

Колебания кристаллической решетки и ее тепловые свойства.

§6 Тепловые свойства

План:

- 1. Теплоемкость кристаллических решеток.*
- 2. Взаимодействие фононов и тепловое расширение.*
- 3. Теплопроводность изоляторов.*
- 4. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности при высоких и низких температурах.*

1 Теплоемкость кристаллических решеток

$$V = 1 \quad |p| \text{ до } |p| + |dp|$$

$$(2J + 1)dZ = 3 \frac{4\pi |p|^2 d|p|}{(2\pi\hbar)^3} \quad (1) \quad 2J + 1 = 3$$

$$f = \frac{1}{\exp(E/kT) - 1} \quad (p, p + dp)$$

$$dE = E \cdot dN = E \cdot f(2J + 1)dZ \quad (2)$$

$$E = \int_0^{|p|_{\max}} \frac{E}{\exp(E/kT) - 1} 3 \cdot 4\pi \frac{|p|^2 d|p|}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3)$$

1 Теплоемкость кристаллических решеток

$$s = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{|p|}$$

$$E \approx \frac{3}{2\pi^2 \hbar^3 s^3} \int_0^{\infty} \frac{E}{\exp(E/kT) - 1} E^2 dE \quad (4)$$

$$x = E/kT$$

$$E = \frac{3k^4 T^4}{2\pi^2 \hbar^3 s^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (5)$$

$$E = \frac{\pi^2}{10} \frac{k^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \quad (6)$$

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{2}{5} \pi^2 \frac{k^4 T^3}{\hbar^3 s^3} \quad (7)$$

$$C = \frac{2}{15} \pi^2 \frac{k^2 T^3}{\hbar^3} \left(\frac{2}{s_{\perp}^3} + \frac{1}{s_{\parallel}^3} \right) \quad (8)$$

$$C \sim T^3 \quad C \sim T^2 \quad C \sim T$$

1 Теплоемкость кристаллических решеток

$$3N \quad E \rightarrow 3NkT, \quad c \rightarrow 3Nk \quad (9)$$

$$E = \frac{3}{2\pi^2 s^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \omega^2 d\omega \quad (10)$$

$$N_{\text{сост}} = \frac{3}{2\pi^2 s^3} \int_0^{\omega_{\max}} \omega^2 d\omega = \frac{\omega_{\max}^3}{2\pi^2 s^3} \quad (11) \quad N_{\text{сост}} = 3N$$

$$\omega_{\max} = s(6\pi^2 N)^{\frac{1}{3}} \quad (12)$$

$$E = \frac{9N}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \omega^2 d\omega \quad (13)$$

$$x = \hbar\omega/kT$$

1 Теплоемкость кристаллических решеток

$$E = 9N \frac{(kT)^4}{(\hbar\omega_{\max})^3} \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{\exp x - 1} \quad (14)$$

$$\hbar\omega_{\max} = k\theta_D \quad (15)$$

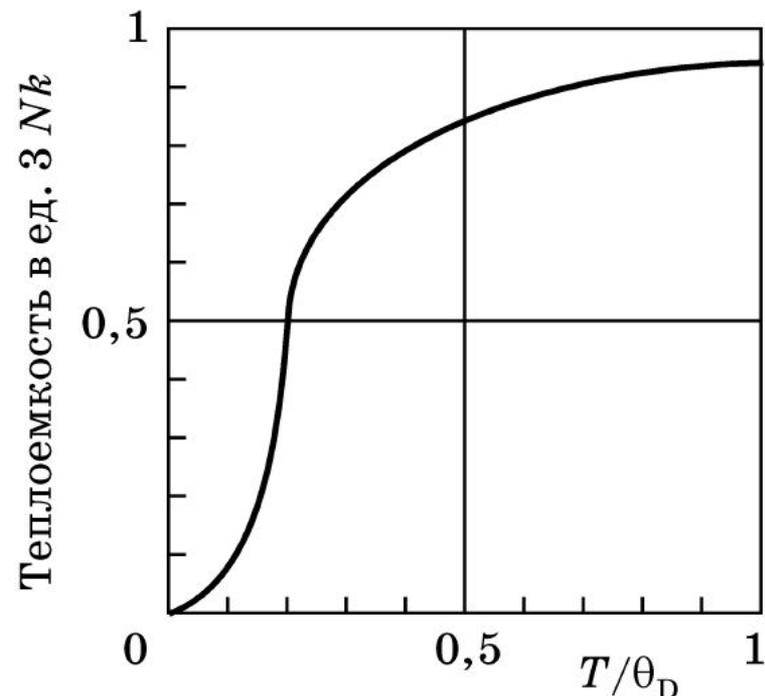
$$x_{\max} = \frac{\hbar\omega_{\max}}{kT} = \frac{\theta_D}{T}$$

$$E = 9N \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 kT \cdot f \left(\frac{T}{\theta_D} \right) \quad (16)$$

$$f \left(\frac{T}{\theta_D} \right) = \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{\exp x - 1} \quad (17)$$

$$\frac{T}{\theta_D} \gg 1 \quad \frac{T}{\theta_D} \approx 1$$

Зависимость теплоемкости кристалла от температуры по Дебаю



1 Теплоемкость кристаллических решеток

$$\int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{\exp x - 1} = \frac{\pi^4}{15} \quad E = \frac{3}{5} N \pi^4 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 kT \quad (18)$$

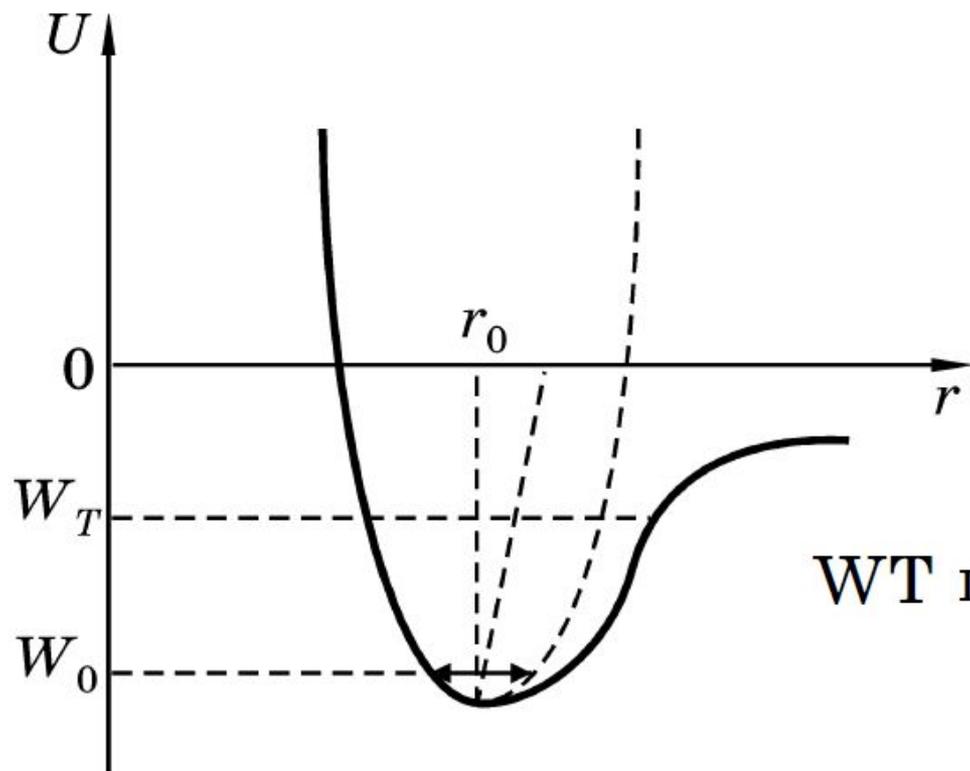
$$T \geq \theta_D$$

$$k_{\max} = \frac{\pi}{a}$$

$$\omega_{\max} \approx s |k_{\max}| = s \frac{\pi}{a} \approx s \pi N^{\frac{1}{3}} \quad (19)$$

2 Взаимодействие фононов и тепловое расширение

$$r = r_0 (x = r - r_0) \quad U(x) = \int_0^x \alpha z dz = \frac{\alpha x^2}{2} \quad (20)$$



W_T полная энергия осциллятора

Зависимость потенциальной энергии $U(r)$

2 Взаимодействие фононов и тепловое расширение

$$U(x) = \frac{1}{2} \alpha x^2 - \frac{1}{3} \beta x^3 \quad (21)$$

$$\begin{aligned} f(x) &= A \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) = A \exp\left[\frac{-\frac{1}{2} \alpha x^2 + \frac{1}{3} \beta x^3}{kT}\right] = \\ &= A \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\alpha x^2}{kT}\right) \left(1 + \frac{\beta x^3}{3kT}\right). \end{aligned} \quad (22)$$

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1 = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2kT}\right) \left(1 + \frac{\beta x^3}{3kT}\right) dx \quad (23)$$

$$A \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2kT}\right) dx = A \left(\frac{2\pi kT}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} = 1, \quad A = \left(\frac{\alpha}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (24)$$

2 Взаимодействие фононов и тепловое расширение

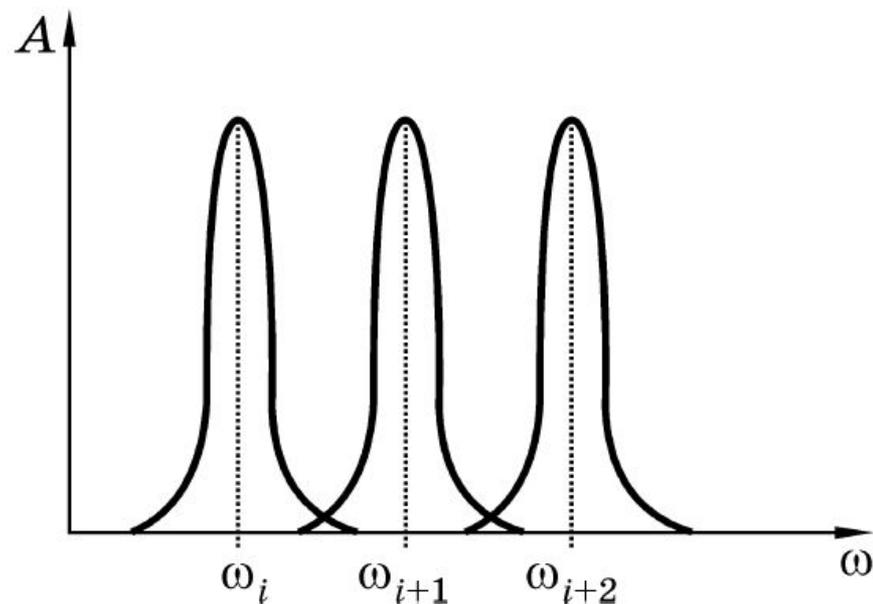
$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx = \left(\frac{\varepsilon}{2\pi kT} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon x^2}{2kT}\right) \left(x + \frac{\beta x^4}{3kT} \right) dx \quad (25)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{3}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{\frac{5}{2}}} \quad (26)$$

$$\bar{x} = \frac{\beta}{\varepsilon^2} kT \quad (27)$$

$$\alpha = \frac{1}{a} \frac{d\bar{x}}{dT} = \frac{\beta k}{a\varepsilon^2} \quad (28)$$

$$\mu_{\phi-\phi} \approx \pi\beta^2 n_{\phi}$$



Частотный спектр фононов

3. Теплопроводность изоляторов

$$\theta = \frac{1}{3}cs\lambda \quad (29)$$

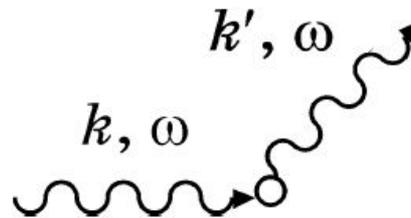
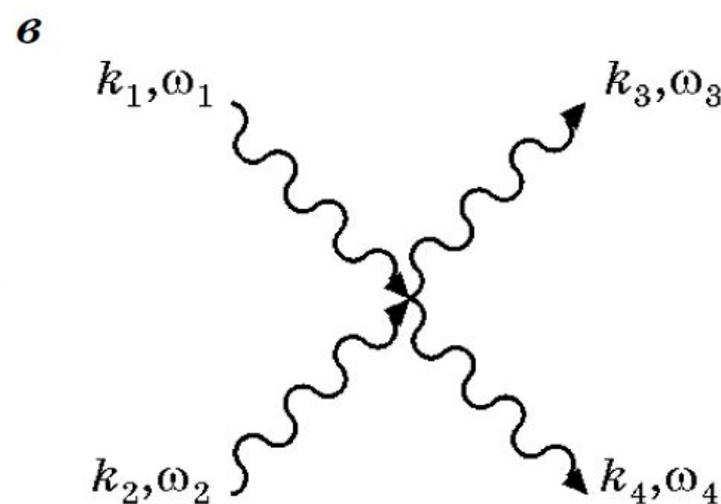
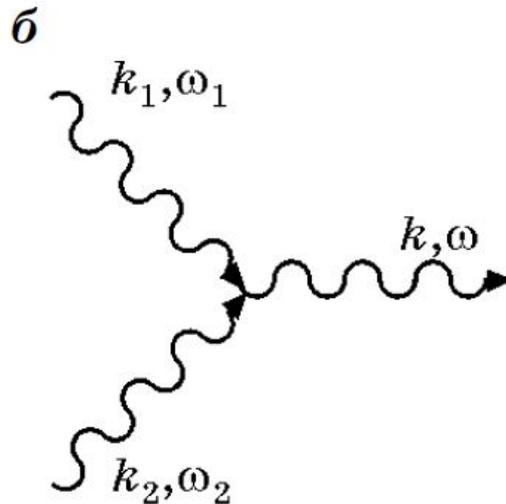
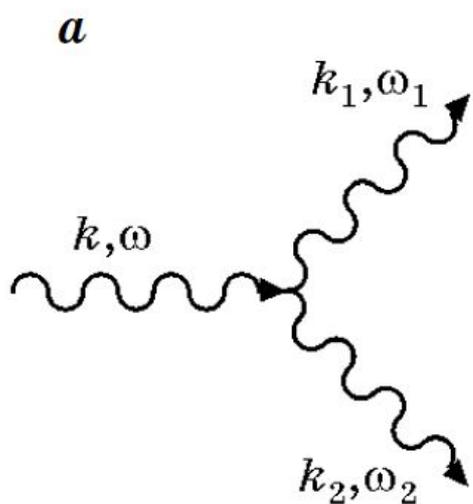


Схема рассеяния фононов на дефектах решетки



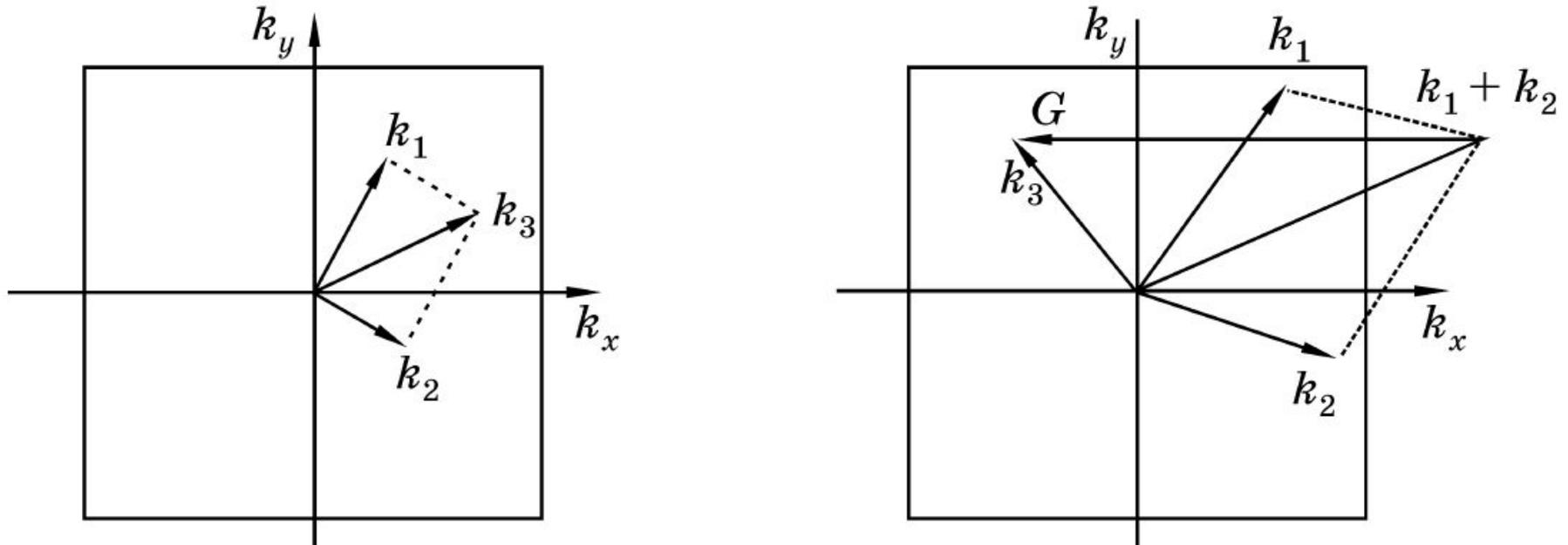
Ангармоничность колебаний при повышении температуры:

a — разделение одного фонона на два; *б* — слияние двух фононов; *в* — столкновение фононов.

$$\Delta p = 2\pi\hbar \frac{n}{a}$$

3. Теплопроводность изоляторов

$$\omega_1 + \omega_2 = \omega_3 \text{ и } k_1 + k_2 = k_3 + G$$



Процессы рассеяния фононов — нормальный (слева)
и с перебросом (справа)

нормальными или N -процессами

Umklapp-процесс

переброса Пайерлса

$$\left(k \geq \frac{G}{4} \right)$$

4. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности при высоких и низких температурах

$$k \geq \frac{G}{4}$$

$$T^3 \quad k \geq \frac{G}{4} \text{ очень мало}$$



Схематическая зависимость коэффициента теплопроводности от температуры