

### Теоретическое описание поведения изохорной теплопроводности в ориентационно разупорядоченных фазах молекулярных кристаллов

Карачевцева А. В., аспирант; Константинов В.А., профессор;

Ревякин В.П., доцент; Саган В.В., доцент

Физико-технический институт низких температур имени Б. И. Веркина НАН  
Украины, г. Харьков

На примере твердого тетрагидрофурана (ТНФ) –  $C_4H_8O$ , описано поведение изохорной теплопроводности в ориентационно разупорядоченной фазе с использованием двух теоретических моделей. Показано, что теплопроводность уменьшается при снижении температуры подобно, потому как она ведет себя в ориентационно упорядоченных фазах других молекулярных кристаллов [1].

Ранее для описания отклонений от закона  $1/T$  была предложена модель, где тепло переносится как низкочастотными фонами, так и высокочастотными «диффузными» модами [2]. Эта модель с подвижной границей «диффузности»  $\Theta^*$  основывается на более-менее физических представлениях и предполагает наличие четко определенного «кроссовера» между фоновой и «диффузными» модами. В то же время в рамках этой модели «диффузные» моды «включаются» довольно резко выше некоторой определенной температуры, и фоновый вклад в теплопроводность изменяется пропорционально  $T^{-3/2}$ , так как часть фоновых мод превращается в «диффузные» при уменьшении  $\Theta^*$ .

Несколько иной подход был предложен, в частности, в работе [3]. Авторы, как и в первой модели, исходили из утверждения, что теплопроводность определяется суммой вкладов фоновых и «диффузных». В то же время, проанализировав поведение теплопроводности ряда молекулярных кристаллов, можно сделать вывод, что теплопроводность с хорошей точностью также может быть описана выражением  $\kappa(T) = A/T + B$ , где член  $A/T$  описывает трехфононные процессы переброса, а  $B$  – вклад локальных «диффузных» мод. Предполагается, что этот вклад зависит от температуры при  $T \geq \Theta_D$ . Эта модель является полумперической, и не основана на строгих физических предположениях, и предполагает, что «диффузный» вклад существует на протяжении всей области температур.

Обе рассмотренные модели достаточно хорошо описывают температурную зависимость теплопроводности тетрагидрофурана, и сложно отдать предпочтение одной из них. Для окончательного выбора в пользу той или иной модели необходимо дальнейшее накопление экспериментальных фактов и дополнительный теоретический анализ.

1. D.G. Cahill, S.K. Watson and R.O. Pohl, *Phys. Rev. B* **46**, 6131 (1992).
2. V.A. Konstantinov, Heat transfer in molecular crystals, In: Aziz Belmiloudi (Eds.), *Heat Transfer - Theoretical Analysis, Experimental Investigations and Industrial Systems*, “InTech” Open Access Publisher (2011).
3. V.A. Konstantinov, A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, G.A. Vdovichenko and A.V. Zvonaryova, *Physica B* **424**, 54 (2013).