§ 69. Теплопроводность диэлектриков. Низкие температуры

При низких температурах ($T \ll \Theta$) характер переноса тепла в диэлектриках радикально меняется. Дело в том, что в таких условиях число процессов переброса становится экспоненциально малым, как это ясно из следующих рассуждений.

Сохранение квазиимпульса в трехфононном процессе с перебросом, выражаемое равенством $\mathbf{k}=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{b}$, требует, чтобы по крайней мере один из трех квазиимпульсов был велик; пусть это будет $k_1 \sim b$. Тогда и энергия $\omega_1 \sim \Theta$, а вследствие этого сохранение энергии ($\omega=\omega_1+\omega_2$) требует, чтобы была велика и энергия $\omega \sim \Theta$. Но при $T \ll \Theta$ большинство фононов имеет энергию $\sim T$, а число фононов с энергиями $\sim \Theta$ экспоненциально мало. Таким образом, как для процесса распада фонона, так и для обратного процесса слияния двух фононов числа начальных фононов, а с ними и числа процессов, экспоненциально малы. Легко заметить, что в этих рассуждениях несущественна трехфононность процесса. То же самое относится и к процессам с участием большего числа фононов.

В этой ситуации физическая картина теплопередачи выглядит следующим образом. Многочисленные нормальные столкновения фононов, сохраняющие суммарный квазиимпульс, приводят к установлению лишь «внутреннего» равновесия в фононном газе, который может при этом двигаться относительно решетки с произвольной скоростью $\mathbf{V}$. Малочисленные же столкновения с перебросом лишь слабо меняют функцию распределения, но ими устанавливается определенное (пропорциональное градиенту температуры) значение $\mathbf{V}$; этим значением в свою очередь определяется тепловой поток. Покажем теперь, каким образом эта картина выражается в математическом решении задачи[1]).

Запишем кинетическое уравнение в виде

$$\frac{\partial N_0}{\partial T}\mathbf{u}\,\nabla T = I_N(\chi)+I_U(\chi), \tag{69,1}$$

разделив в интеграле столкновений части, связанные с нормальными (индекс N) и перебросными (индекс U) столкновениями. Равновесная функция распределения, отвечающая движению газа как целого со скоростью $\mathbf{V}$, получается из функции $N_0(\omega)$ заменой ее аргумента ω на $\omega-\mathbf{kV}$; при малом $\mathbf{V}$ имеем

$$N_0(\omega-\mathbf{kV}) \approx N_0(\omega)-\mathbf{kV}\frac{\partial N_0}{\partial \omega}. \tag{69,2}$$

[1]) Обратим внимание на то, что однозначное выделение процессов переброса как малого эффекта достигается именно при обусловленном в § 66 выборе основной ячейки в обратной решетке, в результате которого все столкновения между одними лишь длинноволновыми фононами малых энергий являются нормальными.

В соответствии с описанной выше картиной ищем решение уравнения (69,1) в виде

$$\chi = \chi_N + \chi_U, \qquad \chi_N = \mathbf{kV}; \tag{69,3}$$

χ_U—часть изменения функции распределения, связанная с процессами переброса. Эта последняя часть мала по сравнению с χ_N. Если обозначить как ν_U и ν_N порядки величины эффективных частот столкновений с перебросами и без них ($\nu_U \ll \nu_N$), то

$$\chi_U/\chi_N \sim \nu_U/\nu_N. \tag{69,4}$$

Подстановка в (69,1) приводит к уравнению

$$\frac{\partial N_0}{\partial T}\mathbf{u}\,\nabla T = I_N(\chi_U) + I_U(\chi_N), \tag{69,5}$$

где действующие на функции χ линейные операторы определяются выражением (67,17). В (69,5) учтено, что $I_N(\chi_N) = 0$, а член $I_U(\chi_U)$ опущен как малый; оба же оставленных в правой стороне члена одинакового порядка величины при соотношении (69,4).

Подчеркнем прежде всего, что в пренебрежении процессами переброса, при отличном от нуля градиенте температуры, кинетическое уравнение вообще не имело бы решения. Действительно, умножим уравнение (69,5) на $\mathbf{k}$, проинтегрируем по $d^3k/(2\pi)^3$ и просуммируем по всем ветвям спектра фононов. Поскольку нормальные столкновения сохраняют полный квазиимпульс, то член $I_N(\chi_U)$ обратится в результате в нуль, так что остается

$$\sum_g \int \mathbf{k}(\mathbf{u}\,\nabla T)\frac{\partial N_0}{\partial T}\frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \sum_g \int \mathbf{k} I_U(\chi_N)\frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \tag{69,6}$$

В пренебрежении процессами переброса, в правой стороне этого уравнения стоял бы нуль, между тем как левая сторона заведомо отлична от нуля (подынтегральная функция—четная функция $\mathbf{k}$, поскольку $\omega(\mathbf{k})$—четная, а $\mathbf{u} = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$—нечетная функции); это противоречие и означает отсутствие решения у кинетического уравнения.

С учетом же процессов переброса равенство (69,6) определяет неизвестную величину $\mathbf{V}$, входящую в решение (69,3). Для упрощения записи формул будем считать, что кристалл имеет кубическую симметрию; тогда в интегралах в (69,6) анизотропия кристалла не проявляется[1]) и равенство (69,6) после подстановки χ_N из (69,3) принимает вид

$$\beta_1 \nabla T = -\nu_U \beta_2 T\mathbf{V}, \tag{69,7}$$

[1]) При кубической симметрии всякий тензор второго ранга сводится к скаляру: $a_{\alpha\beta} = {}^1/_3 a\delta_{\alpha\beta}$, $a \equiv a_{\alpha\alpha}$.

где введены обозначения

$$\beta_1=\frac{1}{3}\frac{\partial}{\partial T}\sum_g\int \mathbf{k}\mathbf{u}N_0\frac{d^3k}{(2\pi)^3},\quad \beta_2=\frac{1}{3}\frac{\partial}{\partial T}\sum_g\int\frac{k^2}{\omega}N_0\frac{d^3k}{(2\pi)^3},\tag{69,8}$$

$$T\nu_U\beta_2=-\frac{1}{3}\sum_g\int \mathbf{k}I_U(\mathbf{k})\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

(множитель β_2 выделен для упрощения записи формул ниже).

Равенство (69,7) определяет $\mathbf{V}$, после чего поток энергии вычисляется как интеграл (67,4), в котором в качестве N надо подставить функцию

$$\delta N_N=-\mathbf{k}\mathbf{V}\frac{\partial N_0}{\partial\omega}=\mathbf{k}\mathbf{V}\frac{T}{\omega}\frac{\partial N_0}{\partial T}.$$

Тогда получим $\mathbf{q}=T\beta_1\mathbf{V}$; вместе с (69,7) это дает $\mathbf{q}=-\varkappa\nabla T$ с коэффициентом теплопроводности

$$\varkappa=\beta_1^2/\nu_U\beta_2.\tag{69,9}$$

Интересно, что в рассматриваемом случае вычисление $\varkappa$ не требует решения кинетического уравнения (69,5), а сводится к вычислению интегралов (69,8).

Интегралы β_1 и β_2 определяются областью частот $\omega\sim T$, в которой находится большинство фононов. Эти интегралы зависят от T лишь степенным образом. Поскольку малой энергией могут обладать лишь акустические фононы, то в β_1 и β_2 фактически достаточно суммировать лишь по трем акустическим ветвям спектра. Легко видеть, что при этом

$$\beta_1,\ \beta_2\propto T^3.\tag{69,10}$$

Экспоненциальная же зависимость заключена в интеграле ν_U. Его конкретное выражение можно получить с помощью (67,17). Для процессов переброса имеем

$$\chi_{N1}+\chi_{N2}-\chi_N=\mathbf{V}(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k})=\mathbf{V}\mathbf{b}.$$

Для большинства фононов $\omega\sim T$ и функция распределения $N_0\sim 1$; для фононов же с $\omega\gg T$ функция $N_0\ll 1$. Поэтому множители $N_0+1\sim 1$ и при оценке интеграла могут не учитываться. Функции же

$$N_0=e^{-\omega/T}(N_0+1)$$

содержат множители $\exp(-\omega/T)$, которые могут быть экспоненциально малыми; эти множители и играют определяющую роль при оценке интеграла.

Таким образом, если интересоваться лишь экспоненциальной зависимостью ν_U от температуры, имеем

$$\nu_U\propto\sum_{(g\mathbf{b})}\int e^{-\omega/T}\delta(\omega-\omega_1-\omega_2)\,d^3k\,d^3k_1;\tag{69,11}$$

суммирование производится по всем ветвям спектра g, g_1, g_2 и по всем возникающим в процессах переброса отличным от нуля значениям $\mathbf{b}$. Уравнение

$$\omega_g(\mathbf{k}) = \omega_{g_1}(\mathbf{k}_1) + \omega_{g_2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \tag{69,12}$$

определяет пятимерную поверхность в шестимерном $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}_1$-пространстве. Пусть $\Delta(g, g_1, g_2)$ — минимальное значение $\omega_g(\mathbf{k})$ на этой гиперповерхности; поскольку энергии фононов, участвующих в процессах переброса, велики, то и эти значения $\sim\Theta$. Каждый из интегралов под знаком суммы по (g) в (69,11) пропорционален $\exp[-\Delta(g, g_1, g_2)/T]$. Сохранив лишь наибольший из них, имеем

$$\nu_U \propto \exp(-\Delta_{\min}/T), \tag{69,13}$$

где $\Delta_{\min}$ — наименьшее из $\Delta(g, g_1, g_2)$.

Таким образом, мы приходим к результату, что коэффициент теплопроводности зависит от температуры в основном по экспоненциальному закону

$$\varkappa \propto \exp(\Delta_{\min}/T), \tag{69,14}$$

причем $\Delta_{\min} \sim \Theta$ (*R. Peierls*, 1929).

Процессы более высокого порядка, с участием большего числа фононов, приводят к температурной зависимости такого же характера, причем Δ — наименьшее возможное значение энергии начальных фононов в каждом процессе (или, что то же, половина наименьшего значения суммарной энергии всех — начальных и конечных — фононов, участвующих в процессе). В принципе может оказаться, что это значение меньше, чем для трехфононных процессов, и тогда вклад процессов высшего порядка в теплопроводность может стать преобладающим, несмотря на то, что предэкспоненциальный множитель, разумеется, уменьшается с возрастанием порядка процесса.

В отличие от частоты ν_U процессов переброса, эффективная частота ν_N нормальных столкновений уменьшается с температурой по степенному закону; имея в виду применение в § 71, определим закон этого убывания.

Нормальные столкновения происходят между акустическими фононами с $\omega \sim T$, составляющими большинство. Их квазиимпульсы $k \sim \omega/u \sim T/u$. В интеграле столкновений (67,17) интегрирование производится по поверхности с площадью $\sim k^2$, выделяемой δ-функцией в объеме $\sim k^3$. В этой области функции $N_0 \sim 1$, а функция $w \propto k^3$ (согласно (66,14)). Поэтому $\nu_N \propto T^5$. Коэффициент пропорциональности проще всего определить из условия, что при $T \sim \Theta$ это выражение и оценка (68,3) должны приводить к одинаковому результату; отсюда

$$\nu_N \sim T^5/\Theta^4 M u d. \tag{69,15}$$