

Теплопроводность молекулярных кристаллов в ориентационно-упорядоченной фазе

Романцова О.О., кандидат физико-математических наук;
Кривчиков А.И., доктор физико-математических наук
Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина
Национальной академии наук Украины, г. Харьков

Интерес к проблеме теплопроводности молекулярных кристаллов возник давно, поскольку теплопроводность является фундаментальным свойством, определяющим пределы использования исследуемого материала. Теплопроводность диэлектрических кристаллов имеет вид колокола с ярко выраженным максимумом и может меняться по величине на несколько порядков в зависимости от температуры и качества кристалла.

В данной работе было проведено исследование высокотемпературного поведения теплопроводности молекулярных кристаллов в зависимости от его структурных характеристик, в первую очередь от Z – числа молекул в элементарной ячейке. Был проведен анализ как экспериментальных, так и литературных данных по теплопроводности ориентационно-упорядоченных молекулярных кристаллов, в частности: ряда спиртов [1], инертных газов (Ar, Kr, Xe) [2], тетрагидрофурана, цианоциклогексана, этана, антрацена, и др. Было показано, что теплопроводность данных веществ может быть описана, как сумма двух вкладов: от распространяющихся фононов и от локализованных “диффузных” мод. В общем случае вклад от локализованных “диффузных” мод обратно пропорционально зависит от числа Z молекул в элементарной ячейке и не зависит от температуры. Предложено качественное объяснение, заключающееся в том, что сильная гибридизация акустических фононов и низкочастотных оптических возбуждений фононов упорядоченного кристалла является основным фактором, который влияет на теплоперенос в молекулярном кристалле.

1. A.I. Krivchikov, A.N. Yushchenko, et al., *Phys. Rev. B* **77**, 024202 (2008).
2. V.A. Konstantinov, V.G. Manzhelii, et al., *Low Temp. Phys.* **14**, 90 (1988).