Chương IV
TÍNH CHẤT NHIỆT CỦA CHẤT RẮN

I. NHIỆT DUNG CỦA CHẤT RẮN

1. Nhiệt dung

Theo định luật I của nhiệt động lực học:

$$dQ = dU - dW$$

Trong đó:

- dQ : nhiệt năng
- dU : nội năng
- dW : công, $dW = pdV$

Nhiệt dung đẳng tích:

$$C_V = \left(\frac{\partial Q}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

Nội năng của vật rắn U:

$$U = U_{mạng} + U_{electron}$$

$U_{mạng}$ = Năng lượng toàn phần của gốc nguyên tử dao động quanh nút mạng

$U_{electron}$ = Năng lượng toàn phần của các electron

$\Rightarrow$ Nhiệt dung của vật rắn:

$$C_{VR} = C_{mạng} + C_{electron}$$

2. Kết quả thực nghiệm

- *Ở nhiệt độ phòng* (300°K): giá trị nhiệt dung của hầu hết các chất có giá trị không đổi $3R = 3Nk_B = 6$ cal/mol.độ.
- *Ở nhiệt độ thấp:* Khi giảm nhiệt độ nhiệt dung giảm rõ rệt và tiến đến giá trị $C_V = 0$ khi $T = 0$

❑ Đối với chất điện môi

$$C_V \sim T^2$$

❑ Đối với kim loại

$$C_V \sim T$$

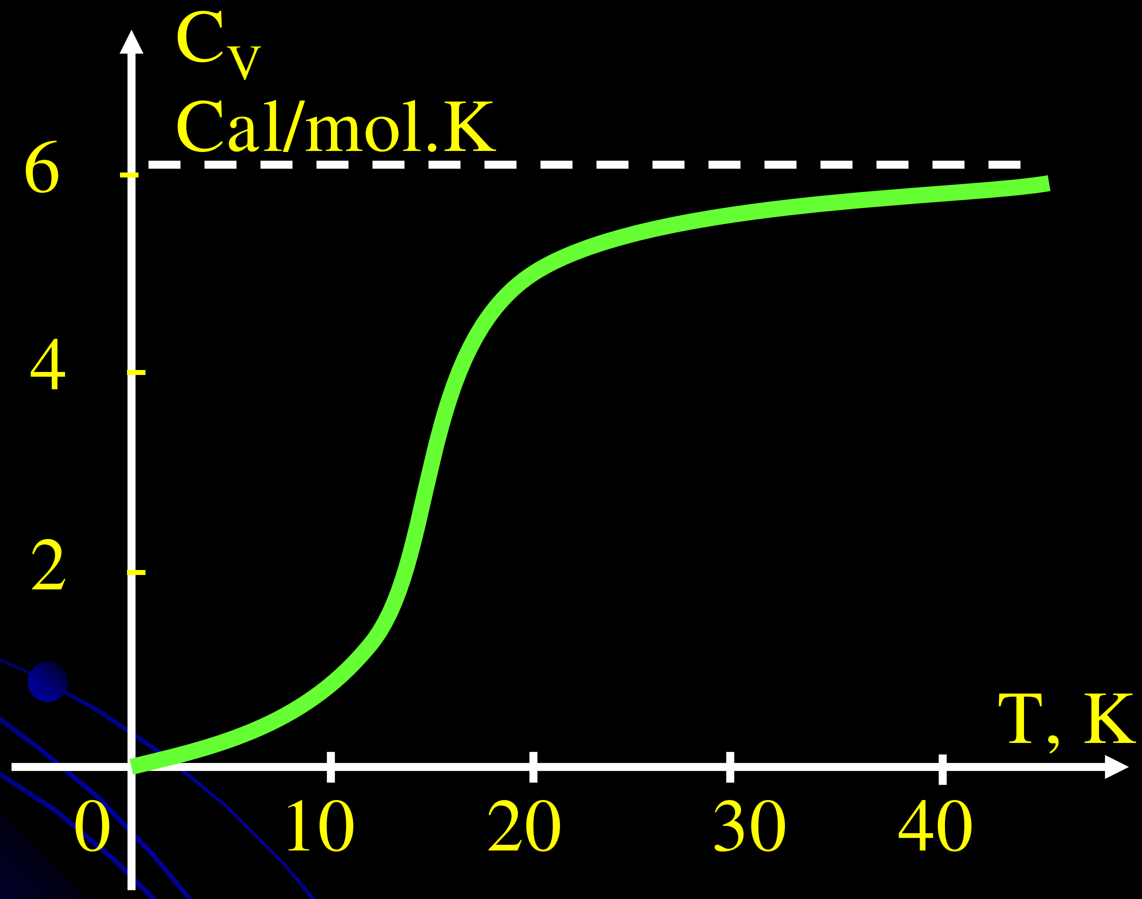
- *Khi T tăng :* C_V tăng dần đến giá trị không đổi

$$3R = 3NkB = 6 \text{ cal/mol.độ}$$

❑ Điện môi $\quad C \sim T^3$

❑ Kim loại $\quad C \sim \gamma T$

với $\gamma \approx 10^{-4}$ cal/mol.độ^2


C_V
Cal/mol.K
6
4
2
T, K
0
10
20
30
40

3. NHIỆT DUNG ĐẲNG TÍCH CỦA MẠNG TINH THỂ

LÍ THUYẾT CỔ ĐIỂN

Mô hình

1 hạt ở nút $\rightarrow$ 3 dao động tử điều hòa.

Tinh thể N hạt $\rightarrow$ 3N dao động tử.

Năng lượng của một dao động tử:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

với $m\omega^2 = f$ = hệ số của lực Hooke

Theo phân bố Boltzman:

Khi cân bằng nhiệt, năng lượng trung bình của một dao động tử:

$$\langle E\rangle = \frac{\int\int_0^{\infty} E.e^{-\frac{E}{kT}} dv.dx}{\int\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} dv.dx}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\frac{m}{2}\int\int_0^{\infty}\left(v^2+\omega^2x^2\right)e^{-\frac{m\left(v^2+\omega^2x^2\right)}{2kT}}.dvdx}{\int\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} dvdx}$$

$$= \frac{\int_0^{\infty}\frac{mv^2}{2}e^{-\frac{mv^2}{2kT}}dv}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{mv^2}{2kT}}dv} + \frac{\int_0^{\infty}\frac{m\omega^2x^2}{2}e^{-\frac{m\omega^2x^2}{2kT}}dx}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{m\omega^2x^2}{2kT}}dx}$$

Triển khai tính toán:

$$\langle E\rangle = \frac{\int_0^\infty \frac{mv^2}{2}.e^{-\frac{mv^2}{2kT}}.e^{-\frac{m\omega^2x^2}{2kT}}dv}{\int_0^\infty e^{-\frac{mv^2}{2kT}}.e^{-\frac{m\omega^2x^2}{2kT}}dv} + \frac{\int_0^\infty \frac{m\omega^2x^2}{2}.e^{-\frac{mv^2}{2kT}}.e^{-\frac{m\omega^2x^2}{2kT}}dx}{\int_0^\infty e^{-\frac{mv^2}{2kT}}.e^{-\frac{m\omega^2x^2}{2kT}}dx}$$

$$\langle E\rangle = \underbrace{\frac{\int_0^\infty \frac{mv^2}{2}e^{-\frac{mv^2}{2kT}}dv}{\int_0^\infty e^{-\frac{mv^2}{2kT}}dv}}_{\langle E_đ\rangle} + \underbrace{\frac{\int_0^\infty \frac{m\omega^2x^2}{2}e^{-\frac{m\omega^2x^2}{2kT}}dx}{\int_0^\infty e^{-\frac{m\omega^2x^2}{2kT}}dx}}_{\langle E_t\rangle}$$

Trong dao động điều hòa:

động năng trung bình = thế năng trung bình

$$\Rightarrow \langle E_đ \rangle = \langle E_t \rangle$$

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty \frac{mv^2}{2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv}{\int_0^\infty e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv} + \frac{\int_0^\infty \frac{m\omega^2 x^2}{2} e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}} dx}{\int_0^\infty e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}} dx}$$

Ta đặt:

$$u^2 = \frac{mv^2}{2kT} = \frac{m\omega^2 x^2}{2kT}$$

$$2udu = \frac{m}{2kT} 2vdv \rightarrow dv = 2kT \frac{udu}{mv} = 2kT. \frac{udu}{\sqrt{\frac{2kT}{m}}.u}$$

$$\langle E\rangle = 2kT\frac{\int_0^\infty u^2 e^{-u^2}du}{\int_0^\infty e^{-u^2}du}$$

Theo định nghĩa và tính chất hàm Gamma:

$$\Gamma(n) = \int_0^\infty x^{n-1}e^{-x}dx \qquad \Gamma(n) = (n\text{-}1)\,\Gamma(n\text{-}1)$$

$$\rightarrow \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

Đặt $x = u^2 \rightarrow dx = 2udu$

$$\langle E\rangle = 2kT\frac{\int_0^\infty x.e^{-x}.\dfrac{dx}{2\sqrt{x}}}{\int_0^\infty e^{-x}.\dfrac{dx}{2\sqrt{x}}} = 2kT\frac{\int_0^\infty x^{\frac{1}{2}}.e^{-x}dx}{\int_0^\infty x^{-\frac{1}{2}}.e^{-x}dx}$$

$$\langle E \rangle = 2kT.\frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})} = 2kT.\frac{(\frac{3}{2}-1).\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})} = kT$$

Năng lượng của hệ gồm N hạt (3N dao động tử điều hòa): $U = 3NkT$

→ Nhiệt dung đẳng tích: $C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = 3Nk$

→ Nhiệt dung đẳng tích của 1 mol:

$$C_V = 3N_A k = 3R = 6 \text{ cal/mol.độ}$$

Vậy: Lí thuyết cổ điển phù hợp với thực nghiệm ở nhiệt độ cao, không phù hợp ở nhiệt độ thấp.

LÍ THUYẾT EINSTEIN

Mô hình : một chất rắn có N hạt là tập hợp của 3N dao động tử điều hòa độc lập có cùng tần số ν

→ Năng lượng của mỗi dao động tử (1 lượng tử)

$$E_n = nh\nu \quad \text{với n là số nguyên.}$$

Năng lượng trung bình của một dao động tử là:

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} nh\nu . e^{-\frac{nh\nu}{kT}}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}}} = \frac{h\nu\left(e^{-\frac{h\nu}{kT}} + 2e^{-\frac{2h\nu}{kT}} + \ldots\right)}{\left(1 + e^{-\frac{h\nu}{kT}} + e^{-\frac{2h\nu}{kT}} + \ldots\right)}$$

$$\langle E\rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Năng lượng trung bình của hệ gồm 3N dao động tử:

$$U = 3N.\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Ở nhiệt độ cao: $kT >> h\nu \Rightarrow x << 1$:

$$\mathbf{e^{-x} \approx 1 + x + x^2 + \ldots}$$

$$e^{-\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx 1 + \frac{h\nu}{kT} + \left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 + \ldots - 1 \approx \frac{h\nu}{kT}$$

$$\rightarrow \; U = 3NkT$$

$\Rightarrow$ phù hợp với kết quả cổ điển

(Định luật Dulông- Petit)

* Ở nhiệt độ thấp: $kT \ll h\nu \Rightarrow x \gg 1$:

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \approx h\nu . e^{-\frac{h\nu}{kT}}$$

$$\rightarrow \quad U = 3N\langle E\rangle \quad \rightarrow \quad C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 3Nk\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 .e^{-\frac{h\nu}{kT}}$$

Đặt: $\theta_E = \frac{h\nu_E}{k}$: nhiệt độ Einstein

$$C_V = 3Nk\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 .e^{-\frac{\theta_E}{T}}$$

→ C_V giảm theo nhiệt độ theo hàm $e^{-\frac{\theta_E}{T}}$ nhanh hơn kết quả đo được bằng thực nghiệm.

⇒ *Lí thuyết Einstein cho phép giải thích C_V không đổi ở nhiệt độ cao, ở nhiệt độ thấp C_V giảm khi nhiệt độ giảm nhưng giảm nhanh hơn kết quả thực*

LÍ THUYẾT DEBYE

MÔ HÌNH

Chất rắn gồm các dao động tử; một dao động tử không biểu thị dao động của từng gốc nguyên tử như mẫu của Einstein mà biểu thị cho dao động chuẩn của toàn tinh thể.

Tinh thể có N nguyên tử thì có 3N dao động chuẩn: N dao động dọc và 2N dao động ngang.

Năng lượng trung bình của một dao động tử với tần số ν là:

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

- Năng lượng của mạng tinh thể chất rắn là:

$$U = \sum_{i=1}^{N} U_{i\,dọc} + \sum_{i=1}^{2N} U_{i\,ngang} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{h\nu_i}{e^{\frac{h\nu_i}{kT}} - 1}$$

- Tinh thể là một môi trường tán sắc

→ Hệ thức tán sắc:

$$\omega = qv$$

$$q = \frac{2\pi}{\lambda}$$: vectơ sóng

- Tinh thể hữu hạn có các cạnh L_x, L_y, L_z.

Điều kiện biên vòng cho hàm sóng:

$$\exp[iq(r + L)] = \exp iqr$$

$$\rightarrow \quad q_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x; \quad q_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y; \quad q_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z$$

Với n_x, n_y, $n_z \in Z$

$$q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2}$$

Trường hợp đơn giản
Tinh thể lập phương cạnh L

- Môi trường đẳng hướng.
- Vận tốc truyền các sóng lấy trung bình là v_o.

$\rightarrow$ Hệ thức tán sắc:

$$\omega_0 = v_0 q_n = v_0 \frac{2\pi}{L} n = v_0 \frac{2\pi}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

Xét trong không gian q

- Các giá trị được phép của q xác định vị trí các nút của mạng.
- Ô nguyên tố của mạng này có dạng lập phương cạnh $\frac{2\pi}{L}$ → Thể tích ô mạng:

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{V}$$

V = thể tích của tinh thể, $V = L^3$.

- Các điểm có cùng một giá trị của q thuộc cùng một mặt cầu có bán kính q → thể tích mặt cầu $\frac{4}{3}\pi q^3$

→Số các giá trị được phép của q bằng số dao động tử có số sóng từ 0 → q:

$$N(q) = \frac{\frac{4}{3}\pi q^3}{\frac{8\pi^3}{V}} = V\frac{q^3}{6\pi^2} \quad \Rightarrow q = \frac{2\pi}{L}.\sqrt[3]{\frac{3N(q)}{4\pi}}$$

Hệ thức tán sắc: $\omega = v_o q = v_o.\frac{2\pi}{L}.\sqrt[3]{\frac{3N(q)}{4\pi}}$

Số các dao động tử có tần số ν từ 0 → ν :

$$N(\nu) = \frac{V}{6\pi^2}\left(\frac{2\pi\nu}{v_o}\right)^3 = V.\frac{4\pi}{3v_o^3}\nu^3$$

Với $q = \dfrac{2\pi}{\lambda} = \dfrac{2\pi\nu}{v_o}$

Số dao động tử có giá trị q trong khoảng $q \to q + dq$:

$$dN(q) = V.\frac{q^2}{2\pi^2}dq$$

$$\to \quad g(q) = \frac{dN(q)}{dq} = V\frac{q^2}{2\pi^2} \qquad (1)$$

Số dao động tử có ν trong khoảng $\nu \to \nu + d\nu$:

$$dN(\nu) = V.\frac{4\pi}{v_o^3}\nu^2 d\nu \to g(\nu) = \frac{dN(\nu)}{d\nu} = V\frac{4\pi}{v_o^3}\nu^2 \quad (2)$$

(1) và (2) : gọi là hàm mật độ trạng thái (mật độ mode dao động).

Nội năng của hệ:

$$U = \int \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} dN(\nu) = \int_0^{\nu_{max}} \frac{h}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} .\nu. \frac{4\pi}{v_o^3} \nu^2 d\nu$$

Dùng giá trị trung bình của vận tốc theo công thức:

$$\frac{1}{v_o^3} = \frac{1}{v_d^3} + \frac{2}{v_{ng}^3} = const$$

$$V.\frac{4\pi}{v_o^3}\int_0^{\nu_{max}} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.\nu^2 d\nu = V.\frac{4\pi}{v_o^3}\int_0^{\nu_{max}} \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu$$

ν_{max} : tần số cực đại của dao động chuẩn, được tính từ

$$\int_0^{\nu_{max}} dN(\nu) = 3N$$

$$\rightarrow V.\frac{4\pi}{v_o^3}\underbrace{\int_0^{\nu_{max}} \nu^2 d\nu}_{\frac{\nu_{max}^3}{3}} = 3N$$

$$\Rightarrow \nu_{max} = \sqrt[3]{\frac{9N}{4\pi V}}.v_0$$

Đặt: $x = \dfrac{h\nu}{kT} \rightarrow x_{max} = \dfrac{h\nu_{max}}{kT} = \dfrac{\theta_D}{T}$

$\rightarrow \theta_D = \dfrac{h\nu_{max}}{k}$: nhiệt độ Debye.

$$\rightarrow \nu = \frac{kT}{h}x \rightarrow d\nu = \frac{kT}{h}dx$$

$$\rightarrow U = V.\frac{4\pi}{v_o^3}\int_0^{x_{max}} \frac{h.\left(\frac{kT}{h}x\right)^3}{e^x - 1}.\frac{kT}{h}dx$$

$$\rightarrow U = V.\frac{4\pi}{h^3 v_o^3} k^4 T^4 \int_0^{x_{max}} \frac{x^3}{e^x - 1}dx$$

** Ở nhiệt độ cao:* $kT >> h\nu \rightarrow x << 1$

$$e^x = 1 + x + x^2 + \ldots \approx 1 + x$$

$$U = V.\frac{4\pi}{h^3 v_o^3} k^4 T^4 \frac{x_{max}}{3}$$

$$\Rightarrow U = V.\frac{4\pi}{h^3 v_o^3} k^4 T^4 \left(\frac{h\nu_{max}}{kT}\right)^3$$

$$\rightarrow U = V.\frac{4\pi}{h^3 v_o^3} k^4 T^4 \underbrace{\int_0^{x_{max}} \frac{x^3}{1 + x - 1} dx}_{\int_0^{x_{max}} x^2 dx = \frac{x_{max}^3}{3}}$$

$$\Rightarrow U = V.\underbrace{\frac{4\pi}{h\nu_o^2}kT}_{\frac{9N}{4\pi V}.\nu_o^3}.\nu_{max}^3 = 3NkT$$

U = 3NkT : trùng với kết quả cổ điển.

- *Ở nhiệt độ thấp:* $x = \dfrac{h\nu}{kT} >> 1$

$$\Rightarrow \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$$

$$U = \frac{4\pi V}{h^3 \nu_o^3} k^4 T^4 \frac{\pi^4}{15} = \frac{4\pi V}{h^3 \dfrac{4\pi V}{9N} \nu_{max}^3} \frac{\pi^4}{15} k^4 T^4$$

$$\Rightarrow U = \frac{9N\pi^4 k^4 T^4}{15 h^3 \nu_{max}^3}$$

Nhiệt dung

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{12N\pi^4k^4}{5h^3\nu_{max}^3}T^3 = \frac{12N\pi^4k}{5}\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

$$\Rightarrow C_V = \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

$C_V \sim T^3 \quad \rightarrow \quad$ phù hợp với thực nghiệm.

$\Rightarrow$ *Lí thuyết Debye trùng với kết quả thực nghiệm ở cả nhiệt độ cao với nhiệt độ thấp.*

II. LÍ THUYẾT PHONON VỀ NHIỆT DUNG

Ánh sáng có lưỡng tính:

- Tính chất sóng đặc trưng bởi bước sóng

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$

- Tính chất hạt đặc trưng bởi năng lượng photon

$$\varepsilon = h\nu$$

hay xung lượng $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

$\vec{k}$ = vectơ sóng.

⇒Sự lượng tử hóa sóng ánh sáng là photon. Tương tự, sự lượng tử hóa của sóng đàn hồi trong tinh thể là phonon có năng lượng và xung lượng. Photon có thể tồn tại trong chân không, nhưng phonon chỉ có trong các môi trường có thể truyền sóng đàn hồi.

$$\rightarrow \begin{cases} \text{photon : hạt thực} \\ \text{phonon : chuẩn hạt} \end{cases}$$

Năng lượng trung bình của một dao động tử trong tinh thể là:

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} = \langle n \rangle h\nu$$

với $\langle n \rangle = \dfrac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$: số phonon trung bình có năng lượng $h\nu$.

Ở nhiệt độ xác định, số phonon coi như xác định.

* *Ở nhiệt độ cao:* $x = \dfrac{h\nu}{kT} << 1$

$$\rightarrow e^x - 1 \approx 1 + x - 1 \approx x = \frac{h\nu}{kT}$$

$$\rightarrow \langle E \rangle = kT = \langle n \rangle h\nu$$

$$\rightarrow \langle n \rangle = \frac{kT}{h\nu}$$

$$q = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{v_o} \rightarrow \nu = \frac{q v_o}{2\pi}$$

$$\rightarrow \langle n \rangle = \frac{kT}{h.\dfrac{q v_o}{2\pi}} = \frac{kT}{\hbar q v_o}$$

Số phonon trong thể tích V:

$$N_p = \int_o^{q_{max}} \langle n \rangle . \underbrace{dN(q)}_{\underbrace{\frac{dN(q)}{dq}}_{g(q)} .dq} = \int_o^{q_{max}} \frac{kT}{\hbar v_o q} . V \frac{q^2}{2\pi^2} dq$$

Với $g(q) = \dfrac{dN(q)}{dq} = V \dfrac{q^2}{2\pi^2}$ $\quad q_{max} = \dfrac{2\pi\nu_{max}}{v_o}$

$$\rightarrow N_p = \frac{kT}{\hbar v_o} V \frac{q_{max}^2}{4\pi^2}$$

$$\text{Mà} \quad N_p(q) = V\,\frac{q_{max}^3}{4\pi^2} = \frac{V}{4\pi^2}\cdot\frac{2\pi\nu_{max}}{v}$$

$$\to\ N_p = 3N\left(\frac{3}{2}\frac{T}{\theta_D}\right) \sim T$$

$$\Rightarrow C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \text{const}$$

$$\to\ \theta_D = \frac{h\nu_{max}}{k}$$: nhiệt độ Debye.

** Ở nhiệt độ thấp:*

$$Np \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \sim T^3$$

$$\text{và}\quad C_V \sim 234Nk \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \sim T^3$$

$\Rightarrow$ *Lý thuyết phonon về nhiệt dung phù hợp với kết quả thực nghiệm.*

TÓM LẠI

- Tinh thể chất rắn có thể coi như là một hộp chứa khí phônôn có số phônôn thay đổi theo nhiệt độ của chất rắn.
- Phônôn và phôtôn đều tuân theo phân bố Bose – Einstein và được gọi là các hạt Boson.

III. SỰ DẪN NHIỆT VÀ NỞ NHIỆT CỦA CHẤT RẮN

SỰ DẪN NHIỆT

Trong các vật rắn điện môi quá trình dẫn nhiệt chủ yếu là do các phônôn.

Theo thuyết động học chất khí: Hệ số dẫn nhiệt trong chất khí là:

$$k = \frac{1}{3} C_V \langle v \rangle .\lambda$$

C_V : nhiệt dung của một đơn vị thể tích khí.

$\langle v \rangle$: vận tốc trung bình của các phân tử khí.

$\langle \lambda \rangle$: quãng đường tự do trung bình của các hạt.

Trong chất rắn: Coi như một hộp chứa khí phonon

Debye đã dùng công thức trên cho tinh thể, với:

C_V : nhiệt dung của mạng tinh thể.

$\langle v \rangle$: vận tốc của phonon (vận tốc truyền âm) = v_o.

$\langle \lambda \rangle$:quãng đường tự do trung bình của các phonon được xác định bởi hai quá trình:

+ Tán xạ hình học:

Tán xạ trên mặt tinh thể, sai hỏng, ...

+ Tán xạ phonon – phonon.

Quãng đường tự do trung bình λ_p của phônôn tỉ lệ nghịch với nồng độ phônôn n_p và tiết diện tán xạ hiệu dụng σ_p:

$$\lambda p = \frac{1}{n_p \sigma_p}$$

$$\Rightarrow K = \frac{1}{3} C_V \langle v \rangle \frac{1}{n_p \sigma_p}$$

Ở Nhiệt độ cao ($T \gg \theta_D$):

$$C_V = \text{const};\ n_p = 3n\ \frac{3}{2}\left(\frac{T}{\theta_D}\right)$$

$$\Rightarrow K = \frac{\text{const}}{T}$$

$\Rightarrow$ K sẽ giảm khi nhiệt độ tăng. Phù hợp định tính với kết quả thực nghiệm.

➢ Ở Nhiệt độ thấp (T << θ_D):

$$C_V \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3;\ n_p = \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \Rightarrow K = \text{const.}$$

- Thực tế K tiếp tục tăng khi hạ nhiệt độ.

- Giải thích là do khi nhiệt độ giảm thì biên độ dao động của nguyên tử giảm $\Rightarrow$ quãng đường tự do trung bình λ_p của các phônôn tăng cho đến khi quãng đường tự do trung bình bị hạn chế bởi tán xạ hình học trên các nút mạng tinh thể.

SỰ NỞ NHIỆT

- Coi mạng tinh thể như một hệ các dao động tử (DĐT) dao động điều hòa.
- Khi nhiệt độ tăng biên độ dao động của các DĐT tăng $\Rightarrow$ Khoảng cách giữa các nguyên tử tăng $\Rightarrow$ Nở nhiệt.
- Những phép tính toán chính xác cho ta kết quả hệ số nở nhiệt $\alpha \sim C_V$

Ở nhiệt độ cao: $C_V = const \Rightarrow \alpha = const \Rightarrow$ không phụ thuộc vào nhiệt độ.

Ở nhiệt độ thấp: $C_V \sim T^3 \Rightarrow \alpha \sim T^3$.