הראנו כי תנודות הפונונים בגביש סביב מצבי שווי המשקל שלהם אינן מוליכות אנרגיה. מכיון שאופני תנודה אלה הינם גלים אלסטיים - פונונים, ניתן להעביר אנרגיה בו דרך הגביש על ידי יצירת חבילת גלים מתאימה - בדיוק כמו שהפרעה מתקדמת לאורך מיתר מתוח.

כל פונון נושא עימו אנרגיה, אך במצב אחיד צפיפות זרם תרמי, השווה לצפיפות האנרגיה $\frac{1}{V}\hbar\omega_s(\vec{k})$ במהירות החבורה שלו $\frac{\partial\omega_s(\vec{k})}{\partial\vec{k}}$. בשווי משקל תרמי מספר הפונונים הממוצע של הפונונים נתון על ידי $n_s(\vec{k}) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_s(\vec{k})}-1}$ ולכן צפיפות הזרם התרמי במצב זה הנה

$$j^{th} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k},s} \underbrace{\hbar\omega_s(\vec{k})}_{\text{זוגי ב-}\vec{k}} \underbrace{\frac{\partial\omega_s(\vec{k})}{\partial\vec{k}}}_{\text{אי זוגי ב-}\vec{k}} \underbrace{n_s(\vec{k})}_{\text{זוגי ב-}\vec{k}} = 0$$

מכיון ש:

כדי לקבל זרם תרמי לאורך קבוצה שונה לגודל מספר ממוצע של פונונים בכיוון מסוים $\vec{k}$. תנועת הפונונים העודפים (או החסרים) לא תהיה מחוץ הנ"ל ויגרום זרם כזה. בשלב אחרון עלינו לבדוק את הפונונים בהתפלגות השונה מהתפלגות שווי המשקל שלהם.

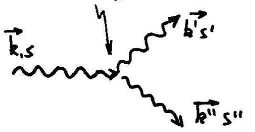
מכיון שפונונים הם מצבים עצמיים של הגביש בקירוב ההרמוני ההתפלגות הראשונית שלהם לא תשתנה בזמן והזרם התרמי ימשיך לזרום ללא הפרעה לתמיד. בגבישים אמיתיים (נעסוק כאן במבודדים כדי להתעלם מתרומת האלקטרונים למוליכות התרמית שבטמפרטורות נמוכות גדולה בשני סדרי גודל מתרומת הפונונים) זה אינו המצב משלוש סיבות:

1. היותו של הגביש הפיזיקלי שונה מהגביש המתמטי האידאלי. פגמים בגביש יפזרו את הפונונים.
2. גם בגביש אידאלי הפונונים יפזרו משפת הגביש.
3. גם בגביש אידאלי אינסופי הקירוב ההרמוני הוא רק קירוב. בשבילו אנחנו מוסיפים בהם יותר בהמילטוניאן הפונונים שמצבים יהפכו להיות מצבים עצמיים שלו ומצב התחלתי עם מספר נתון של פונונים לא ישאר כזה לאורך זמן.

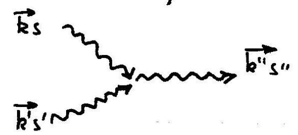
אנו נרצה לגעת בנקודה האחרונה השאלה מעלה יותר לשאלה לקבל גביש עם מוליכות חום גבוהה כרצוננו

נתבונן באיבר האנהרמוני הראשון: איבר מסדר שלישי ב-u (איברים כאלה אסורים במודל של סימטריית סבוב מושלמת של המרחב כי אז לא נוכל ליצור סקלר מאבר הבנוי מ-$\vec{u}$ ו-$\vec{\nabla}\vec{u}$ מסדר שלישי. הם יכולים להופיע בגבישים עם סימטריית סבוב נמוכה יותר).

מכיון ש-$u \sim (a+a^+)$ איברים מסדר שלישי יכולים לתאר תהליכים מהצורה $a^+_{\vec{k}''s''}a^+_{\vec{k}'s'}a_{\vec{k}s}$



דעיכה של פונון $\vec{k},s$ לשני פוננים $\vec{k}'s'$ ו-$\vec{k}''s''$

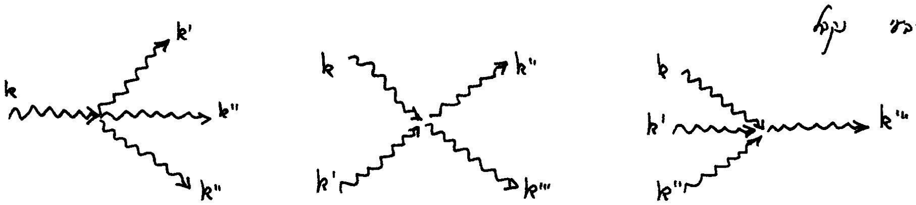


מיזוג של שני פוננים $\vec{k}s$ ו-$\vec{k}'s'$ לפונון חדש ב-$\vec{k}''s''$

דיאגרמה זו נותנת מאיבר $a^+_{\vec{k}''s''}a_{\vec{k}'s'}a_{\vec{k}s}$

דיאגרמות אלה מתארות תהליכי פיזור של פוננים. שימו לב כי עבור פוננים מספר הפוננים אינו חייב להישמר בתהליכי הפיזור.

בסדר רביעי נקבל



חוזק הצימוד של תהליכי פיזור אלה תלויים במידת הסטייה של הפוטנציאל האמיתי מקירוב ההרמוני. אנו לא נכנס לפרטים אלה ונשתמש רק בעובדה שהאנרגיה נשמרת בתהליכי הפיזור

$$\sum \hbar\omega_s(\vec{k})\, n_{\vec{k}s} = \sum \hbar\omega_s(\vec{k})\, n'_{\vec{k}s}$$

כאשר $n_{\vec{k}s}$ מספרי האכלוס ההתחלתיים
$n'_{\vec{k}s}$ מספרי האכלוס הסופיים

וכן גם תנע הגביש (התנע עד כדי וקטור שריג הופכי). ראינו בתרגול כי זהו התנע הנשמר כאשר ישנו השריג (התנע הפשוט אינו נשמר כי השריג שובר את סימטריית ההזזה) ראינו גם דוגמא לכך בעת שטיפלנו בפיזור נייטרונים מהשריג.

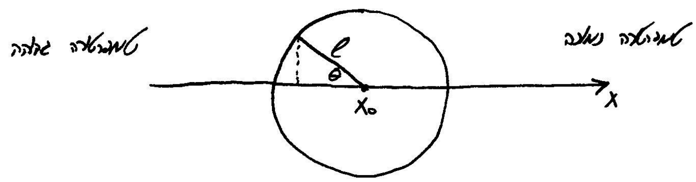
$$\sum \vec{k}\, n_{\vec{k}s} = \sum \vec{k}\, n_{\vec{k}s} + \vec{K} \qquad \vec{K} \in R.L.$$

נבוא כעת לחשב המוליכות התרמית תוך שימוש במודל קינטי פשוט.

נניח כי

1. אנו עוסקים בסריג מונואטומי: קיימים רק אופנים אקוסטיים עבורם נניח $\omega = ck$
2. הסיכוי שפונון יעבור פיזור במשך פרק הזמן dt הינו $\frac{dt}{\tau}$. τ נקרא ה mean free time מכיון שכפי שראינו בתרגיל הבית τ הינו הזמן הממוצע בין התנגשויות
3. קיים מפל טמפרטורה על פני הדוגמא $T(x)$ (נניח לשם פשטות כי T תלויה רק ב x כדי להפוך הבעיה לבעיה חד מימדית) כך שצפיפות האנרגיה הממוצעת בנקודה x הינה $u(x)=u^{eq}[T(x)]$ כלומר אנו מניחים כי כל חלק בדוגמא נמצא בשיווי משקל לוקלי הנקבע על ידי הטמפרטורה בו.
4. פונון המפוזר בנקודה x יוצא מתהליך הפיזור בכיוון אקראי ונושא עימו צפיפות אנרגיה הנקבעת על ידי $u(x)$ – הנחה זו גם מתאימה ליצירת שיווי המשקל הלוקלי.

נתבונן בנקודה x_0 לאורך ציר x. פונון המגיע אליה עבר באופן ממוצע התנגשות קודם הנמצאת על פני כדור שמרכזו ב x_0 ורדיוסו $\ell = c\tau$ (ℓ: mean free path).



אם נסמן ב θ את הזווית בין רדיוס הוקטור של נקודת הפיזור האחרונה וציר x נקבל כי הפונון נושא עימו צפיפות זרם תרמי בכיוון x של $c_x u(x_0-\ell\cos\theta)$ כאשר $c_x = c\cos\theta$ הינה מהירותו בכיוון x. משיקולי סימטריה צפיפות הזרם התרמי בכיוון y ו z מתאפסת.

כדי למצוא את הזרם הממוצע ב x_0 עלינו לסכם על התרומות מפונונים המגיעים מכל הנקודות על הכדור:

$$j^{th} = \langle c_x u(x_0-\ell\cos\theta)\rangle_{\text{ממוצע על הכדור}} = \underbrace{\frac{1}{4\pi}}_{\text{פקטור הנירמול להסתברות}} \underbrace{2\pi}_{\text{תוצאת האינטגרציה על } \varphi} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \, c\cos\theta \, u(x_0-\ell\cos\theta)$$

$$= \frac{c}{2}\int_{-1}^{1} d\mu \, \mu \, u(x_0-\ell\mu) \qquad \mu=\cos\theta$$

$$= \frac{c}{2}\int_{-1}^{1} d\mu \, \mu \left[u(x_0) - \ell\mu \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_0}\right]$$

נפתח לסדר ראשון: קטנות מפל טמפרטורה

[illegible]

$$= -\frac{1}{3} c l \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{3} c l \frac{\partial u}{\partial T}\left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right)$$

$$j^{th} = \kappa\left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right)$$

$$\kappa = \frac{1}{3} c l \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{1}{3} c_v c l = \frac{1}{3} c_v c^2 \tau$$

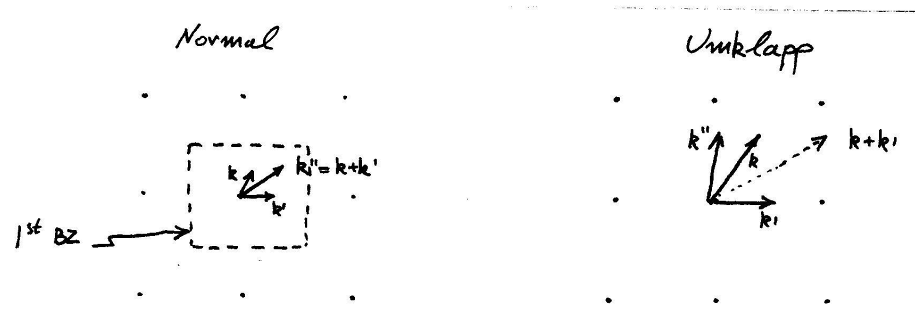
כאשר הגדרנו את מוליכות החום
כאשר C_v הינו קיבול החום הסגולי של הדוגמא.

התלות בטמפרטורה של κ נובעת מהתלות בטמפרטורה של C_v ושל הזמן הממוצע בין פיזורים τ.

<u>בטמפרטורות גבוהות</u> $T \gg \Theta_D$ אנו יודעים כי $C_v \to nk_B$ ולכן להיות לא תלוי בטמפרטורה.
מצד שני מספר הפונונים הממוצע בתחום זה פרופורציוני לטמפרטורה $n_s(\vec{k}) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_s(\vec{k})}-1} \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega_s(\vec{k})}$
ולכן סביר להניח ש-τ יקטן עם הטמפרטורה
(קיים סיכוי גבוה יותר לפיזור פונון-פונון) התוצאות מבוססות יותר מראות כי בתחום זה $\tau \sim \frac{1}{T^\alpha}$
כאשר $\alpha \approx 1-2$. לכן גם $\kappa \sim \frac{1}{T^\alpha}$ בתחום זה.

<u>בטמפרטורות נמוכות</u> $T \ll \Theta_D$ אנו יודעים כי $C_v \sim T^3$
נתבונן כעת ביתר פירוט בתהליכי הפיזור של הפונונים:
כאשר $T \ll \Theta_D$ הפונונים הקיימים בדוגמא הינם בעלי $\omega_s(\vec{k}) \ll \omega_D$! $k \ll k_D$ מכיוון שגם מספרם קטן (אקספוננציאלית) אנו מצפים כי בכל תהליך פיזור ישתתף מספר קטן של פונונים שהאנרגיה והתנע הכוללים שלהם יהיו קטנים מ-$\hbar\omega_D$ ו-k_D.
מכיוון שהאנרגיה נשמרת בהתנגשות היא תמשיך להיות קטנה מ-$\hbar\omega_D$ גם אחריה. זה אומר רק אם וקטור הגל של כל אחד מהפונונים היוצאים מההתנגשות קטן מ-k_D ולכן גם וקטור הגל הכולל הסופי יהיה קטן מ-k_D. מכיוון שהגענו למסקנה כי וקטורי הגל הכוללים ההתחלתיים והסופיים קטנים מ-k_D וקטור השריג ההופכי המופיע בחוק שימור תנע הגביש חייב להיות 0.
($k_D = \left(6\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} \approx \frac{2\pi}{a}$ הוא מסדר גודל של וקטור השריג ההופכי הקטן ביותר השונה מ-0)

הגענו לכן למסקנה כי בטמפרטורות נמוכות מאוד הרוב המכריע של תהליכי הפיזור משמר את תנע הגביש באופן מדויק ולא עד כדי וקטור שריג הופכי. פיזורים כאלה נקראים <u>פיזורים נורמליים</u>.
פיזורים בהם התנע נשמר עד כדי וקטור שריג הופכי נקראים פיזורי אומקלפ <u>Umklapp processes</u>



אבל אם בדוגמא מתרחשים רק תהליכי פיזור נורמליים הנחות המודל הפשטני שאמרנו נותנות אין תקבעו ימני. הסיבה היא כי במקרה זה הדוגמא לא יכולה להגיע להתפלגות שווי המשקל הלוקלי אומה המתע. ניתן לראות זאת בקלות אם נשים לב כי תחת התפלגות שווי המשקל תנע הגבש המתנע מתאפס ואילו אם במערכת מתרחשים רק פגעים נורמליים תנע הגבש ההתחלתי k הכולל אינם אנו מפריעים השוע מיגעס לא ישתנה אלא ישאר סופי לאורך זמן.
התהליכים באיזון הגורמים לתנע התחלתי זה לדעוך הנם הינם Umklapp processes שהסתברותם בטמפרטורה נמוכה $\frac{1}{e^{\theta_D/T}-1} \sim e^{-\frac{\theta_D}{T}}$. ולכן: $\tau \sim e^{T_0/T}$ כאשר T_0 מסדר גודל של θ_D

הגרף מוליכות החום כפונקציה של טמפרטורה תראה לכן