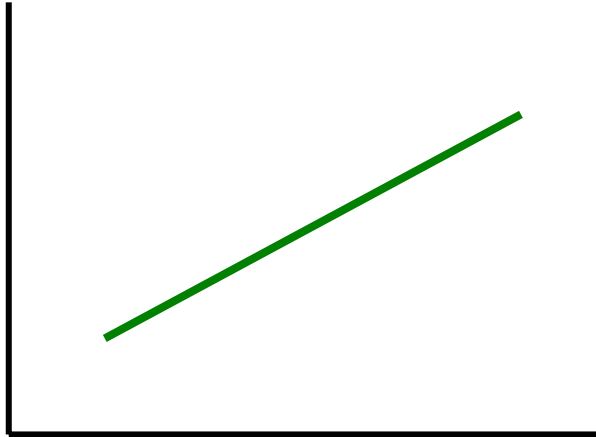


材料の熱的性質

熱量	融解熱 (ΔH_m 、 ΔS_m)
特性温度	T_m , T_c , T_g 等
粘性	η (poise : dynsec / cm ²)
比熱	C (cal/g, cal / mol)
熱伝導	κ (cal / cm sec)
熱膨張	β (1/)

熱膨張

体積・長さ



温度 (T)

体積膨張係数

$$\beta = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)$$

線膨張係数

$$\alpha = \frac{1}{L} \left(\frac{\partial L}{\partial T} \right)$$

位置エネルギー

調和振動

熱膨張

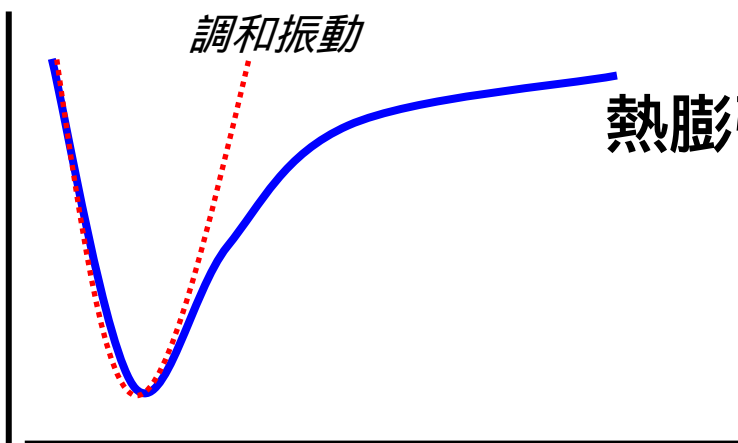
→

格子振動の非調和性

分子間力の大きさ

分子間の凝集力

分子間距離 (r)

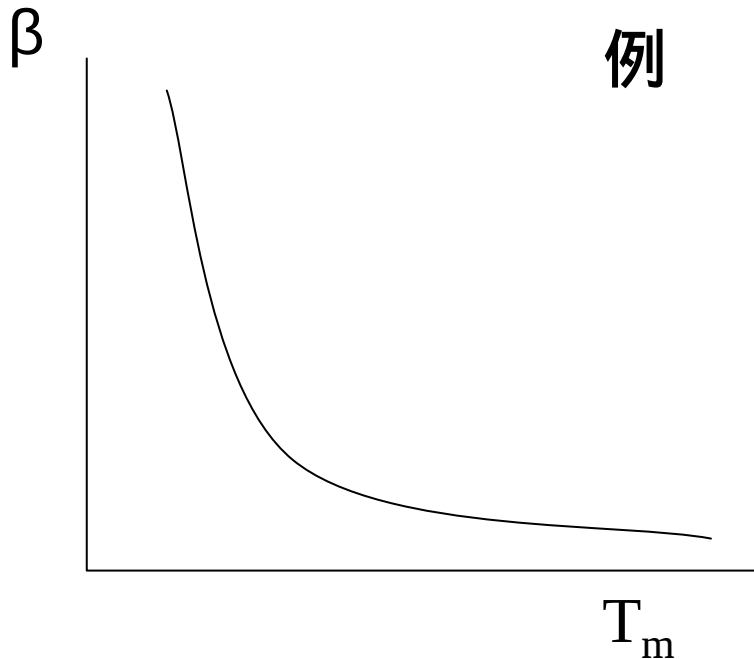


分子間力と熱膨張

分子間力 → 融解熱 (ΔH_m)

融点 ($T_m = \Delta H_m / \Delta S_m$)

T_m 上昇 → β 減少 $\beta \cdot T_m = \text{一定}$



例 アルカリハライド (KI, LiCl, KBr 等)

$$\beta \cdot T_m = 0.027$$

セラミックス (Al_2O_3 等)

アルカリ金属 (AgCl 等)

$$\beta \cdot T_m = 0.016$$

分子間力と熱膨張

分子間力 → 融解熱 (ΔH_m)

融点 ($T_m = \Delta H_m / \Delta S_m$)

T_m 上昇 → β 減少 $\beta \cdot T_m = \text{一定}$

アルカリハライド系 (KI , LiCl , KBr 等)

(格子の熱振動方向と電子雲の拡がり方向一致)

$$\beta \cdot T_m = 0.027$$

セラミックス系 (Al_2O_3 等) アルカリ金属系 (AgCl 等)

(格子の熱振動方向と電子雲の拡がり方向不一致)

$$\beta \cdot T_m = 0.016$$

ダイヤモンド系

(強固な四面体構造をとるため、熱振動は熱膨張に反映しない)

$$\beta \cdot T_m$$

比熱 C

材料を温度上昇させるのに必要な熱量

$$dq = C dT$$

$$dq = dE + PdV = d(E + PV)_p = d(H)_p$$

定容比熱: C_V $dq = \Delta E$

定圧比熱: C_P $dq = \Delta H$

$$C_V = \left(\frac{\partial q}{\partial T} \right)_V$$
$$C_P = \left(\frac{\partial q}{\partial T} \right)_P$$

固体の比熱 格子振動

固体の比熱 格子振動に関係
熱振動 格子振動 結晶内の波

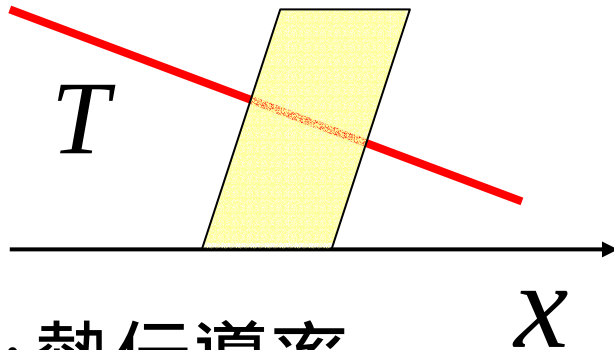
運動量+エネルギー-粒子 フォノン(phonon)

光 波+粒子 フォトン(photon)

電気抵抗 電子とフォノン(格子振動)の相互作用

熱伝導

熱伝導 → 温度差 (ΔT) → 熱流 (ΔQ)



κ : 熱伝導率

$$\frac{dT}{dt} = \kappa \frac{d^2T}{dx^2}$$

1次元の熱伝導方程式

比較 電気伝導度 : ρ

$$\kappa \propto C_v v \ell$$

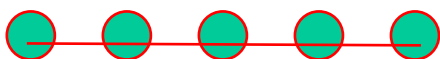
比熱 速度 平均自由行程

$$\rho \propto e v n$$

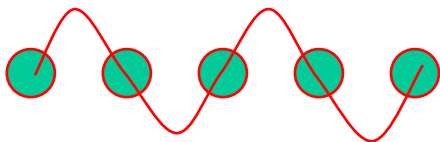
電荷 速度 数

格子振動

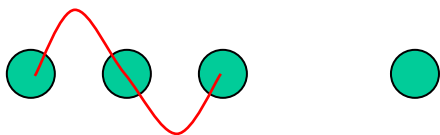
格子振動の乱れ → フォノンの散乱



格子振動無し



格子振動 → フォノンの生成



格子欠陥による格子振動の乱れ
→ フォノンの散乱

格子振動の乱れ → フォノンの平均自由行程に影響

フォノンの散乱

実際の材料 → 多くの欠陥 →
フォノンの散乱 → 熱伝導度の低下

複雑な結晶構造 → 格子振動の非調和性増大
単純な物質 → 熱伝導大

例: $\text{MgO} > \text{MgAl}_2\text{O}_4$

結晶構造を構成している原子量の差 (Δm)

例: ダイヤモンド

粒子サイズ、結晶サイズ大きい → フォノン散乱少ない

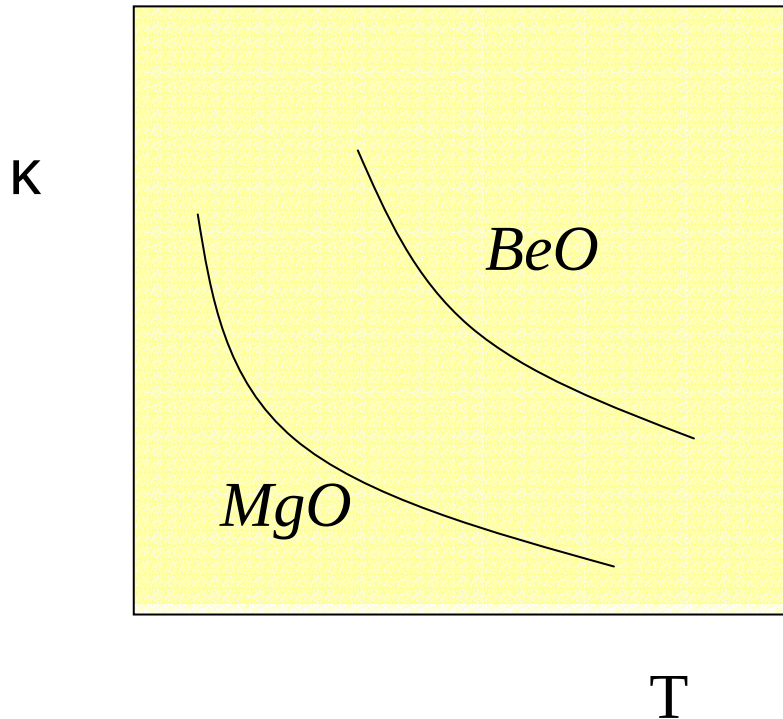
原子量の差と熱伝導度

物質	結合	κ	Δm
ダイヤモンド	C-C	1	0
グラファイト	C-C	1	0
酸化ベリリウム	BeO	1/4	7
ガリウムリン	GaP	1/20	39

Be:9, O:16, Ga70, P:31

熱伝導度に影響する因子

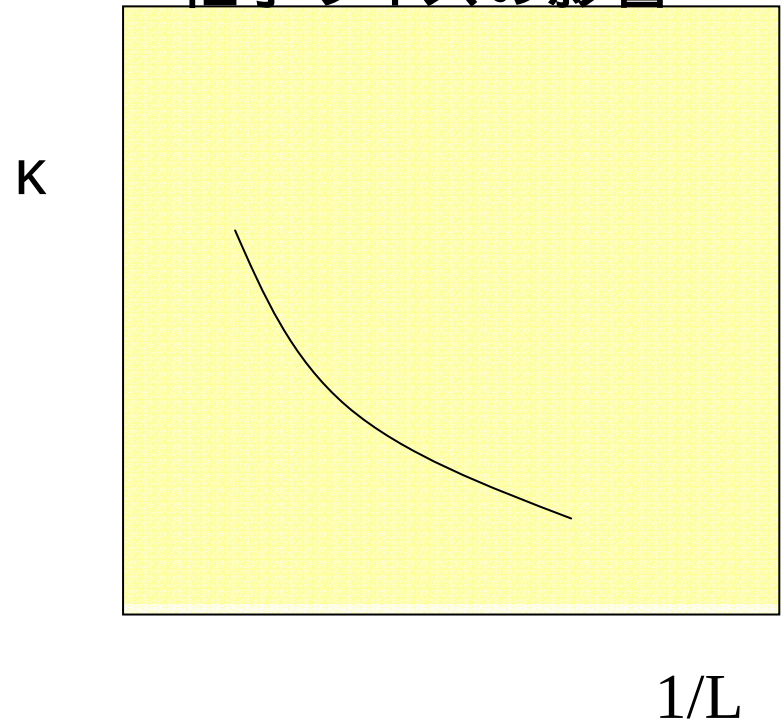
Δm の影響



Δm の影響 →

格子振動の非調和性

粒子サイズの影響



粒子サイズ →

粒子界面におけるフォノンの散乱