

# Дистанционный семинар №3

## Решеточная теплоёмкость и теплопроводность

Кубышкин А.В. - февраль 2021

# Температурная зависимость молярной теплоёмкости решетки

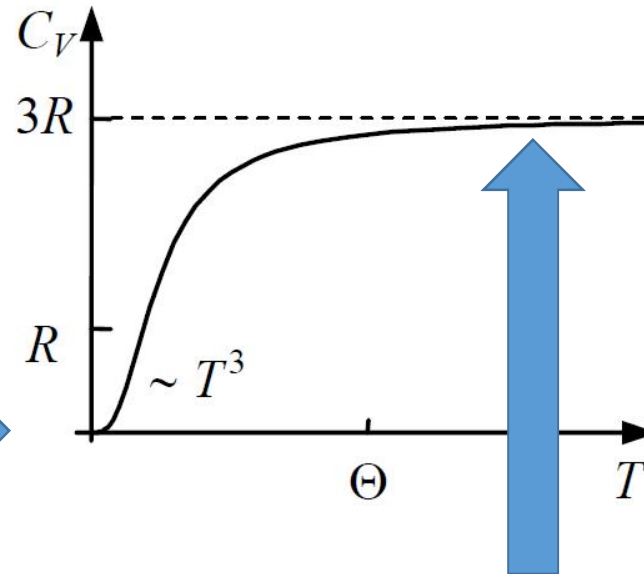
Теория теплоёмкости Дебая:

$$E - E_0 = 9 N k_B T \left( \frac{T}{\Theta} \right)^3 \times \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$$T \ll \Theta, \quad \Theta/T \gg 1$$
$$\int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \approx \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$$
$$E - E_0 = \frac{3 \pi^4 N k_B T^4}{5 \Theta^3}$$
$$C = \frac{12 \pi^4 N k_B}{5} \left( \frac{T}{\Theta} \right)^3$$

Закон  $T^3$  Дебая

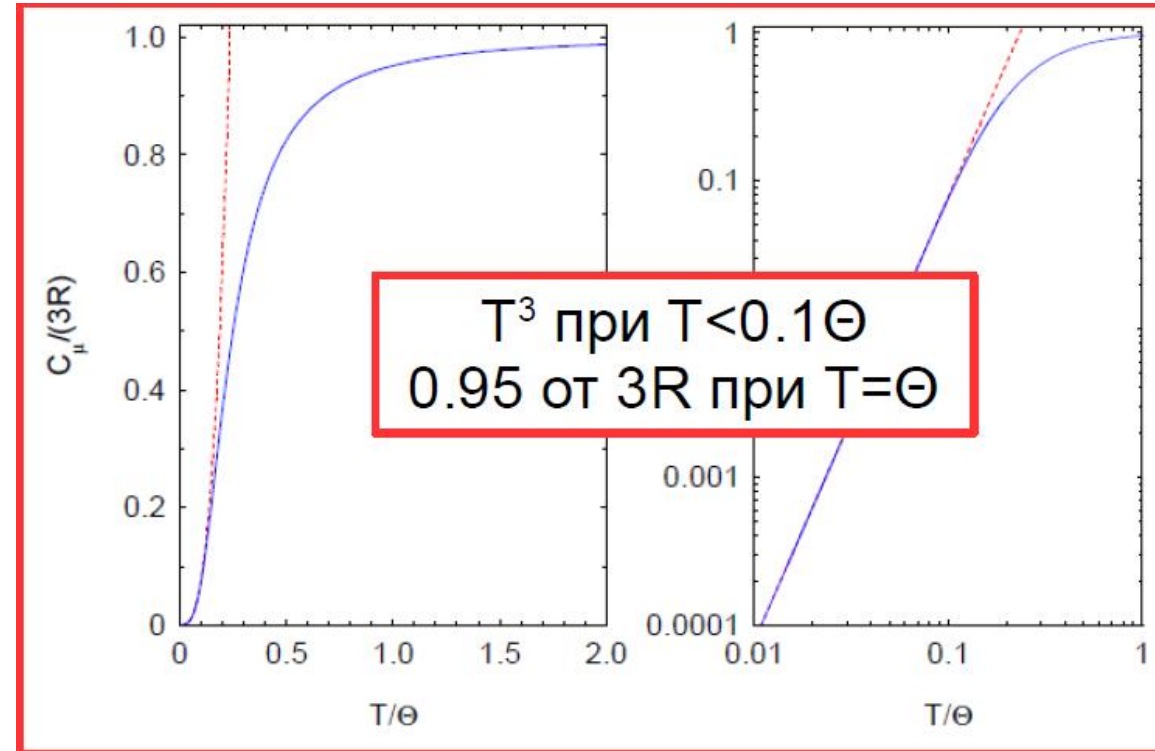
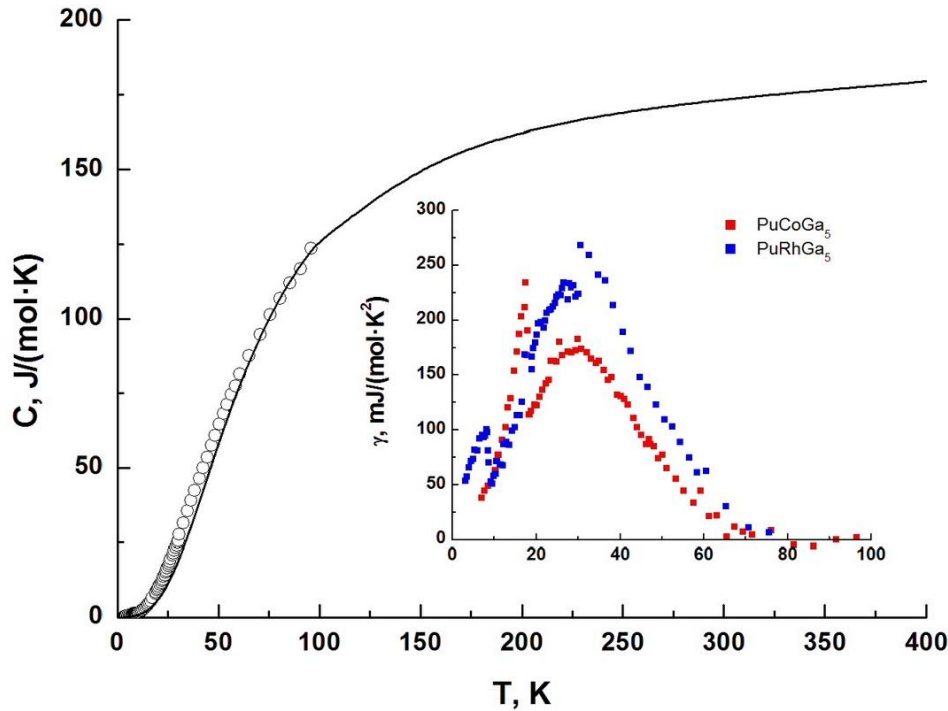
Задача 2.34 о  
вкладе в  
теплоёмкость  
оптической ветви



Закон  
Дюлонга  
и Пти

$$T \gg \Theta, \quad \Theta/T \ll 1$$
$$\int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \approx \int_0^{\Theta/T} x^2 dx = \frac{1}{3} \left( \frac{\Theta}{T} \right)^3$$
$$E - E_0 = 3 N k_B T$$
$$C = 3 N k_B$$

# Сравнение расчетов по модели Дебая с экспериментом



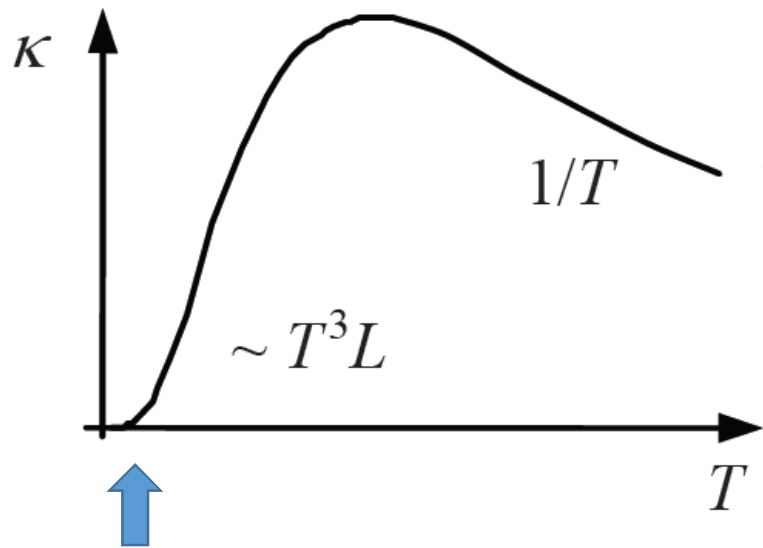
Альтернативная модель - теория теплоёмкости Эйнштейна:

$$D(\omega) = N \delta(\omega - \omega_0) \longrightarrow C = N k_B \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_0 / (k_B T)}}{(e^{\hbar \omega_0 / (k_B T)} - 1)^2} = \begin{cases} \propto e^{-\hbar \omega_0 / (k_B T)}, & k_B T \ll \hbar \omega_0 \\ N k_B, & k_B T \gg \hbar \omega_0 \end{cases}$$

# Температурная зависимость коэффициента теплопроводности решетки

$$\mathbf{q} = -\kappa \text{ grad } T, \quad \kappa = (1/3) C_V v l, \quad \leftarrow l = (n_\phi \sigma)^{-1}$$

$$\uparrow v = s$$



$\leftarrow$  Высокие температуры:  $T \gg \Theta$

$$\hbar \omega \sim k \Theta \quad \longrightarrow \quad n_\phi \sim \rho / \hbar \omega_D = \rho / k \Theta \sim 3 N_1 (T / \Theta)$$

$$\kappa \sim 3 N_1 k s (n_\phi \sigma)^{-1} \sim T^{-1}$$

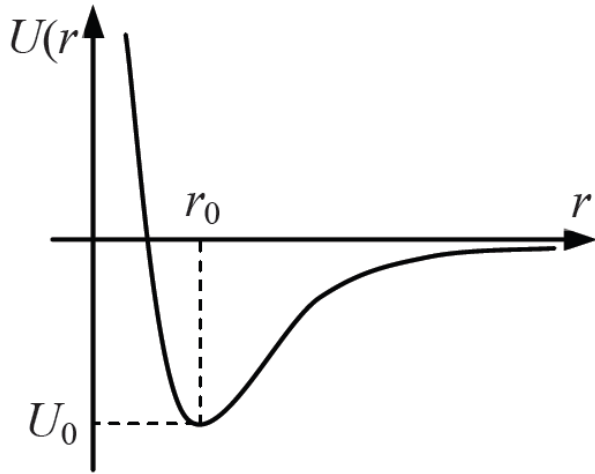
$$\downarrow l \sim T^{-1}$$

Низкие температуры:  $T \ll \Theta$

$$C_V \sim T^3 \quad l \rightarrow L$$

Задача 2.64 о рассеянии фононов на примесях

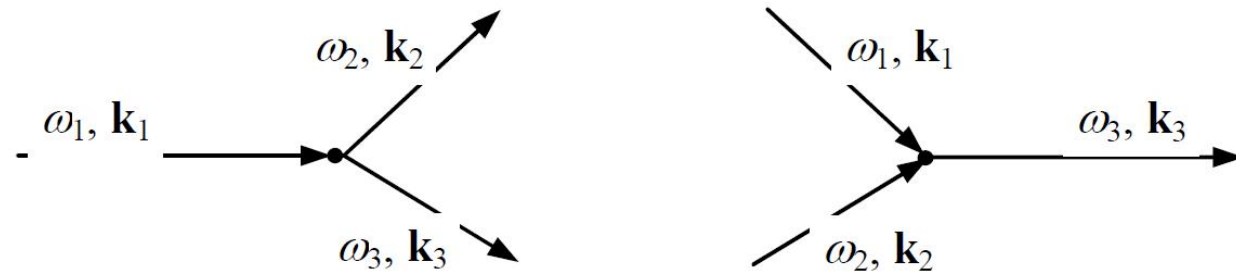
# Взаимодействие фононов. Процессы переброса



$$U(u) = U_0 + \frac{1}{2}\kappa u^2 + \frac{1}{3}\kappa_3 u^3 + \frac{1}{4}\kappa_4 u^4 + \dots$$

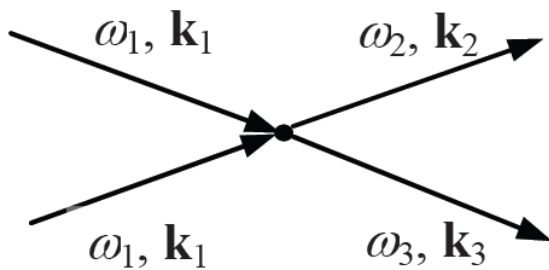
$$f(u) = -\frac{\partial U(u)}{\partial u} = -\kappa u - \kappa_3 u^2 - \kappa_4 u^3 + \dots$$

Учет второго слагаемого – трехфононные процессы

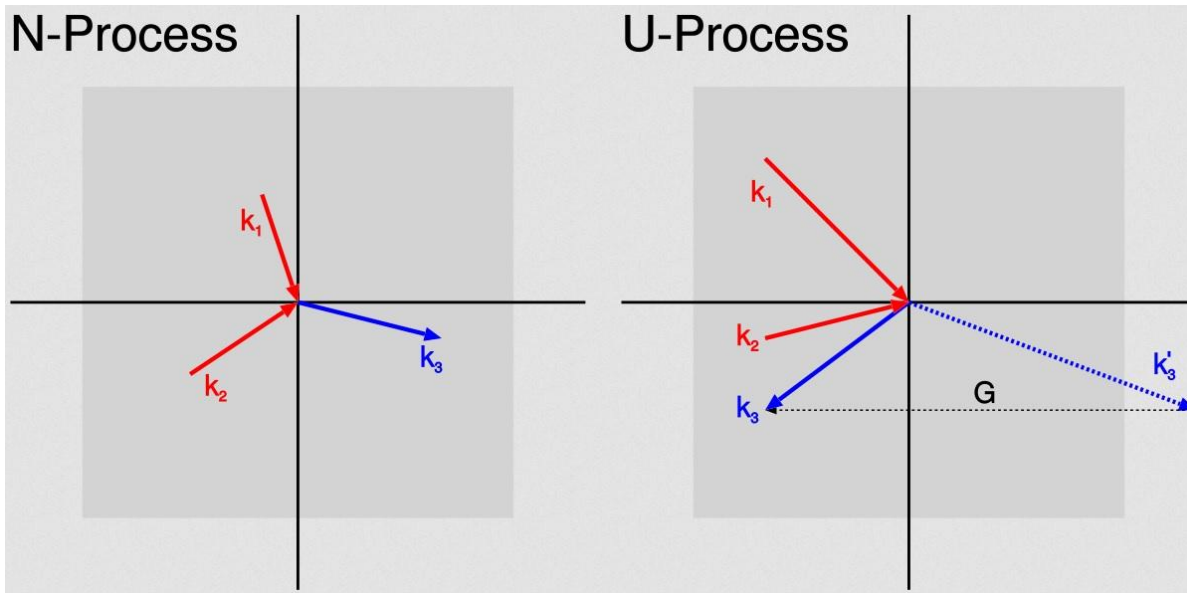


$$\hbar\mathbf{k}_1 + \hbar\mathbf{k}_2 = \hbar\mathbf{k}_3 + 2\pi\hbar\mathbf{b}m, \quad m = 0, \pm 1,$$

Учет третьего слагаемого – четырехфононные процессы



# Столкновения фононов и теплопроводность



Высокие температуры:  $T \gg \Theta$

$$\omega \sim \omega_D, \quad k \sim \omega_D/s \sim k_m$$

Температурная зависимость коэффициента теплопроводности полностью определяется длиной свободного пробега фононов

Низкие температуры:  $T \ll \Theta$

Концентрация дебаевских фононов экспоненциально мала  $n_\phi \sim \exp(-\hbar\omega_D/kT)$

Длина свободного пробега экспоненциально растет  $l \approx (n_\phi \sigma)^{-1} \sim \exp(\hbar\omega_D/kT) = \exp(\Theta/T)$

Коэффициент теплопроводности должен бы быть  $\kappa = C_V s l / 3 \sim T^3 \exp(\Theta/T)$

Вывод: не всякое столкновение фононов передает тепло.

Только переброс!

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_{\phi-\phi}} + \frac{1}{L}, \quad l_{\phi-\phi} = \frac{1}{n\sigma}$$



# Численные оценки и экспериментальные данные

$$\Theta = \hbar \omega / k_B = \frac{\hbar s}{k_B} (6 \pi^2 n_{\text{яч}})^{1/3}$$

$$\kappa a^2 / 2 = M \omega^2 a^2 / 2 \sim M \omega_D^2 a^2 / 2 \sim \varepsilon_B \Rightarrow \omega_D \sim \sqrt{2 \varepsilon_B / M r_B^2}$$

$$\Theta \sim \frac{3 \hbar s}{k_B a} \sim \frac{3 \times 10^{-27} \times 3 \times 10^5}{1.4 \times 10^{-16} \times 3 \times 10^{-8}} \sim 2 \times 10^2 \text{ K} = 200 \text{ K}$$

$$\hbar \omega_D \sim \hbar \sqrt{\frac{2 \varepsilon_B}{M r_B^2}} = \varepsilon_B \sqrt{\frac{2 \hbar^2}{M \varepsilon_B r_B^2}} = \varepsilon_B \sqrt{\frac{4 \hbar^2}{M e^2 r_B}} \sim \varepsilon_B \sqrt{\frac{m \hbar^2}{M m e^2 r_B}} = \varepsilon_B \sqrt{\frac{m}{M}}$$

$$\sqrt{m/M} \sim 10^{-2} \Rightarrow k \Theta \sim 0,1 \text{ эВ}, \Theta \sim 10^3 \text{ K}$$

вещество	$\Theta$ , K	вещество	$\Theta$ , K	вещество	$\Theta$ , K
Алмаз	2200	Ag	227	Si	645
Mg	400	Au	162	Ge	374
Cu	344	He	26	Ar	92
Fe	470	NaCl	275	Pb	105
Al	428	Pt	239		

$$s \approx \frac{a \omega_D}{\pi} = \frac{a}{\pi \hbar} \hbar \omega_D$$

$$s \sim \frac{v_B}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{M}} \sim 3 \text{ км/с}$$

**Задача 2.34 о влиянии небольшого числа атомов в кластере**