 T_2}$$

konnte noch nicht allgemein bewiesen werden.

statischen Gitterfehlern die Wärmeleitfähigkeit beeinflussen. Der einfachste Fall, der hierfür in Frage kommt und über den an anderer Stelle berichtet werden soll¹⁶, ist das Zusammenwirken mit punktförmigen Gitterfehlern, bei dem durch die im Abschnitt 4 diskutierte Isotropie des Problems eine weitgehende Vereinfachung möglich ist. In der vorliegenden Mitteilung wollen wir als Beispiel für einen orientierten Gitterfehler die Streuung von Gitterschwingungen aneinander und an geradlinigen Stufenversetzungen behandeln. Der durch Stufenversetzungen allein hervorgerufene Gitterwärmewiderstand wurde schon früher untersucht¹⁷ und wir wollen uns der Kürze halber an diese Überlegungen anschließen. Im Einklang mit (III) nehmen wir eine gerade Stufenversetzung in der z -Richtung mit BURGERS-Vektor b in x -Richtung an. Da bei der Streuung von Gitterwellen an statischen Gitterfehlern die Phononenenergie erhalten bleibt, wurde dort das Variationsverfahren in bezug auf eine Fläche $\omega^j = \omega^{j'} = \omega$ durchgeführt. Es war dann nur notwendig, die Winkelabhängigkeit der gestörten Verteilungsfunktion durch Vergleichsfunktionen zu approximieren, wodurch ein von der Frequenz abhängiges Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten der Vergleichsfunktionen entsteht. Für die Koeffizienten dieses Gleichungssystems ergab sich

$$T_{nn'}^{jj'}(\omega) = a(\omega, T) t_{nn'}^{jj'} \quad (5.1a)$$

$$\text{mit } a(\omega, T) = \frac{3}{512(2\pi)^3} \frac{b^2 L}{KT(c^T)^7 \varrho_0^2} N_0(\omega) [N_0(\omega) + 1] \omega^3, \quad (5.1b)$$

L : Kantenlänge des Kristalls.

Die Größen $t_{nn'}^{jj'}$ sind vom Verzerrungsfeld der Stufenversetzung und von den elastischen Konstanten A_1 bis A_5 abhängig. Als einzige Symmetrieeigenschaft ist bei einer geraden Stufenversetzung die Beziehung

$$T_{nn'}^{jj'} = T_{n-m, n'-m'}^{jj'} = T_{nn'}^{jj'} \quad (5.2)$$

mit der zusätzlichen Forderung, daß $m + m'$ gerade sein muß, aufzuführen. Aus den Größen $T_{nn'}^{jj'}$ lassen sich die $M_{nn'}^{jj'}$ durch einfache Integration über

die Frequenz gemäß

$$M_{nn'}^{jj'} = \int_0^\infty (\hbar \omega)^{r+r'} T_{nn'}^{jj'}(\omega) d\omega \quad (5.3a)$$

gewinnen, wodurch in dem uns interessierenden Fall der Ausdruck

$$M_{nn'}^{jj'} = \frac{3}{512(2\pi)^3} \frac{b^2 L}{(c^T)^7 \varrho_0^2 \hbar^4} (KT)^{r+r'+3} \cdot (r+r'+3)! \zeta(r+r'+3) t_{nn'}^{jj'} \quad (5.3b)$$

entsteht (ζ : RIEMANNsche Zeta-Funktion).

Um die Gitterwärmeleitfähigkeit zu bestimmen, die sich unter dem Einfluß der Streuung der Gitterschwingungen aneinander und an den Versetzungen einstellen wird, müssen wir die entsprechenden Matrixelemente nach Gl. (4.18) und (5.3b), die wir durch die Indizes N und V unterscheiden wollen, addieren. Hierbei ist vor allem die unterschiedliche Temperaturabhängigkeit der jeweiligen Summanden bemerkenswert, die zur Folge hat, daß bei tiefen Temperaturen die Versetzungen die Größe des thermischen Widerstandes bestimmen, während bei hohen Temperaturen auch die Drei-Phononen-Prozesse eine Rolle spielen. Beschränken wir uns der Einfachheit halber auf $n=1$ und zerlegen außerdem das Gleichungssystem (4.4) für $m=\pm 1$ in Real- und Imaginärteile, so werden wir auf

$$\sum_{j,r'} \left(M_{1-1}^{j-1} + M_{11}^{j1} \right) \left(\frac{\Im_{1-1}^{j-1} + \Im_{11}^{j1}}{\sqrt{2}} \right) = \left\{ i_x \right\} N_r^j, \quad (5.4a)$$

$$\sum_{j,r'} M_{11}^{00} \Im_{11}^{01} = i_z N_r^j \quad (5.4b)$$

mit

$$N_r^j = - \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{V_0}{(2\pi)^3} \frac{(KT)^{r+3}}{\hbar^3 (c^j)^2} (r+3)! \zeta(r+3) \quad (5.4c)$$

geführt, wenn wir mit i_x , i_y und i_z die Einheitsvektoren eines kartesischen Koordinatensystems bezeichnen. In (5.4a) ist das obere Vorzeichen auf der rechten Seite mit dem Vektor i_x , das untere hingegen mit dem Vektor i_y verknüpft. Die von Null verschiedenen Elemente des Tensors der thermischen Leitfähigkeit berechnen sich aus

$$\kappa_{xx} = \frac{1}{TV_0} \sum_{j,r} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Im_{1-1}^{j-1} - \Im_{11}^{j1} \right) \cdot i_x N_r^j, \quad (5.5a)$$

¹⁷ H. BROSS, A. SEEGER u. R. HABERKORN, Phys. Status Solidi 3, 1126 [1963], im folgenden als III zitiert.

¹⁶ P. GRUNER, Phys. Status Solidi, im Druck.

$$\kappa_{yy} = \frac{1}{T V_0} \sum_{j,r} \frac{1}{\sqrt{2} i} \left(3 \frac{j}{1} \frac{1}{r} + 3 \frac{1}{1} \frac{j}{r} \right) \cdot i_y N_r^j, \quad (5.5b)$$

$$\kappa_{zz} = - \frac{1}{T V_0} \sum_{j,r} 3 \frac{j}{1} \frac{1}{r} \cdot i_z N_r^j. \quad (5.5c)$$

Bei der Auflösung des Gleichungssystems sind noch zwei Dinge erwähnenswert. Wegen der Erhaltung der z -Komponente des Ausbreitungsvektors der Gitterschwingungen bei der Streuung an den Versetzungen genügen die $M_{V \frac{j}{n} \frac{j'}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ der Beziehung

$$\beta M_{11}^{00} + M_{11}^{00} + M_{11}^{00} = 0, \quad (5.6)$$

wodurch die Determinante des Gleichungssystems (5.4b) verschwindet, weil ja für die Drei-Phononen-Prozesse dieselbe Beziehung gilt. Daraus folgt weiter, daß in z -Richtung auch durch das Zusammenwirken der beiden Streumechanismen kein von Null verschiedener Widerstand entsteht. Wie wir schon erwähnt haben, enthalten die Größen $M_{N \frac{j}{n} \frac{j'}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ die Temperatur in höherer Potenz als die $M_{V \frac{j}{n} \frac{j'}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$. Bei sehr hohen Temperaturen können deshalb die $M_{N \frac{j}{n} \frac{j'}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ wesentlich größer als die $M_{V \frac{j}{n} \frac{j'}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ werden. Letztere dürfen jedoch keinesfalls vernachlässigt werden, weil sie „katalytisch“ für die Einstellung des thermischen Gleichgewichts wirksam sind. Als asymptotische Darstellung für den Fall hoher Temperaturen finden wir für die Entwicklungskoeffizienten die Beziehung

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(3 \frac{j}{1} \frac{1}{r} \mp 3 \frac{1}{1} \frac{j}{r} \right) = \left\{ \begin{array}{l} i_x \\ i_y \end{array} \right\} \frac{\sum_{j',r'} N_{r'}^{j'} |M_N|^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}}{\sum_{j',j'',r'} \left(M_{V \frac{1}{1} \frac{1}{1}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}} \mp M_{V \frac{1}{1} \frac{1}{1}}^{\frac{j}{r} \frac{j''}{r'}} \right) |M_N|^{\frac{j}{r} \frac{j''}{r'}}}, \quad (5.7)$$

wobei $|M_N|^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ die zum Element $M_{N \frac{1}{n} \frac{1}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ gehörende

Unterdeterminante der Matrix $M_{N \frac{j}{n} \frac{j'}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ bezeichnet.

Setzt man diesen Ausdruck in die Gln. (5.5a und b) für die Wärmeleitfähigkeit ein und beachtet die Temperaturabhängigkeit der verschiedenen Größen, so ergeben sich die Komponenten κ_{xx} und κ_{yy} proportional zu T^2 . Wir finden also dieselbe Temperaturabhängigkeit – jedoch mit einem anderen Proportionalitätsfaktor – wie im Gebiet tiefer Temperaturen, wo der Einfluß der Drei-Phononen-Prozesse

völlig vernachlässigt werden kann. Die zwischen diesen beiden Grenzfällen interpolierende Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit kann nur durch numerische Rechnung ermittelt werden.

Die numerische Rechnung wurde nur für den Fall von Kupfer durchgeführt, wobei dieselben Zahlenwerte für die elastischen Konstanten A_i , für die Dichte ϱ_0 und für den BURGERS-Vektor b wie in den vorangehenden Mitteilungen zugrunde gelegt wurden. Wenn wir die Größen $M_{V \frac{j}{n} \frac{j'}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ und $M_{N \frac{j}{n} \frac{j'}{n'}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ in der Form

$$M_{V \frac{1}{1} \frac{1}{1}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}} = \frac{V_0}{(2\pi)^7} \frac{N_V b^2}{(c^T)^3 \hbar^4} (K T)^{r+r'+3} \cdot (r+r'+3)! \zeta(r+r'+3) m_{V \frac{1}{1} \frac{1}{1}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}} \quad (5.8)$$

und

$$M_{N \frac{1}{1} \frac{1}{1}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}} = \frac{V_0}{(2\pi)^{10}} \frac{(K T)^{r+r'+7}}{\varrho_0 \hbar^7 (c^T)^8} m_{N \frac{1}{1} \frac{1}{1}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}} \quad (5.9)$$

(N_V : Versetzungsdichte)

darstellen, dann sind die dimensionslosen Größen $m_{V \frac{1}{1} \frac{1}{1}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ und $m_{N \frac{1}{1} \frac{1}{1}}^{\frac{j}{r} \frac{j'}{r'}}$ nur vom Verhältnis der elastischen Konstanten A_i/A_2 ($i=3, 4, 5$) und vom Verhältnis β der Schallgeschwindigkeiten abhängig. Die für Kupfer erhaltenen Zahlenwerte sind in Tab. 2 und 3 angegeben.

In dem vorliegenden Problem ist der thermische Widerstand nur in den beiden Grenzfällen hoher und tiefer Temperaturen der Versetzungsdichte proportional, im Zwischengebiet hingegen eine komplizierte Funktion von N_V . Durch Einführen einer reduzierten Temperatur

$$\tilde{T} = K T / (\varrho_0 h^3 (c^T)^5 b^2 N_V)^{1/4} \quad (5.10)$$

und einer reduzierten Wärmeleitfähigkeit

$$\tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{[K^2 (c^T)^3 \varrho_0 / (h b^2 N_V)]^{1/2}} \quad (5.11)$$

ist es aber möglich, eine für den kombinierten Streumechanismus charakteristische Funktion $\tilde{\kappa}(\tilde{T})$ anzugeben, die in Abb. 2 dargestellt ist. Die Kurven (1) bzw. (2) beziehen sich dabei auf die Komponenten κ_{xx} bzw. κ_{yy} . Die durch (3) gekennzeichnete Kurve stellt den Mittelwert des Leitfähigkeitstensors κ für statistische Verteilung der Versetzungen dar, der aus

$$\tilde{\kappa}^{-1} = \frac{1}{3} [\kappa_{xx}^{-1} + \kappa_{yy}^{-1}] \quad (5.12)$$

berechnet wurde. Abb. 2 zeigt, daß bis zu einer reduzierten Temperatur $\tilde{T} = 0,2$ – das entspricht bei

r	r'	00	01	10	11
L	L				
0	0				
m_N	$1 \cdot 10^{-6}$	- 3,5340	- 2,4436 · 10 ¹	- 2,4436 · 10 ¹	- 2,1380 · 10 ²
r	r'				
T	T				
0	0				
m_N	$1 \cdot 10^{-6}$	- 0,7154	- 2,4270	- 2,4270	- 1,2583 · 10 ¹
r	r'				
L	T				
0	0				
m_N	$1 \cdot 10^{-6}$	1,2951	5,9282	1,0004 · 10 ¹	5,1867 · 10 ¹
r	r'				
T ₁	T ₂				
0	0				
m_N	$1 \cdot 10^{-6}$	9,2655 · 10 ⁻¹	3,5676	3,5676	1,5089 · 10 ¹
r	r'				
T ₁	T ₂				
1 - 1					
m_N	$1 \cdot 10^{-6}$	- 1,1934 · 10 ⁻¹	- 4,5936 · 10 ⁻¹	- 4,5936 · 10 ⁻¹	- 1,9342
r	r'				

Tab. 2. Kenngrößen für die Drei-Phononen-Wechselwirkung in Kupfer.

j	j'	m_V	$\frac{j}{1} \frac{j'}{1}$	m_V	$\frac{j}{1} \frac{j'}{-1}$
L	L		5,2243 · 10 ¹		8,5682 · 10 ²
T ₁	T ₁		1,7149 · 10 ³		1,4376 · 10 ⁴
T ₂	T ₂		5,2785 · 10 ²		1,2104 · 10 ⁴
L	T ₁		1,2325 · 10 ²		1,7095 · 10 ²
L	T ₂		- 8,7141		- 3,0729 · 10 ²
T ₁	T ₂		3,2488 · 10 ³		- 4,4071 · 10 ³

Tab. 3. Kenngrößen für die Streuung von Gitterwellen an Stufenversetzungen in Kupfer.

einer Versetzungsdichte von 10^{11} Linien pro cm² einer Temperatur von $T = 25^\circ\text{K}$ – die Normalprozesse völlig vernachlässigt werden können. Unterhalb dieser Temperatur ist im Einklang mit (III)

$$\tilde{\kappa} = 3,54 \tilde{T}^2.$$

Im Grenzfall hoher Temperaturen, der durch die gestrichelte Kurve angedeutet ist, ist nach dem oben Gesagten die Wärmeleitfähigkeit wieder proportional zu T^2 , wobei jedoch

$$\tilde{\kappa} = 2,13 \tilde{T}^2$$

ist. Im Zwischengebiet kann kein Potenzgesetz für die Temperaturabhängigkeit angegeben werden.

Die Verfasser möchten Herrn Prof. Dr. A. SEEGER für die Anregung zu der vorliegenden Untersuchung und für viele Diskussionen herzlich danken.

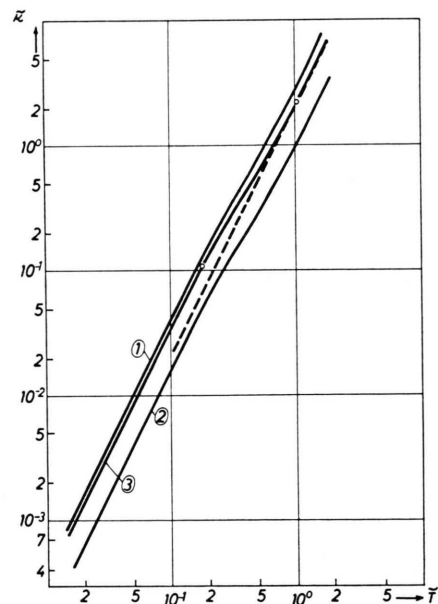


Abb. 2. Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Kupfer infolge des Zusammenspiels der Streuung von Gitterwellen aneinander und an Stufenversetzungen (in reduzierten Einheiten). Kurve 1: die Wärmeleitfähigkeit in Richtung des BURGERS-Vektors, Kurve 2: die Wärmeleitfähigkeit in der Gleitebene senkrecht zum BURGERS-Vektor, Kurve 3: gemittelte Wärmeleitfähigkeit (gestrichelte Kurve ist Asymptote für hohe Temperaturen).