

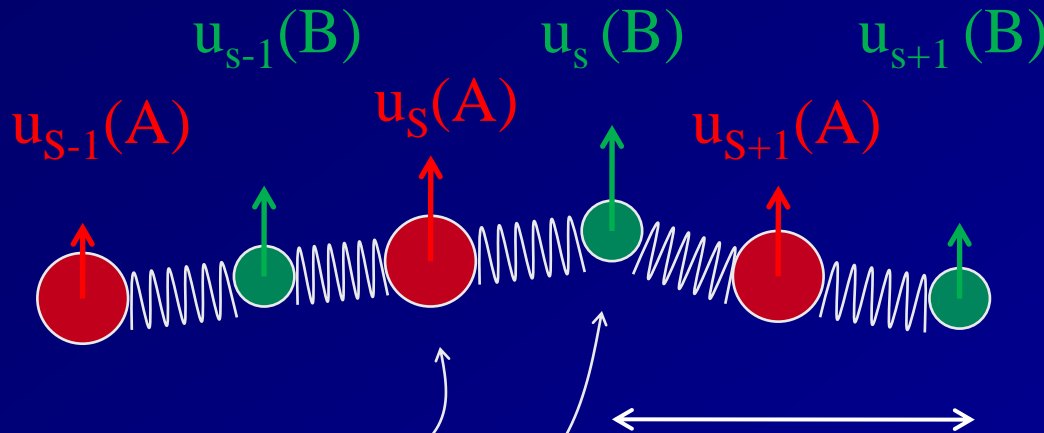
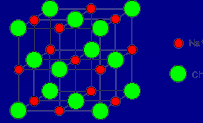
# Tepelná vodivost pevných látek

# Přenos tepla – vedení

## mřížková část tepelné vodivosti

Dvouatomový lineární řetězec

přiblížení např. NaCl (100)



Např.

= příčné výchylky

$\mathbf{k}$



$a$  – mřížková konstanta krystalu ve směru šíření vlny

$$M_A \frac{d^2 u_s}{dt^2} = -C(u_{s-1}(B) + u_s(B) - 2u_s(A))$$

$$M_B \frac{d^2 u_s}{dt^2} = -C(u_s(A) + u_{s+1}(A) - 2u_s(B))$$

Hookův zákon  $F = -Cu$   
vede na harmonické kmity

$$M_A \frac{d^2 u_S}{dt^2} = -C(u_{S-1}(B) + u_S(B) - 2u_S(A))$$

$$M_B \frac{d^2 u_S}{dt^2} = -C(u_S(A) + u_{S+1}(A) - 2u_S(B))$$

$$u_S(A) = u(A)e^{i(qa - \omega t)}$$

$$u_S(B) = u(B)e^{i(qa - \omega t)}$$

DET=0

$$\omega^4 - 2C \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} \omega^2 + \frac{4C^2}{M_A M_B} \sin^2 \left( \frac{qa}{2} \right) = 0$$

$$\omega^2(q) = \frac{C}{M} \left( 1 \pm \left( 1 - \frac{4M^2}{M_A M_B} \sin^2 \left( \frac{qa}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \right)$$

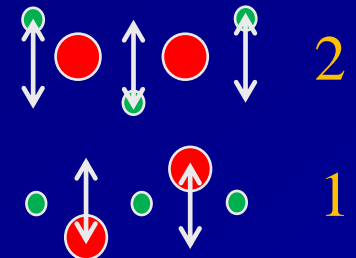
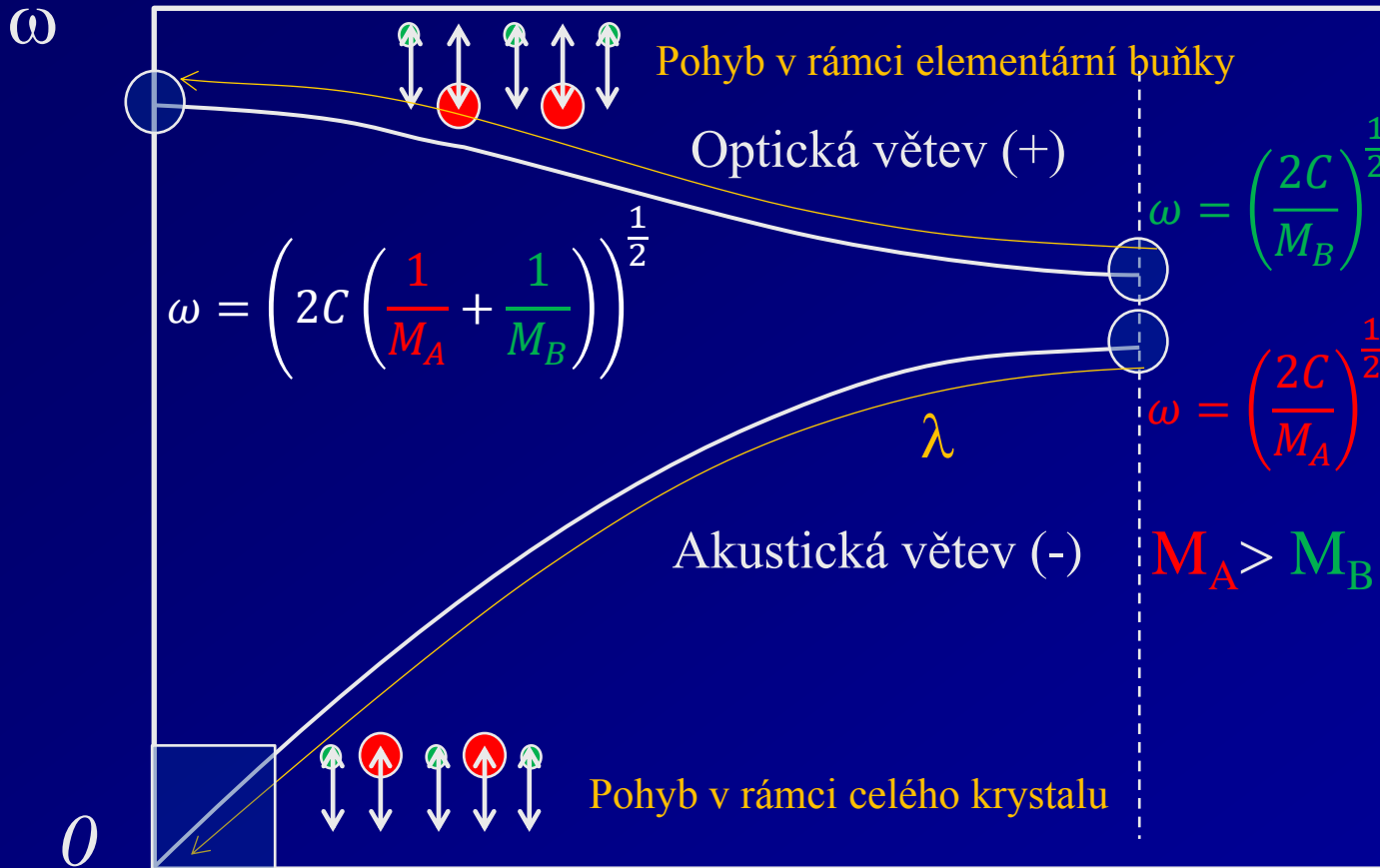
$$M = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B}$$

Disperzní vztah

# Dvouatomový lineární řetězec - disperze

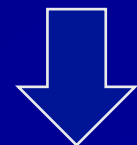
přiblížení např. NaCl (111)

přiblížení

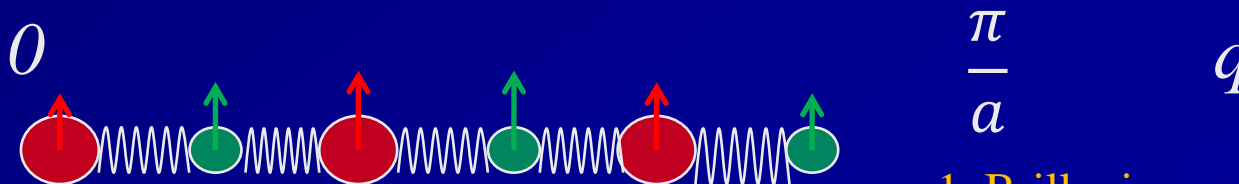


$$\omega_2 \neq \omega_1$$

$$\lambda_2 = \lambda_1$$



GAP



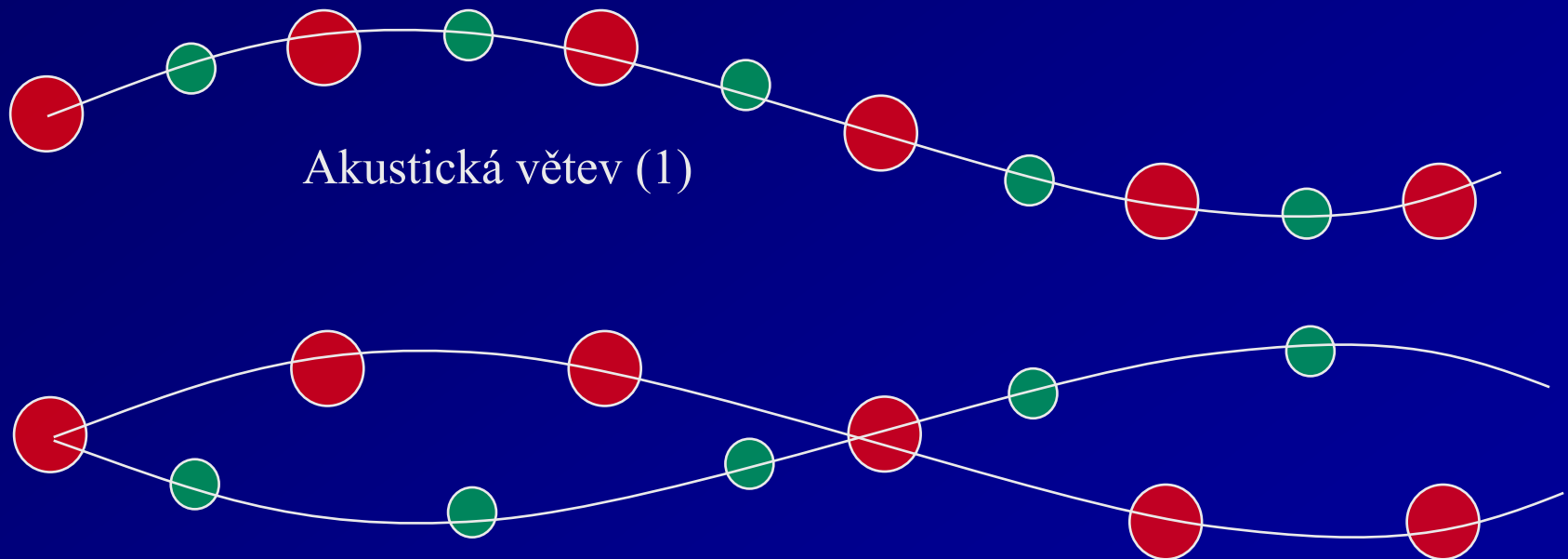
1. Brillouinova zóna

Srovnej s vlastní  
frekvencí oscilátoru  
(Fyzika 1)

$$\omega = \left( \frac{k}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Zde jich máme N !

## Dvouatomový lineární řetězec - disperze

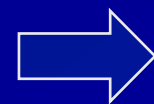


Optická větev (2)



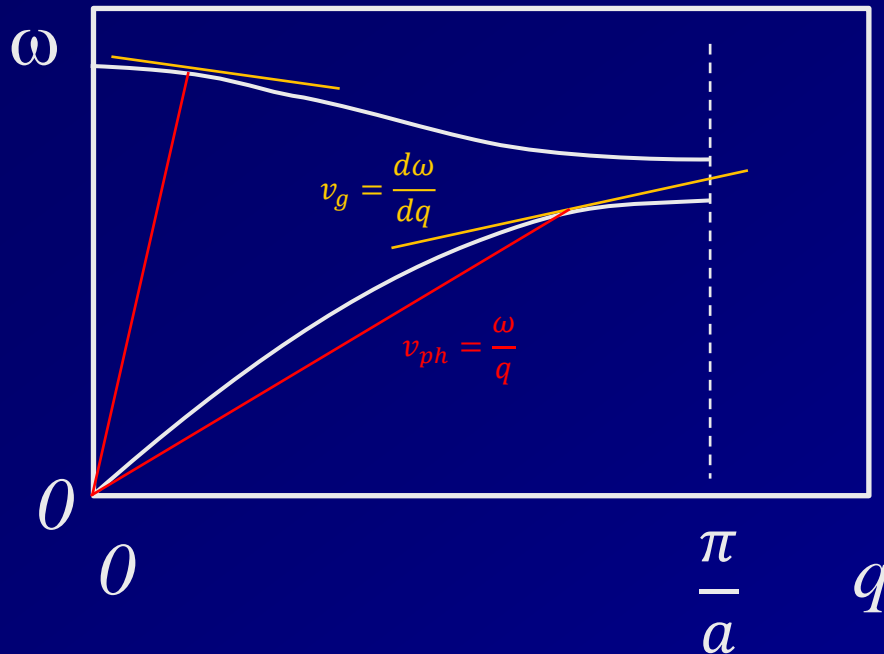
Může vést k polarizaci = optická

$$\lambda_2 = \lambda_1$$
$$\omega_2 \neq \omega_1$$



GAP

# Vliv struktury na fononové spektrum a tepelnou vodivost



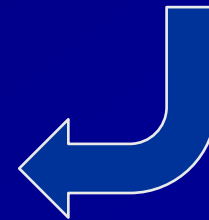
Vysvětlit rozdíl mezi grupovou a fázovou rychlostí (Lewin, L12)

$$v_g = \frac{d\omega}{dq} \neq \frac{\omega}{q} \quad !$$

Máme-li  $N$  atomů v elementární buňce 3D mřížky, pak

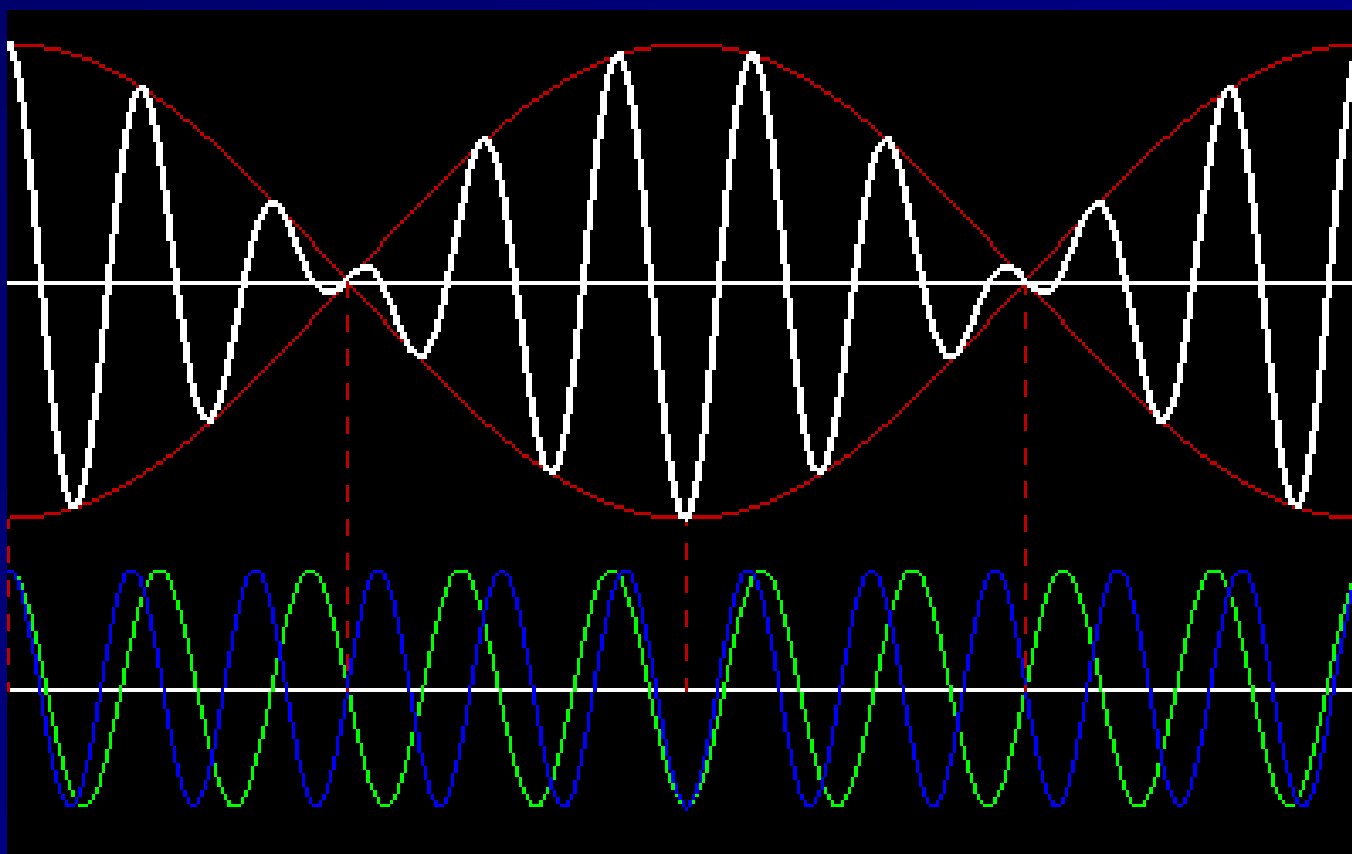
máme také  $3N$  větví vlastních frekvencí  $\omega$ , 3 akustické a  $3N-3$  optické. (vždy dvě transverzální a 1 longitudinální)

Více atomů v elementární buňce =  
= větší/menší tepelná vodivost ?



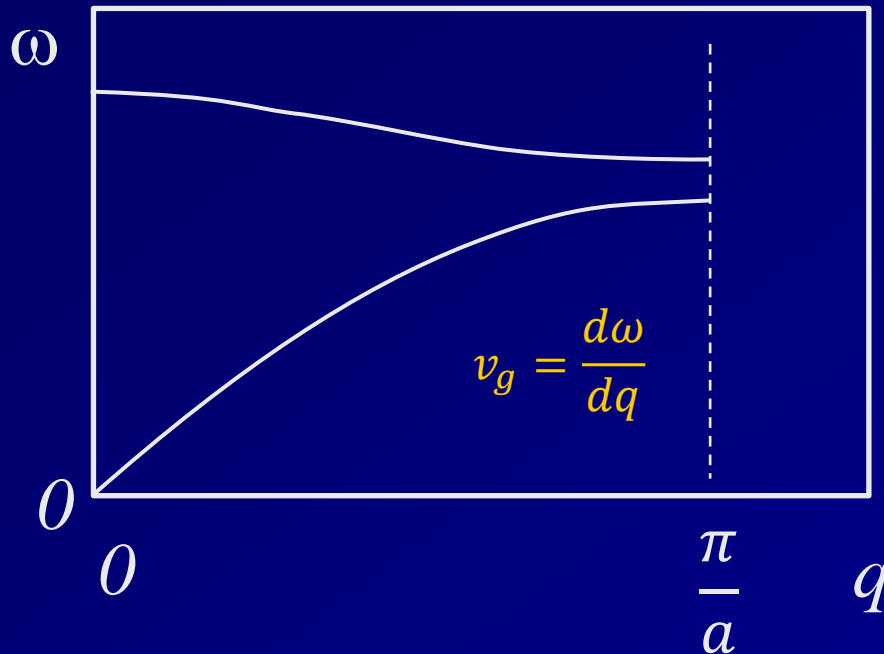
Kinetická teorie

# Fázová vs. grupová rychlost



Lze dokumentovat i na zvuku: [Schwebungen.exe](#)

# Vliv struktury na tepelnou vodivost – kinetická teorie



Tok částic v  
1. směru x:

Změna teploty  
podél její  
dráhy  $l/x$ :

Tok energie  
tam + zpět:


$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_x = \frac{1}{2} n \overline{v_{gx}}$$

$$\Delta T = x \frac{dT}{dx} = l \frac{dT}{dx}$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{dN}{dt} \Delta T c_{\text{částice}}$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{1}{3} c_v l v_g \frac{dT}{dx}$$

Velký počet fononů = “velká“ tepelná vodivost, ale hlavně také velká pravděpodobnost U- procesu nad  $T_{\text{Debye}}$ . Optické fonony mají malé  $v_g$  a tedy málo přispívají k tepelné vodivosti.

*Kittel/155*  
 $l = v_g \tau$   Fourierův zákon:

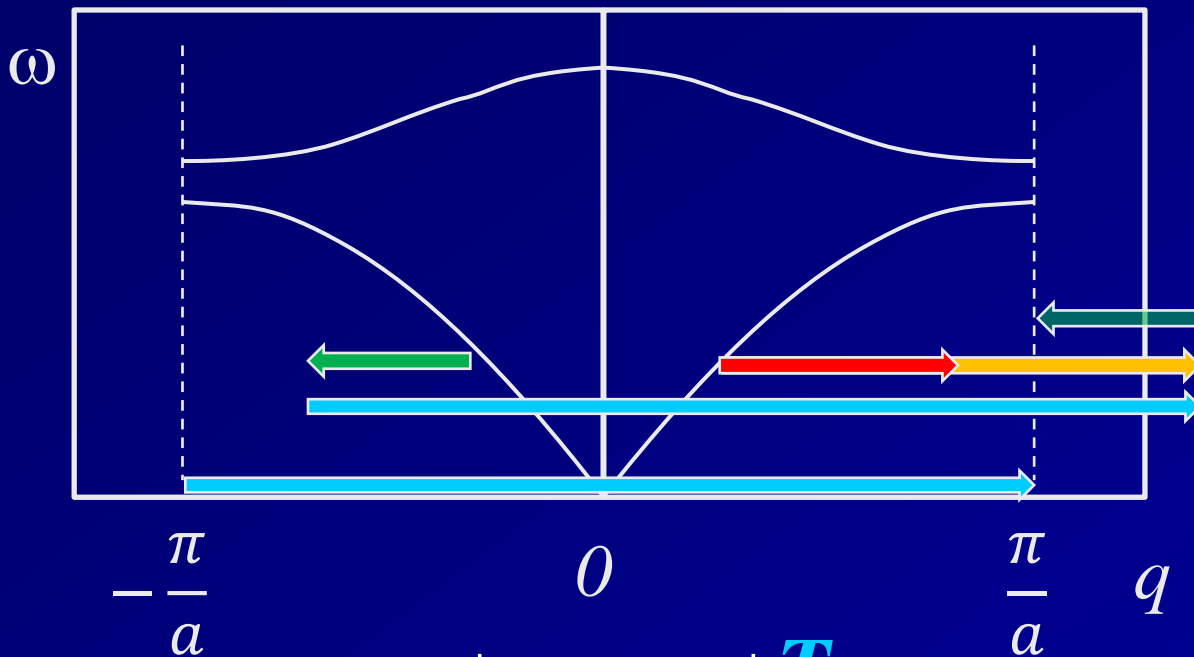
$$\kappa_L = \frac{1}{3} c_v v_g l$$

$$q_1 + q_2 = q_3 \quad \leftarrow T < T_D < T \quad \Rightarrow q_1 + q_2 = q_3 + T$$

Debye:  $v_g = v_{\text{zvuku}}$



# tepelná vodivost – umklapp procesy



$$v_g = \frac{d\omega}{dq}$$

$$q_1 + q_2 = q_3 + T$$

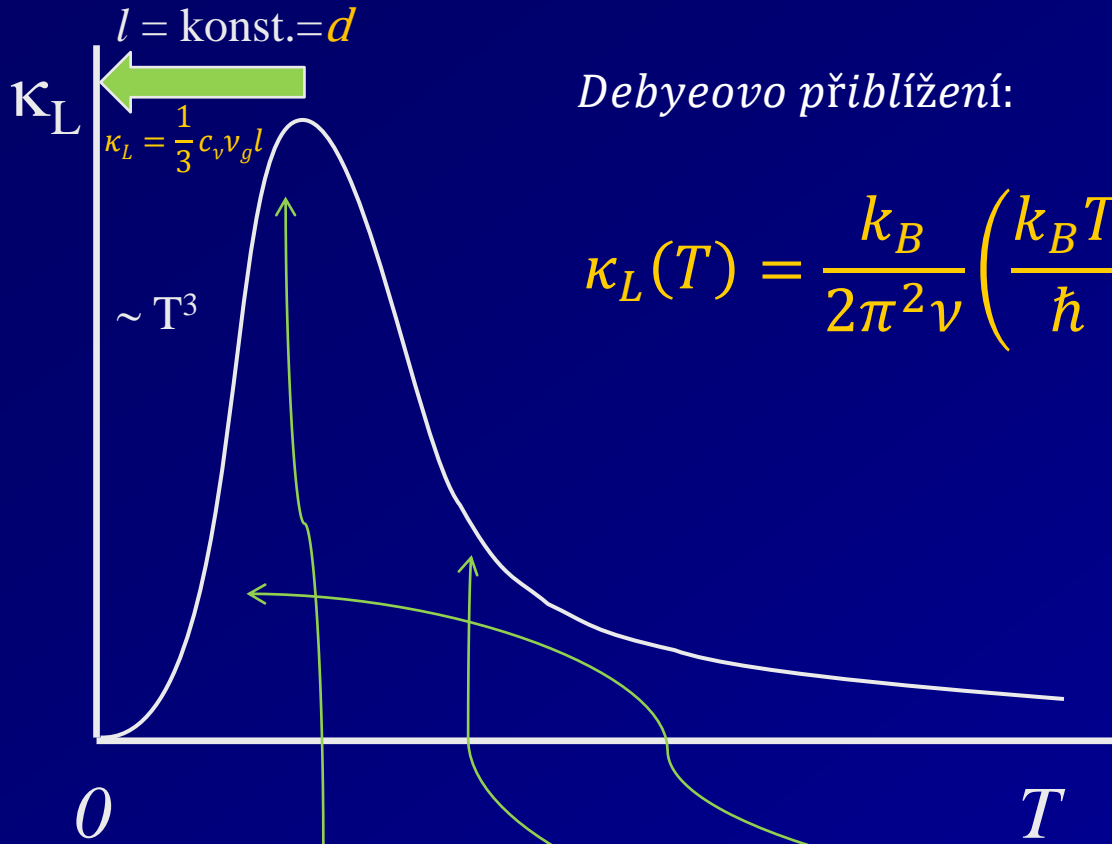
$$\kappa_L = \frac{1}{3} c_v v_g l$$

V okolí  $T_{\text{Debye}}$  strmě stoupá pravděpodobnost Umklapp- procesu .

Při U- procesu se mění znaménko grupové rychlosti  $v_g$  výsledného fononu ( po složení vln jde balíček na druhou stranu). To vede k poklesu tepelné vodivosti.

Všimněte si, že i N-procesy mohou vést k částečnému snížení tepelné vodivosti kvůli poklesu  $v_g$  v důsledku disperze.

# Teplotní průběh tepelné vodivosti



Debyeovo přiblížení:

$$\kappa_L(T) = \frac{k_B}{2\pi^2\nu} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \tau_c \frac{y^4 e^y}{(e^y - 1)^2} dy$$

$$y = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

$$\tau_c^{-1} = \frac{\nu}{d} + A\omega^4 + B\omega^2 T e^{-\frac{\theta_D}{3T}} + (C\omega)$$

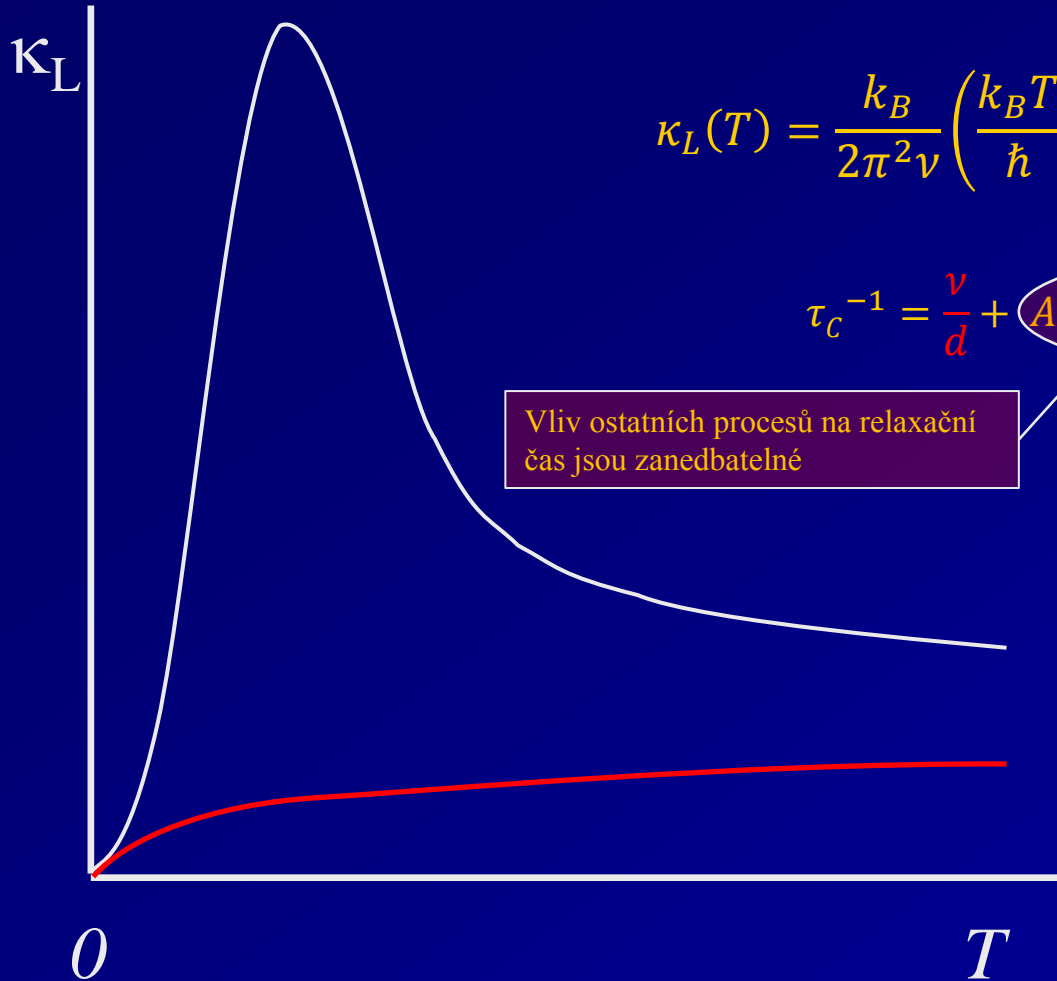
hranice

bodové defekty

3-fononový umklapp

elektron-fonon

# Teplotní průběh tepelné vodivosti - skla



$$\kappa_L(T) = \frac{k_B}{2\pi^2\nu} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \tau_c \frac{y^4 e^y}{(e^y - 1)^2} dy$$

$$\tau_c^{-1} = \frac{\nu}{d} + A\omega^4 + B\omega^2 T e^{-\frac{\theta_D}{3T}} + (C\omega)$$

Vliv ostatních procesů na relaxační čas jsou zanedbatelné

U skelných materiálů chybí uspořádání na dlouhou vzdálenost



volná dráha fononů srovnatelná s meziatomovou vzdáleností

$$\kappa_L = \frac{1}{3} c_v \nu_g l$$

# Elektronová složka tepelné vodivosti

Abychom mohli provést analýzu mřížkové tepelné vodivosti musíme od celkové vodivosti odečíst elektronovou část.

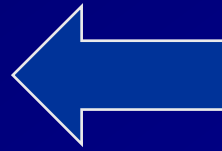
Wiedemann – Franzův zákon



$$\frac{\kappa_e}{\sigma T} = \text{konst.}$$

Lorenzovo číslo:

$$L_0 = \frac{\kappa_e}{\sigma T} = \frac{\pi^2 k^2}{3 e^2}$$



Kinetická teorie:

$$\kappa_e = \frac{n\pi^2 k^2 T \tau_\kappa}{3}$$

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau_\sigma}{m^*}$$

$\tau$  pochází z různých procesů, je třeba vyšetřit, kdy můžeme krátit a kdy ne !  
 Předpoklad, že vzhledem k vysoké tepelné rychlosti elektronů jsou obě  $\tau$  stejná, nemusí být splněn - pochází z různých procesů a je třeba je vyšetřit.

Závisí to na teplotě

$$T \Leftrightarrow T_D$$

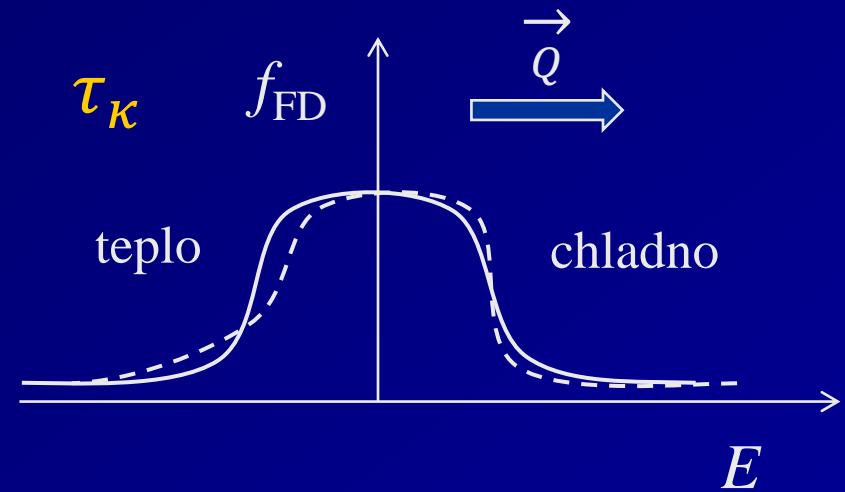
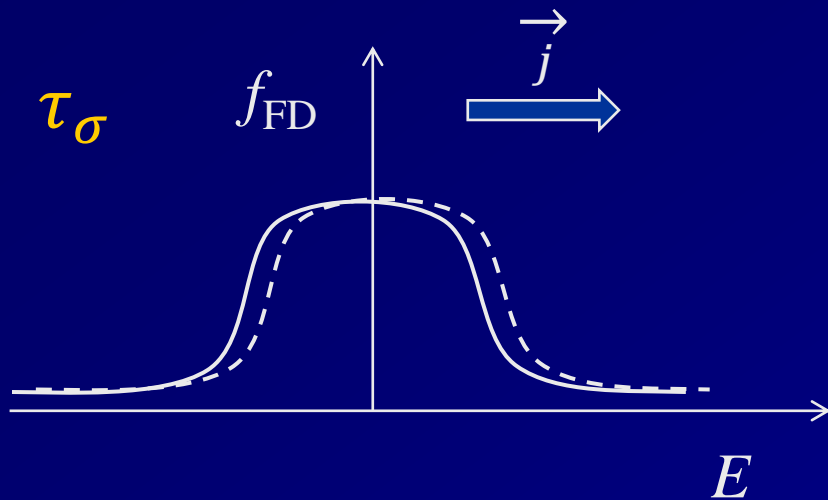
Matthiasenovo pravidlo

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3}$$

Neplatí přesně pokud

$$\tau = f(q) \quad \text{nebo} \quad \tau_1 \Leftrightarrow \tau_2$$

# Lorenzovo číslo - analýza – až po el.vodivosti



$$1) \quad T \geq T_D \quad \Rightarrow \quad q_{\text{fonon}} \approx k_F \quad \Rightarrow \quad \tau_\sigma, \tau_\kappa \sim \frac{1}{n_{\text{fononů}}} \sim \frac{1}{T}$$

$L = L_0$

$$2) \quad T \ll T_D \quad \Rightarrow \quad q_{\text{fonon}} \ll k_F \quad \Rightarrow \quad \tau_\sigma, \tau_\kappa \sim \frac{1}{n_{\text{nečistot}}} \quad \text{fonony}$$

$L = L_0$

$$3) \quad T < T_D \quad \Rightarrow \quad q_{\text{fonon}} < k_F \quad \Rightarrow \quad \tau_\sigma \neq \tau_\kappa \quad L < L_0$$

$L \neq L_0$

# Tepelná vodivost pevných látek – makroskopický popis

Fourierův zákon: 
$$\frac{d\vec{Q}}{dt} = -\kappa \operatorname{grad} T \quad \text{LFA}$$
$$Wm^{-2} = Wm^{-1}K^{-1} K m^{-1}$$

$\kappa$  je tepelná vodivost

$T$  je teplota

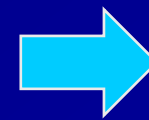
$Q$  je tepelný tok, směr vektoru je směrem plochy

Tepelná vodivost  $\kappa$  je materiálovým parametrem, který může mít

a) mřížkovou složku (všechny materiály)

b) elektronovou složku (vodiče + polovodiče)

c) bipolární složku (polovodiče)



Mikroskopický  
pohled

# Přenos tepla – záření – pozor na “průhledné” vzorky

Stefanův-Boltzmannův zákon: 
$$\frac{dQ}{dt} = \sigma T^4 S$$

Pro dvě tělesa s radiační výměnou tepla: 
$$\frac{dQ}{dt} = \varepsilon \sigma (T^4 - T_0^4) S$$

$\varepsilon$  je emisivita (pro a. černé těleso  $\varepsilon = 1$ )

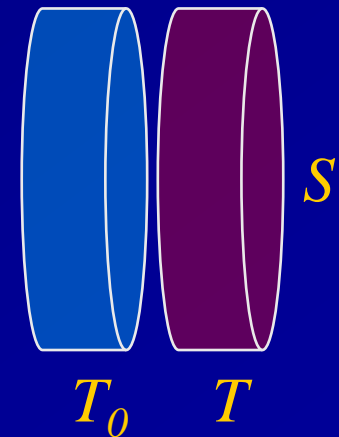
$\sigma$  je S.-B. konstanta

$$\lambda_{max} \cdot T = 0.0029 \text{ m} \cdot \text{K}$$

$T_0, T$  je teplota chladnějšího, teplejšího tělesa

$Q$  je převedené teplo z plochy  $S$

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Js}^{-1} \text{ m}^2 \text{ K}^{-4}$$



# Přenos tepla - konvekce

Přenos tepla z pevného tělesa do plynu nebo kapaliny

Newtonův zákon: 
$$\frac{dQ}{dt} = \beta(T - T_0)S$$

$T_0$ ,  $T$  je teplota chladnějšího, teplejšího media  
 $Q$  je převedené teplo ze styčné plochy  $S$  tělesa

$\beta$  koeficient přestupu tepla (z experimentu)  
Zjednoduší lze zavedením bezrozměrných  
kriterií (Biotovo, Prandtlovo, ...CHEMING)

$$\left( Bi = \frac{\beta V}{\kappa S} \right)$$

