



Achim Sauerzapf (Autor)

**Über die Rolle der Anharmonizität beim
Wärmetransport in geordneten und ungeordneten
nichtmetallischen Materialien**

Achim Sauerzapf

**Über die Rolle der Anharmonizität
beim Wärmetransport in geordneten
und ungeordneten nichtmetallischen
Materialien**



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3547>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Kurzfassung

Den experimentellen Hintergrund dieser Arbeit bilden Messungen der Wärmeleitfähigkeit an (elektrisch) nichtleitenden Kristallen und amorphen Materialien, wobei die ersten Experimente zu amorphen Stoffen in der Pohlschen Gruppe [1] durchgeführt wurden. Bei kristallinen Materialien hat man bei sehr tiefen Temperaturen einen Anstieg der Wärmeleitfähigkeit mit T^3 , während anschließend, nach Erreichen eines Maximums, die Wärmeleitfähigkeit exponentiell abfällt. Bei ungeordneten Materialien, wie z.B. Glas, ist die Wärmeleitfähigkeit bei sehr tiefen Temperaturen proportional T^2 ; es schließt sich ein Plateau an, gefolgt von einem erneuten Anstieg ungefähr proportional T .

Bei den theoretischen Modellen zur Wärmeleitfähigkeit spielen die Anharmonizität und die Unordnung eine entscheidende Rolle. Wir untersuchen in dieser Arbeit den Einfluß von Unordnung und Anharmonizität auf den Energietransport in archetypischen eindimensionalen Modellsystemen (jeweils ideale und gestörte Hamilton- [2] bzw. FPU-Kette [3, 4]).

Im ersten Teil der Arbeit konzentrieren wir uns bei drei archetypischen singulären Anregungstypen, also der Q-Anregung (punktuelle Auslenkung), der P-Anregung (punktuelle Impulsanregung) und der (kombinierten) PQ-Anregung bei benachbarten Punkten, auf den Ausbreitungsvorgang ohne thermischen Hintergrund. Bei den idealen Systemen hat man stets einen ballistischen Energietransport ($M_2 \sim \tau^2$). Das Auftreten von Anharmonizität führt zu einer Modifizierung des Ausbreitungsmechanismus durch unterschiedliche Arten von solitären Moden (Q-Anregung: selbstlokalisierte Solitonen; P-Anregung: Überschall-(bzw. Kink-)Solitonen und PQ-Anregung: subsonische Solitonen), wobei die Ultraschall-Solitonen und die subsonischen Solitonen den Transport verstärken, während die selbstlokalisierten Solitonen zu einer Abschwächung führen.

Bei den gestörten Systemen hat man ohne Anharmonizität bei einer P-Anregung einen superdiffusiven Transport ($M_2 \sim \tau^{3/2}$) und bei einer Q-Anregung einen diffusiven Transport ($M_2 \sim \tau$). Die Hinzunahme von Anharmonizität hat nun je nach Anregungstyp einen konstruktiven (P-Anregung) oder destruktiven (Q-Anregung) Effekt auf den Energietransport.

Im zweiten Teil der Arbeit wurden die Transporteigenschaften in Abhängigkeit von einer thermischen Hintergrundanregung betrachtet, die durch eine geeignete statistische Anfangsbedingung erzeugt wurde. Auf dem so generierten thermischen Hintergrund wurden dann punktuelle Zusatzanregungen (P und Q) eingebracht, so daß die Untersuchung von Energietransportvorgängen in Abhängigkeit von der durch den Hintergrund vorge-

gegebenen Temperatur möglich wurde.

Es zeigt sich, daß bei den ungeordneten anharmonischen Modellsystemen bis zum Temperaturbereich $kT = 0.2, \dots, 0.5$ bei einer P-Zusatzanregung der Energietransport mit steigenden Temperaturen immer mehr zunimmt, wohingegen bei einer Q-Zusatzanregung der Energietransport immer stärker gehemmt wird. Bei extrem hohen Temperaturen drehen sich die Verhältnisse um, d.h. bei der P-Zusatzanregung nimmt der Energietransport mit T ab, möglicherweise durch die verstärkte Entstehung von selbstlokalisierten Moden. Bei der Q-Zusatzanregung jedoch nimmt der Energietransport mit T zu, was vielleicht durch Aufbrechen von lokalisierten Moden zustande kommt.

Für den Wärmetransport von besonderer Bedeutung ist die Untersuchung einer P-Anregung, da man im allgemeinen experimentell mit diesem Anregungstypus eine lokale Temperaturanregung bewirkt. Aus der Untersuchung dieses Anregungstyps folgt das wichtigste Ergebnis dieser Arbeit. Es zeigt sich nämlich, daß sich die Energieausbreitung bei einer „nackten“ P-Anregung anders verhält als bei einer P-Anregung über einem thermischen Hintergrund. Im letzteren Fall sorgt die thermische Hintergrundanregung für die Persistenz der Anharmonizität bzgl. des Transportvorgangs, auch wenn die lokalen Temperaturveränderungen klein sind, so daß die Propagation den konstruktiven Einfluß der Anharmonizität andauernd „spürt“.

Damit können wir eine Verbindung zum Wiederanstieg der Wärmeleitfähigkeit bei amorphen, nichtmetallischen Materialien bei Temperaturen oberhalb der Plateauregion herstellen und, mit aller Vorsicht, ein theoretisches Verständnis für diesen experimentellen Befund gewinnen.

Kapitel 1

Einleitung

Die vorliegende Arbeit wird motiviert durch die seit etwa dreißig Jahren (1971) andauernde Diskussion über den kontrastierenden Einfluß der Anharmonizität und der Unordnung auf den Energietransport. Angestoßen wurde diese Diskussion hauptsächlich durch die Experimente in der Pohlschen Gruppe [1].

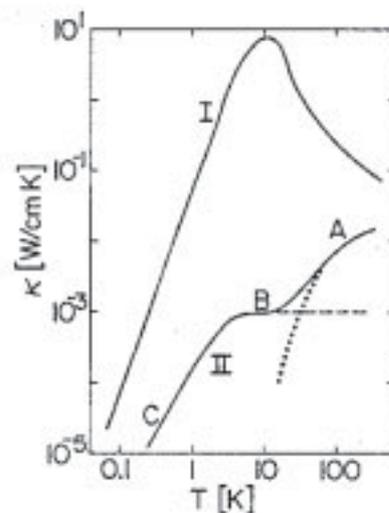


Abbildung 1.1: *Wärmeleitfähigkeit von nichtmetallischen Kristallen und amorphen Stoffen. Aufgetragen ist die Wärmeleitfähigkeit in $[\frac{W}{cm \cdot K}]$ über der Temperatur in $[K]$, in einer renormierten Zusammenfassung der Messungen an einer größeren Anzahl von Materialien.*

Bei nichtmetallischen Kristallen hat man bei sehr tiefen Temperaturen einen Anstieg der Wärmeleitfähigkeit mit T^3 , während anschließend nach Erreichen eines Maximums die Wärmeleitfähigkeit exponentiell abfällt, siehe Kurve „I“ in Abb. 1.1.

Bei ungeordneten Materialien wie z.B. Glas ergibt sich ein fundamental anderes Temperaturverhalten der Wärmeleitfähigkeit, wobei Experimente hierzu erstmalig von R. Pohl [1] durchgeführt wurden (s.o.). Bei elektrisch nichtleitenden amorphen Stoffen steigt die Wärmeleitfähigkeit bei sehr tiefen Temperaturen mit T^2 an. Danach geht die Wärmeleitfähigkeitskurve in ein Plateau über, um anschließend wieder ungefähr proportional T anzusteigen, siehe Kurve „II“ in Abb. 1.1.

Es gibt demgemäß bei der Kontrastierung des Verhaltens der Wärmeleitfähigkeit zwischen nichtleitenden kristallinen und nichtleitenden glasartigen Substanzen drei markante Temperaturbereiche unterhalb von ca. 100 K, in denen jeweils ein völlig unterschiedliches Verhalten der beiden Substanzgruppen vorliegt.

Das Verhalten in allen drei Bereichen glaubt man bei Kristallen theoretisch gut verstanden zu haben, wobei bei ganz tiefen Temperaturen ein Randstreumechanismus angenommen wird und im Bereich des Maximums Streuungen an Verunreinigungen angenommen werden. Der Abfall bei höheren Temperaturen wurde anharmonischen Streuprozessen zugeschrieben.

Bei amorphen Substanzen sind alle drei Temperaturbereiche mikroskopisch noch wenig verstanden. Wir werden auf diese Problematik in den folgenden Kapiteln noch ausführlich eingehen. Die Hauptzielrichtung dieser Arbeit liegt in der Diskussion des Wiederanstiegs der Wärmeleitfähigkeit in amorphen Systemen, also in einem Bereich, bei der die Anharmonizität des Materials eine große Rolle spielen sollte, da nach den konventionellen Theorien bei Kristallsystemen in diesem Bereich anharmonische Streuprozesse dominieren sollten. Man hat also in der experimentellen Situation bzgl. des Transportverhaltens bei Kristallen einen destruktiven Einfluß der Anharmonizität gegenüber einem konstruktiven Verhalten bei glasartigen Substanzen.

Bei der theoretischen Erklärung des Verhaltens der Wärmeleitfähigkeit oberhalb ca. 10 K kommt der Einfluß der Anharmonizität und der Unordnung ins Spiel. Bezüglich der Rolle der Anharmonizität in kristallinen Substanzen haben Rudolf Peierls [5,6] und später Klemens [7] und Carruthers [8] Theorien über Phonon-Phonon Streuprozesse entwickelt, die für den exponentiellen Abfall der Wärmeleitfähigkeit bei Kristallen verantwortlich sein sollen. In all diesen Arbeiten initiiert die Anharmonizität einen Streumechanismus (Stichwort: „Umklapp-Streuprozesse“) und spielt demgemäß eine destruktive Rolle bzgl. des Transports. Dies wird jedoch von uns in Kapitel 3 noch im Detail diskutiert werden.

Tatsächlich kann sich der Einfluß der Anharmonizität auch in einer fundamental anderen Art und Weise manifestieren, nämlich dadurch, daß solitäre Wellen bzw. Solitonen entstehen. Dies wird in unseren Untersuchungen eine große Rolle spielen.

Die erste solitäre Welle wurde im August 1834 von dem schottischen Schiffsbauingenieur und Wissenschaftler J.S. Russell im Edinburgh-Glasgow Kanal entdeckt [9–12]:

“I believe I shall best introduce the phaenomenon by describing the circumstances of my own first acquaintance with it. I was observing the motion of a boat which was rapidly drawn along a narrow channel by a pair of horses, when the boat suddenly stopped – not so the mass of water in the channel which it had put in motion; it accumulated round the prow of the vessel in a state of violent agitation, then suddenly leaving it behind, rolled forward with great velocity, assuming the form of a large solitary elevation, a rounded, smooth and well-defined heap of water, which continued its course along the channel apparently without change of form or diminution of speed. I followed it on horseback, and overtook it still rolling on at a rate of some eight or nine miles an hour, preserving its original figure some thirty feet long and a foot to a foot and a half in height. Its height

gradually diminished, and after a chase of one or two miles I lost it in the windings of the channel.”

J.S. Russell führte daraufhin Experimente über die Ausbreitung von Wasserwellen durch, womit er wichtige erste Erkenntnisse über die zentralen Eigenschaften solitärer Wellen gewann.

Der Begriff Soliton wurde 1965 von N.J. Zabusky und M.D. Kruskal [13] für spezielle wellenartige Lösungen der Korteweg-de-Vries-Gleichung eingeführt, die im Laufe der Zeit ihre Gestalt nicht ändern [14].

Solitonen sind heutzutage nicht nur von wissenschaftlichem, sondern auch technologischen Interesse, z.B. bei der Datenübertragung mit Licht in Glasfasern. Beim konventionellen Datentransfer mittels Glasfasern sind über große Distanzen hinweg, also z.B. bei transatlantischen Verbindungen, in gewissen Abständen Verstärker-Relaisstationen vonnöten, um das zu transportierende Signal aufrechtzuerhalten. Dies liegt daran, daß die Glasfasern keine „idealen Lichtschläuche“ sind, die ein Lichtsignal ohne jede Veränderung vom Sender zum Empfänger transportieren können [15]. Die Abweichungen bestehen in Lichtenergieverlusten, Dispersion und Verzerrung der Lichtpulse durch Nichtlinearitäten. Diese Abweichungen würden sich durch die Erzeugung von solitären Lichtpulsen (Stichwort: „dispersion-managed solitons“) weitgehend vermeiden lassen. Für eine ausführliche Darstellung der technologischen Relevanz von Solitonen verweisen wir auf [15].

In der vorliegenden Arbeit werden solitäre Moden in der Fermi-Pasta-Ulam Kette¹ untersucht. Das Konzept der Fermi-Pasta-Ulam Kette wurde im Jahr 1955 entworfen. E. Fermi hatte Mitte der fünfziger Jahre des letzten Jahrhunderts die Idee, ein Computer-Experiment mit gekoppelten anharmonischen Oszillatoren durchzuführen. Diese Arbeit begann er gemeinsam mit dem Computer-Wissenschaftler J. Pasta und dem Mathematiker S. Ulam am Los Alamos National Laboratory an einem der ersten Computer der Welt, dem MANIAC I [3, 4, 16].

Die Überlegungen von E. Fermi gehen zurück auf die sogenannte „Hamiltonkette“. Dabei handelt es sich um eine von W.R. Hamilton konzipierte eindimensionale Kette, aufgebaut aus harmonisch gekoppelten monoatomaren Massenpunkten [2, 17], näheres dazu siehe Kapitel 4.

Fermi interessierte sich nun dafür, wie sich die physikalischen Eigenschaften einer solchen Kette verändern, wenn man im Oszillatorpotential nicht-harmonische Glieder hinzunimmt. E. Fermi, J. Pasta und S. Ulam (FPU) untersuchten drei verschiedene Fälle von Ortsabhängigkeiten der Oszillatorkraft:

- quadratisch, entsprechend einem kubischen Potential („kubische FPU-Kette“)
- kubisch, entsprechend einem quartischen Potential („quartische FPU-Kette“)
- gebrochen linear (bzw. stufenweise linear) [3]

¹Die FPU-Kette wird in Kapitel 4 ausführlich dargestellt.