

Обратим внимание на то, что функция $\chi(\mathbf{k})$ входит в подынтегральные выражения в виде простых сумм ее значений для различных \mathbf{k} (подобно тому, как это было в классическом интеграле столкновений в газах (6,4—5)).

Уравнение (67,13) имеет очевидное решение

$$\chi = \text{const} \cdot \omega, \quad (67,18)$$

тождественно обращающее в нуль интеграл (67,17) в силу сохранения энергии при столкновениях. Как уже было объяснено в § 6, это «паразитное» решение отвечает просто изменению температуры на малую постоянную величину; оно исключается наложением дополнительного условия (67,14).

Другое же «паразитное» решение

$$\chi = k\delta V \quad (67,19)$$

(δV — константа), отвечающее малому изменению скорости движения фононного газа как целого (ср. (6,6)), исключается уже существованием процессов переброса, нарушающих сохранение суммарного квазимпульса фонона.

§ 68. Теплопроводность диэлектриков. Высокие температуры

Уравнение (67,13) позволяет сразу же определить температурную зависимость коэффициента теплопроводности диэлектрика при высоких температурах, больших по сравнению с дебаевской температурой $\Theta \sim u/d$ ($\hbar u/d$ в обычных единицах).

Максимальное значение энергии фононов во всех ветвях их спектра порядка величины Θ . Поэтому при $T \gg \Theta$ энергии всех вообще фононов $\omega \ll T$, причем для основной их массы $\omega \sim \Theta$. При этом равновесная функция распределения (67,9) сводится к

$$N_0 \approx T/\omega \gg 1. \quad (68,1)$$

В интеграле столкновений (67,17) температура выносится в виде множителя T^2 ; функция ω , взятая для частот $\omega \sim \Theta$, не влияет на температурную зависимость интеграла. В левой же стороне уравнения (67,13) производная $\partial N_0/\partial T \approx 1/\omega$ не содержит температуры. Отсюда заключаем, что

$$\chi \sim \frac{\nabla T}{T^2}, \quad \delta N = -\frac{\partial N_0}{\partial \omega} \chi \sim \frac{\nabla T}{T},$$

а потому и тепловой поток ¹⁾)

$$\mathbf{q} = \sum_g \int \omega \mathbf{u} \delta N \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \approx \nabla T.$$

Таким образом, коэффициент теплопроводности обратно пропорционален температуре:

$$\kappa \approx 1/T, \quad T \ll \Theta \quad (68,2)$$

(в классической теории этот результат был получен Дебаем (*P. Debye*)). В анизотропном кристалле направления \mathbf{q} и ∇T , вообще говоря, не совпадают, так что коэффициент теплопроводности не скаляр, а тензор второго ранга; говоря о его температурной зависимости, мы отвлекаемся от этого обстоятельства.

Оценим длину свободного пробега фононов в рассматриваемой области температур. Согласно элементарному газокинетическому соотношению (7,10), $\kappa \sim C \bar{v} l$, где C — теплоемкость (отнесенная к единице объема), \bar{v} — средняя скорость носителей энергии, l — длина их пробега. Теплоемкость кристалла при высоких температурах постоянна; постоянна и скорость фононов, которую можно оценить как скорость звука u . Тогда мы видим, что длина пробега $l \approx 1/T$. Длина l должна была бы стать порядка постоянной решетки d при температурах настолько высоких, что амплитуда колебаний атомов тоже стала бы $\sim d$. Согласно оценке (67,5), такая температура $\sim Mu^2$, и для длины пробега и эффективной частоты столкновений $\nu \sim u/l$ находим оценки

$$l \sim Mu^2 d/T, \quad \nu \sim T/Mud. \quad (68,3)$$

Отсюда видно, что $l \gg d$ фактически при всех температурах ниже точки плавления.

В изложенных рассуждениях по существу подразумевалось, что рассмотренный трехфононный механизм теплового сопротивления кристаллической решетки эффективен для всех фононов. Потоки энергии, переносимой различными группами фононов, аддитивны, так что аддитивны и их вклады в коэффициент теплопроводности. Если данный механизм был бы недостаточен хотя бы для какой-нибудь группы фононов, то тем самым он был бы вообще недостаточен для обеспечения конечной теплопроводности. В этом отношении требуют особого рассмотрения длинноволновые акустические фононы.

¹⁾ Заранее очевидное обращение \mathbf{q} в нуль в равновесии формально следует из обращения в нуль интеграла по $d^3 k$ ввиду нечетности подынтегрального выражения как функции \mathbf{k} : частота $\omega(\mathbf{k})$, а с нею и $N_{\mathbf{k}}(\omega)$ — четные функции \mathbf{k} , а скорость $\mathbf{u} = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$ — нечетная функция. Напомним (см. V, § 69), что четность функции $\omega(\mathbf{k})$ связана с симметрией по отношению к обращению времени и имеет место при любой симметрии кристаллической решетки.

Рассмотрим прежде всего процессы, в которых участвуют только длинноволновые акустические фононы с малыми квазиимпульсами сравнимой величины (будем обозначать эти квазиимпульсы буквами f с соответствующими индексами). Оценим для таких процессов интеграл столкновений (67,17) в смысле его зависимости от f . Согласно (66,14), в этом случае функция $\omega \sim ff_1 f_2 \sim f^3$. Множители $N_0 \sim T/\omega \sim 1/f$. Интегрирование производится в k -пространстве по объему $\sim f^3$, но δ -функция выделяет внутри этого объема лишь поверхность с площадью $\sim f^2$. Таким образом, найдем, что интеграл столкновений

$$I(\chi) \sim f^2 \chi \sim f^4 \delta N$$

(в последнем выражении учтено, что согласно определению (67,15) $\delta N \sim \chi/f^2$); этот результат можно сформулировать в терминах эффективной частоты столкновений:

$$v(f) \sim f^4. \quad (68,4)$$

В левой же стороне кинетического уравнения (67,13) множитель u не зависит (для акустических фононов) от f , а $\partial N_0/\partial T \sim 1/f$. Поэтому

$$\delta N \sim 1/fv.$$

Вклад длинноволновых фононов в поток энергии q дается интегралом (67,4), взятым по объему $\sim f^3$. Но этот интеграл

$$\int \omega u \delta N \frac{d^3 f}{(2\pi)^3} \sim \int \frac{d^3 f}{v(f)} \quad (68,5)$$

расходится при малых f как $1/f$. Таким образом, трехфононные процессы между одними только длинноволновыми акустическими фононами привели бы к бесконечной теплопроводности; для обеспечения конечного теплового сопротивления необходимы столкновения этих фононов с коротковолновыми (И. Я. Померанчук, 1941).

Пусть коротковолновый фонон с квазиимпульсом k распадается на длинноволновый акустический фонон f и коротковолновый фонон $k-f-b$, относящийся к той же ветви спектра $\omega(k)$, что и фонон k (для дальнейших рассуждений существенна не столько абсолютная величина k , сколько тот факт, что $k \gg f$). Поскольку функция $\omega(k)$ периодична в обратной решетке, то $\omega(k-f-b) = \omega(k-f)$ и закон сохранения энергии дает

$$\omega(k) = \omega(k-f) + u(n)f. \quad (68,6)$$

Второй член справа — частота акустического фонона — линейная функция f ($u(n) = \omega(f)/f$) — фазовая скорость звука, зависящая от направления $n = f/f$. Разложив $\omega(k-f)$ по степеням

малого f , переписываем это равенство в виде

$$f \frac{\partial \omega}{\partial k} = fu(n). \quad (68,7)$$

Оно может быть выполнено, лишь если скорость коротковолнового фонона превышает скорость звука:

$$\left| \frac{\partial \omega}{\partial k} \right| > u(n). \quad (68,8)$$

В этом смысле наиболее «опасна» акустическая ветвь с наибольшей скоростью звука; эту ветвь мы и будем иметь в виду, говоря об акустических фононах¹⁾.

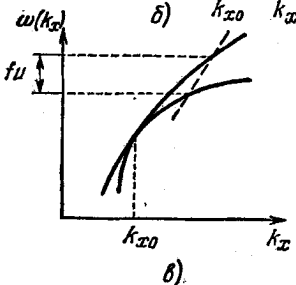
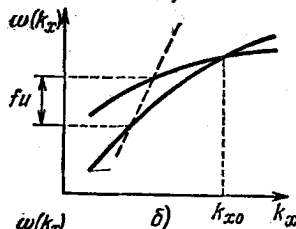
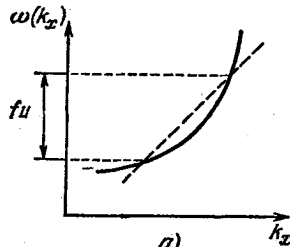


Рис. 27.

Другие возможности для трехфононных процессов появляются при наличии точек вырождения в k -пространстве, в которых энергии двух или более ветвей фононного спектра совпадают (С. Herring, 1954); наличие таких точек (изолированных или заполняющих линию или плоскость) во многих случаях является обязательным следствием симметрии кристаллической решетки. Возникающие в результате возможности иллюстрируются графическим построением, которое мы сначала проведем для уже рассмотренного случая испускания «сверхзвуковым» коротковолновым фононом.

При заданном направлении f выберем это направление в качестве оси x ; на рис. 27, *a* сплошная кривая изображает зависимость $\omega(k_x)$ (при заданных k_y, k_z) для коротковолновых фононов. Написав условие (68,7) в виде

$$v_x \equiv \frac{\partial \omega}{\partial k_x} = u(n_x),$$

мы видим, что испускание акустического фонона возможно, если в некоторой точке кривой ее наклон совпадает со скоростью

звукa. Тогда вблизи этой точки частоты $\omega(k)$ и $\omega(k-f)$ коротковолновых фононов даются точками пересечения кривой с пунк-

¹⁾ В изотропном твердом теле одна ветвь акустического спектра отвечает продольным, а две другие — поперечным колебаниям; скорость продольных звуковых волн больше скорости поперечных волн. В анизотропном кристалле разделение волн на продольные и поперечные теряет, вообще говоря, смысл. Но в литературе часто называют условно «продольной» ветвь с наибольшей скоростью звука.

тирной прямой, проведенной с наклоном $u(n_x)$; разность ординат этих точек дает частоту uf .

Если же в некоторой точке $k_x = k_{x_0}$ кривые двух ветвей $\omega(k_x)$ пересекаются, то вблизи такой точки трехфононный процесс возможен всегда, при любых наклонах кривых $\omega(k_x)$, независимо от того, имеет ли место в точке k_{x_0} простое пересечение (рис. 27, б) или касание (рис. 27, в). При этом оба коротковолновых фонона относятся к различным ветвям спектра.

Оценим эффективное число столкновений длинноволнового акустического фонона при наличии точек вырождения. Речь при этом должна идти о процессах поглощения и испускания этого фонона — процессы (67,8) (при распаде такого фонона — процессы (67,7) — два образующихся фонона будут также длинноволновыми и мы возвратились бы к прежней ситуации). Поэтому мы должны оценить второй член в (67,17), считая, что

$$\omega_1, \omega_2 \gg \omega \sim f \rightarrow 0.$$

При этом учтем, что $\omega \sim f$, $N_0 \sim 1/f$, а остальные множители под интегралом можно заменить на независимые от f средние значения, поскольку интегрирование производится лишь в окрестности точек вырождения. Снова введя $\delta N \sim \chi/f^2$, получим оценку зависимости интеграла столкновений от f в виде $I(\chi) \sim \sim v(f) \delta N$, где

$$v(f) \sim f^2 \int \delta[\omega_1(\mathbf{k}-\mathbf{f}) + u(n)f - \omega_3(\mathbf{k})] d^3k. \quad (68,9)$$

Этот интеграл можно преобразовать в интеграл по поверхности в \mathbf{k} -пространстве, определяемой уравнением

$$\omega_1(\mathbf{k}-\mathbf{f}) + u(n)f - \omega_3(\mathbf{k}) = 0 \quad (68,10)$$

согласно формуле¹⁾

$$\int \delta(F) d^3k = \oint \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} F|}, \quad (68,11)$$

где интеграл берется по поверхности $F(\mathbf{k}) = 0$. Тогда получим

$$v(f) \sim f^2 \Delta S(f) \left\langle \left| \frac{\partial \omega_3(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial \omega_1(\mathbf{k}-\mathbf{f})}{\partial \mathbf{k}} \right|^{-1} \right\rangle, \quad (68,12)$$

где $\Delta S(f)$ — площадь поверхности (68,10), а угловые скобки означают усреднение по поверхности.

¹⁾ Эту формулу можно сразу получить, если учесть, что

$$d^3k = dS dl = dS dF / |\nabla_{\mathbf{k}} F|,$$

где l — расстояние по нормали к поверхности.

Рассмотрим типичный случай, когда точки вырождения образуют линию в k -пространстве. Тогда при $f \rightarrow 0$ поверхность (68,10) стягивается в линию, на которой лежат точки вырождения, а при малых f она представляет собой тонкую трубку, охватывающую эту линию; зависимость площади ΔS от f совпадает поэтому с зависимостью от f диаметра трубки.

Если изоэнергетические поверхности пересекаются на линии вырождения без касания (см. рис. 27, б), то расстояние точки k от точки вырождения зависит от f линейно, так что и $\Delta S \propto f$. Поскольку разность производных в этом случае конечна в точке пересечения, то

$$v(f) \propto f^3. \quad (68,13)$$

Интеграл (68,5) расходится теперь уже лишь логарифмическим образом. Эта расходимость должна устраняться так же, как и в отсутствие вырождения (см. ниже). Ввиду слабости расходимости она обычно не приводит к существенному изменению закона (68,2).

Пусть теперь изоэнергетические поверхности имеют в точке вырождения квадратичное касание. Тогда, как ясно из рис. 27, в, f пропорционально квадрату расстояния до точки касания. Площадь же ΔS , будучи пропорциональной этому расстоянию, оказывается $\propto f^{1/2}$. Но такова же в этом случае зависимость от f и разности производных в (68,12), поскольку кривые производных пересекаются уже без касания. Поэтому в этом случае

$$v(f) \propto f^2 \quad (68,14)$$

и расходимость в теплопроводности не возникает.

Аналогичным образом можно рассмотреть и другие типы вырождения¹⁾.

Если точки вырождения в фоновом спектре отсутствуют, то для обеспечения конечной теплопроводности за счет трехфоновых процессов условие (68,6) должно выполняться (хотя бы для одной ветви спектра $\omega(k)$) при всех направлениях n . В противном случае конечная теплопроводность устанавливается лишь за счет процессов более высокого порядка (четырефоновых) и закон (68,2) не имеет места. Заметим, что при низких температурах, когда длина пробега настолько возрастает, что может сравниться с размерами образца L , расходимость интеграла (68,5) может обрезаться на $f \sim 1/L$, что привело бы к зависимости коэффициента теплопроводности от размеров L .

¹⁾ Их исследование — см. оригинальную статью: *Herring C.* — *Phys. Rev.*, 1954, v. 95, p. 954.