Physical Sciences, Life Science and Engineering Volume: 2, Number 1, 2024, *Page*: 1-9

Review Perumusan Teori Kapasitas Panas Einstein-Debye Menggunakan Integral Lintasan Feynman

Arifin Achmad[1]*, Muflihatun[2], Rizqi Fadli[3]

[1,2,3] Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jenderal Soedirman

Abstrak: Teori Einstein-Debye memberikan deskripsi mekanika kuantum tentang kalor jenis zat padat, khususnya pada suhu rendah. Model Einstein gagal untuk menjelaskan fenomena fisika pada suhu rendah, yang kemudian disempurnakan oleh model Debye. Namun, hasil eksperimen untuk material yang lebih kompleks menunjukkan diperlukan kombinasi kedua model ini pada daerah-daerah tertentu. Secara tradisional, teori ini telah dirumuskan menggunakan kuantisasi mode getaran dalam kisi kristal. Dalam artikel ini, kami menyajikan formulasi teori Einstein-Debye dengan menggunakan integral lintasan Feynman berdasarkan kajian teoritik. Formulasi ini memberikan gambaran yang lebih mendalam tentang mekanika statistik kuantum getaran kisi, yang menawarkan kerangka kerja terpadu untuk memperoleh kalor jenis zat padat. Dengan menggunakan integral lintasan, kami mengeksplorasi kontribusi berbagai mode getaran dan pengaruhnya terhadap sifat termodinamika zat padat, yang memberikan perspektif baru tentang model Einstein dan Debye dalam satu teori yang koheren.

Kata Kunci: Einstein-Debye Theory, Integral Lintasan, Padatan.

DOI: https://doi.org/10.47134/pslse.v2i1.321
*Correspondence: Arifin Achmad
Email: arifin.achmad@unsoed.ac.id

Received: 10-10-2024
Accepted: 17-11-2024
Published: 31-12-2024

Abstract: *The Einstein-Debye theory provides a quantum mechanical description of the specific heat of solids, especially at low temperatures. Einstein's model failed to explain physical phenomena at low temperatures, which was later refined by Debye's model. However, experimental results for more complex materials show that a combination of these two models is needed in certain areas. Traditionally, this theory has been formulated using the quantization of vibrational modes in a crystalline lattice. In this paper, we present a formulation of the Einstein-Debye theory utilizing the Feynman path integral approach based on theoretical studies . This formulation provides a more profound insight into the quantum statistical mechanics of lattice vibrations, offering a unified framework to derive the specific heat of solids. By employing path integrals, we explore the contributions of various vibrational modes and their influence on the thermodynamic properties of the solid, providing a new perspective on the Einstein and Debye models within a single coherent theory.*

Keywords: *Einstein-Debye Theory, Path Integrals, Solids.*

Pendahuluan

Kapasitas panas zat padat telah menjadi masalah utama dalam mekanika statistik kuantum, mulai dari pendekatan klasik (Hukum Dulong-Petit) sampai pendekatan kuantum dengan teori Einstein dan Debye (Kittel, 2005). Model berbasis mekanika kuantum (Einstein-Debye) berhasil menjelaskan kapasitas panas zat pada pada berbagai daerah suhu, dimana untuk suhu tinggi (daerah limit klasik) akan bersesuaian dengan hukum Dulong-Petit. Model Einstein mengasumsikan bahwa atom dalam zat padat sebagai osilator harmonik kuantum yang independen, sementara model Debye memperhitungkan mode getaran kolektif (fonon) dengan spektrum kontinu (Patterson & Bailey, 2007). Formulasi tradisional teori Einstein gagal menjelaskan kapasitas panas pada suhu rendah (T^3), yang mana dapat dijelaskan oleh model Debye. Namun, model Debye bukanlah model yang sempurna. Pada frekuensi fonon yang tinggi (suhu *intermediate*), model Debye gagal menjelaskan kapasitas panas zat padat (Altland & Simons, 2023). Ekstensi model Einstein-Debye diterapkan untuk menjelaskan kapasitas panas zat cair (liquid)(Baggioli & Zaccone, 2021). Selain itu, Model tersebut juga dapat diperluas untuk menjelaskan kapasitas panas material termoelekrik (Çopuroğlu & Özgül, 2024), logam murni (Doğan & Mehmetoğlu, 2019), semikonduktor biner (Joghlaf et al., 2023), material nuklir (Mehmetoglu, 2019). Dari berbagai jenis sistem yang ditinjau, mengindikasikan bahwa untuk menjelaskan fenomena pada sistem-sistem tersebut diperlukan kombinasi antara model Einstein dan model Debye (Balcerzak et al., 2010), (Joghlaf et al., 2023), (Xu et al., 2024).

Pada awalnya, formulasi mekanika kuantum berdasarkan fungsi gelombang pada persamaan Schrödinger, yang mana sangat berhasil menjelaskan fenomene-fenomena dalam dunia mikroskopis (Griffiths & Schroeter, 2018). Salah satu alternatif formulasi mekanika kuantum yaitu melalui integral lintasan Feynman. Formulasi ini menggunakan pendekatan bahwa fungsi gelombang dalam formulasi Schrödinger dinyatakan sebagai jumlah dari semua lintasan yang mungkin dapat diambil oleh suatu sistem, sehingga memberikan pemahaman yang lebih intuitif tentang proses kuantum, terutama dalam mekanika statistik (Hatfield, 2018). Oleh karena itu, pendekatan integral lintasan Feynman menyediakan kerangka kerja (*framework*) yang kuat, serta secara alami menggabungkan sifat diskrit getaran kisi (model Einstein) dan spektrum kontinu mode fonon (model Debye). Pendekatan integral lintasan Feynman menawarkan formulasi alternatif mekanika kuantum yang dapat menyatukan model-model ini, dan memberikan tinjauan yang lebih komprehensif terhadap kontribusi getaran terhadap kalor jenis.

Metode

Metode yang digunakan adalah kajian teoritik. Adapun tahapannya adalah sebagai berikut

1. Review Teori Kapasitas panas Einstein dan Debye
2. Review Integral Lintasan Feynman
3. Konstruksi Teori Kapasitas Einstein dan Debye dengan Integral lintasan Feynman
4. Mencocokan hasil konstruksi dengan hasil sebelumnya

Teori Capasitas Panas Zat Padat Einstein-Debye

Model Einstein memperlakukan setiap atom dalam benda padat sebagai osilator harmonik kuantum yang independen. Asumsi utamanya adalah setiap atom bergetar secara independen dari atom lainnya dan semua osilator memiliki frekuensi yang sama. Untuk osilator harmonik kuantum, tingkat energi diberikan oleh:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\, \omega_E \tag{1}$$

di mana $n = 0,1,2, \ldots$ adalah bilangan kuantum, $\hbar$ adalah konstanta Planck tereduksi, dan ω_E adalah frekuensi sudut osilator. Fungsi partisi Z adalah kuantitas penting dalam mekanika statistik yang mengandung informasi tentang tingkat energi suatu sistem. Untuk satu osilator, fungsi partisi adalah:

$$Z = \sum_{0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = \sum_{0}^{\infty} e^{-\beta\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega_E} \tag{2}$$

di mana $\beta = 1/k_B T$, dengan k_B adalah konstanta Boltzmann dan T adalah suhu. Deret tersebut dapat disederhanakan menggunakan rumus jumlah deret geometri:

$$Z = e^{-\frac{\beta\hbar\omega_E}{2}} \sum_{0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega_E} = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega_E}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}} \tag{3}$$

Dari kuantitas ini, kita dapat menghitung sifat termodinamika seperti energi rata-rata dan kapasitas panas. Pertama, mengambil logaritma ke fungsi partisi Z:

$$\ln Z = -\frac{\beta\hbar\omega_E}{2} - \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_E}\right) \tag{4}$$

Kemudian, energi rata-rata dapat dicari dengan mengambil turunan terhadap β:

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -\frac{\hbar\omega_E}{2} + \frac{\hbar\omega_E}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1} \tag{5}$$

Kapasitas panasnya dihitung sebagai berikut:

$$C_V = \frac{\partial\langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial\langle E \rangle}{\partial \beta}\frac{\partial \beta}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \cdot \hbar\omega_E \cdot -\frac{\hbar\omega_E e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E} - 1)^2}$$

$$C_V = k_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E} - 1)^2} \tag{6}$$

Untuk benda padat dengan jumlah atom N tiga dimensi, total kapasitas panasnya adalah:

$$C_V^{Einstein} = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1)^2} \tag{7}$$

Pada suhu tinggi (daerah klasik) suku eksponensial mendekati 1 pada pembilang, dan ekspansi hingga orde pertama pada penyebut yaitu $e^x - 1 \approx x$. Sehingga kapasitas kalor mendekati hukum Dulong-Petit $C_V \approx 3Nk_B$. Pada batas suhu rendah (daerah kuantum), suku eksponensialnya jauh lebih besar dari 1, sehingga kapasitas kalornya menjadi

$$C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_BT}\right)^2 e^{-\hbar\omega_E/k_BT} \tag{8}$$

Namun, hasil ini bertentangan dengan hasil eksperimen yang menunjukkan ketergantungan T^3.

Model Debye menyempurnakan model Einstein dengan mempertimbangkan bahwa getaran dalam benda padat terjadi dengan spektrum frekuensi, bukan frekuensi tunggal. Model ini memperlakukan benda padat sebagai media elastis kontinu dengan mode getaran yang mirip dengan gelombang suara. Dalam model Debye, mode getaran dikuantisasi menjadi fonon. Frekuensi ω fonon ini terkait dengan vektor gelombangnya $|\vec{k}|$ dengan $k\,v$ dimana v adalah kecepatan suara dalam material. Jumlah keadaan fonon dengan vektor gelombang dalam rentang $|\vec{k}|$ hingga $|\vec{k}| + d|\vec{k}|$:

$$g(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk \tag{9}$$

Dengan mengubahnya ke fungsi ω , dan meninjau mode longitudinal dan transversal, maka rapat keadaan $g(\omega)$ menjadi:

$$g(\omega) = \frac{9N}{w_D^3}\,\omega^2\ ;\ \ \omega \leq \omega_D \tag{10}$$

di mana ω_D adalah frekuensi Debye, yang ditentukan oleh persyaratan bahwa jumlah total keadaan sama dengan $3N$, yaitu jumlah total mode getaran. Fungsi partisi total Z untuk model Debye diperoleh dengan menjumlahkan semua mode (osilator) dalam zat padat. Karena model Debye meninjau distribusi frekuensi yang bersesuaian hingga frekuensi Debye ω_D, fungsi partisi dapat ditulis sebagai integral atas frekuensi-frekuensi ini. Fungsi partisi total Z adalah

$$Z_D = \prod_{\omega} Z_\omega = \prod_{\omega} \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \tag{11}$$

Dengan mengambil logaritma untuk menyederhanakan pers. (11) menjadi:

$$\ln Z_D = \sum_{\omega} \ln Z_\omega = \sum_{\omega} \ln\left(\frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}\right) \tag{12}$$

Untuk limit kontinu, penjumlahan tersebut dapat digantikan dengan integral atas rapat keadaan $g(\omega)$:

$$\ln Z_D = \int_0^{\omega_D} g(\omega) \ln\left(\frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}\right) d\omega \tag{13}$$

Substitusikan ekspresi $g(\omega)$ dan bentuk logaritmanya menjadi

$$\ln Z_D = -9N\omega_D^{-3} \int_0^{\omega_D} \omega^2 \left[\frac{\beta\hbar\omega}{2} + \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)\right] d\omega \tag{14}$$

Energi internal U dapat diturunkan dari fungsi partisi, sebagai berikut

$$U_D = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \omega^3 \left[\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\right] d\omega \tag{15}$$

Suku pertama berhubungan dengan energi vakum, yang tidak bergantung pada suhu dan dengan demikian tidak berkontribusi pada kapasitas panas spesifik, sedangkan suku kedua bergantung pada suhu dan berkontribusi terhadap kapsitas panas spesifik:

$$U_D = \frac{9N\hbar}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} d\omega \tag{16}$$

Kapasitas panas spesifik pada volume konstan C_V adalah turunan suhu dari energi internal, sebagai berikut:

$$C_V = \frac{\partial U_D}{\partial T} = \frac{9N\hbar}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \left[\frac{\hbar^2\omega^4 e^{\beta\hbar\omega}}{k_B T^2 (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2}\right] d\omega \tag{17}$$

Didefinisikan variabel tak berdimensi $x \equiv \frac{\hbar\omega}{k_B T}$, maka pers. (17) dapat ditulis menjadi:

$$C_V^{Debye} = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \tag{18}$$

di mana $\Theta_D = \hbar\, \omega_D / k_B$adalah suhu Debye. Pada suhu rendah, batas atas integral Θ_D sangat besar, dan integralnya dapat didekati sebagai:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{4\pi^5}{15} \tag{19}$$

Dengan demikian, kalor jenis C_V menjadi:

$$C_V = 9Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \frac{4\pi^5}{15} \text{ atau } C_V \propto T^3 \tag{20}$$

Ketergantungan T^3 ini merupakan karakteristik model Debye pada suhu rendah dan sesuai dengan pengamatan eksperimental untuk banyak zat padat. Pada suhu tinggi, Θ_D/T menjadi kecil, dan integral mendekati:

$$\int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2}dx \approx \frac{1}{3}\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^{-3} \tag{21}$$

Pada kondisi ini, kapasitas panas spesifik akan mendekati hukum Dulong-Petit $C_V \approx 3Nk_B$.

Perumusan Integral Lintasan Feynman untuk Teori Einstein-Debye

Model Debye merupakan pendekatan penting dalam fisika zat padat yang menggambarkan kalor jenis benda padat dimana meninjau mode getaran kolektif atom, yang dikenal dengan istilah fonon. Formulasi integral lintasan, merupakan salah satu metode pengkuantuman yang menawarkan tinjauan komprehensif untuk menganalisis sistem kuantum, termasuk faktor fluktuasi dalam statistik. Dalam artikel ini, kami merumuskan model Debye menggunakan pendekatan integral lintasan dan secara eksplisit menyertakan faktor fluktuasi.

Perumusan integral lintasan feynman merepresentasikan fungsi partisi sistem kuantum sebagai penjumlahan atas semua lintasan yang mungkin dalam ruang konfigurasi. Untuk sistem pada suhu T, fungsi partisi Z diberikan oleh:

$$Z = \int D[q(\tau)]e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[q(\tau)]} \tag{22}$$

di mana $S_E[q(\tau)]$ adalah aksi Euclidean, yang diperoleh dengan memutar variabel waktu t ke waktu imajiner $\tau = it$ (rotasi Wick). Untuk sistem fonon (kontinyu), dapat diwakili medan perpindahan $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},\tau)$, dimana aksi Euclideannya diberikan oleh:

$$S_E[q(\tau)] = \int_0^{\beta\hbar}\int_V \left[\frac{\rho}{2}\left(\frac{\partial u(r,\tau)}{\partial \tau}\right)^2 + \frac{\rho v^2}{2}\left(\nabla u(r,\tau)\right)^2\right] d^3r\, d\tau \tag{23}$$

di mana ρ, v dan V masing-masing adalah massa jenis benda padat, kecepatan bunyi dalam material, dan volume benda padat.

Hasil dan Pembahasan

Pada bagian ini, akan dilakukan konstruksi teori kapasitas panas Einstein dan Debye dengan integral lintasan Feynmann, dan ditunjukkan bahwa kedua ini dapat dirumuskan secara koheren dalam perumusan integral lintasan ini.

Bentuk aksi ini pada pers. (23) dapat disederhanakan dalam konteks integral lintasan Feynman dengan cara ekspansi medan perpindahan $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},\tau)$ menjadi komponen Fourier-nya:

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},\tau) = \sqrt{\frac{1}{V}}\sum \mathrm{b}_k\, u_k(\tau)\, e^{ik\cdot r} \tag{24}$$

Substitusi bentuk diatas ke dalam aksi Euclidean, kita memperoleh:

$$S_E[q(\tau)] = \int_0^{\beta\hbar}\sum_k \left[\frac{\rho}{2}\left|\left|\frac{\partial u_k(\tau)}{\partial \tau}\right|^2 + \frac{\rho v^2|k|^2}{2}\,|u_k(\tau)|^2\right] d^3k\, d\tau \tag{25}$$

Aksi ini menggambarkan serangkaian osilator harmonik yang dipisahkan, masing-masing sesuai dengan vektor gelombang $\boldsymbol{k}$ yang berbeda dengan frekuensi sebesar $\omega = v|\boldsymbol{k}|$ di mana v adalah kecepatan suara dalam material. Fungsi partisi untuk mode fonon tunggal $\boldsymbol{k}$ diberikan oleh integral lintasan atas komponen Fourier $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k},\tau)$

$$Z_k = \int D[u_k(\tau)]e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[u_k(\tau)]} \tag{26}$$

Dengan integral aksi standar berbentuk osilator harmonik, maka Aksi Euclidean untuk mode tunggal $\boldsymbol{k}$ menjadi

$$Z_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2}}\exp\left(-\frac{1}{2\Delta^2}\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{k})^2\right) \tag{27}$$

Dimana Δ terkait dengan frekuensi dari fonon. Bentuk integral ini dapat dituliskan sebagai:

$$Z_k = \frac{1}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega_k}{2k_BT}\right)} = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}} \tag{28}$$

Untuk kapasitas panas Einstein, maka fungsi partisi ini merupakan fungsi partisi oleh foton tunggal. Sehingga Fungsi partisi tersebut merupakan fungsi partisi untuk model Einstein dan kapsitas panasnya diperoleh dengan cara menurunkan terhadap suhu mengikuti pembahasan pada sub-bab sebelumnya:

$$C_V^{Einstein} = 3Nk_B\left(\frac{\hbar\omega_E}{k_BT}\right)^2\frac{e^{\hbar\omega_E/k_BT}}{(e^{\hbar\omega_E/k_BT}-1)^2} \tag{29}$$

Sedangkan untuk fungsi partisi model Debye, kita perlu meninjau untuk semua mode frekuensi fonon:

$$Z_D = \prod_k \frac{1}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega_k}{2k_BT}\right)} \Rightarrow \ln Z_D = -\sum_{\boldsymbol{k}}\ln\left[\sinh\left(\frac{\hbar\omega_k}{2k_BT}\right)\right]$$

Untuk frekuensi mode fonon kontinyu, maka bagain penjumlahannya diubah menjadi bentuk integral sesuai dengan pers. (10):

$$\ln Z = -\int_0^{\omega_D} g(\omega)\ln\left[\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right] d\omega \tag{30}$$

Dengan cara yang sama seperti sub-bab sebelumnya, maka kapasitas panas model Debye dapat dituliskan menjadi

$$C_V^{Debye} = 9Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2}dx \tag{31}$$

Kesimpulan

Perumusan integral lintasan untuk teori kapasitas panas model Einstein (mode getaran diskrit) dan Debye (mode getaran kontinu) dapat mengintegrasikan kedua model tersebut dalam satu kerangka (model kolektif). Formulasi ini memberikan perspektif baru serta dapat menjelaskan kapasitas panas zat pada pada berbagai bahan/material secara lebih kompreshensif.

Daftar Pustaka

Altland, A., & Simons, B. (2023). *Condensed Matter Field Theory* (3rd ed.). Cambridge University Press. https://doi.org/10.1017/9781108781244

Baggioli, M., & Zaccone, A. (2021). Explaining the specific heat of liquids based on instantaneous normal modes. *Physical Review E*, *104*(1), 014103. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.014103

Balcerzak, T., Szałowski, K., & Jaščur, M. (2010). A simple thermodynamic description of the combined Einstein and elastic models. *Journal of Physics: Condensed Matter*, *22*(42), 425401. https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/42/425401

Çopuroğlu, E., & Özgül, D. (2024). Theoretical Investigation for Interpreting Heat Capacity of Thermoelectric Materials Using Debye–Einstein Approximation. *Russian Physics Journal*, *67*(7), 1073–1081. https://doi.org/10.1007/s11182-024-03217-x

Doğan, Z., & Mehmetoğlu, T. (2019). Accurate Calculations of the Heat Capacities of Pure Metals Using the Einstein–Debye Approximation. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, *92*(6), 1620–1624. https://doi.org/10.1007/s10891-019-02082-7

Griffiths, D. J., & Schroeter, D. F. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics* (3rd ed.). Cambridge University Press. https://doi.org/10.1017/9781316995433

Hatfield, B. (2018). *Quantum field theory of point particles and strings*. CRC Press, Taylor & Francis Group. https://doi.org/10.1201/9780429493232

Joghlaf, M., Ababou, Y., & Sayouri, S. (2023). An Accurate Alternative Method to Introduce Mixed Einstein–Debye Model for Molar Heat Capacity and the Exact Analytical Integral-Free Solution to Its Resulting Integration. *International Journal of Applied and Computational Mathematics*, *9*(6), 137. https://doi.org/10.1007/s40819-023-01618-z

Kittel, C. (2005). *Introduction to solid state physics* (8th ed). Wiley.

Mehmetoglu, T. (2019). Use of Einstein-Debye method in the analytical and semi empirical analysis of isobaric heat capacity and thermal conductivity of nuclear materials.

Journal of Nuclear Materials, *527*, 151827. https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.151827

Patterson, J. D., & Bailey, B. C. (2007). *Solid State Physics: Introduction to the Theory*. Springer-Verlag Springer e-books.

Xu, C.-R., Shao, L., Ding, N., Jiang, H.-H., & Tang, B.-Y. (2024). Study of thermal properties of TiCN by Debye Einstein model, Debye Grüneisen model and quasiharmonic approximation. *Physica B: Condensed Matter*, *674*, 415589. https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415589

Muy, S. (2021). Phonon–Ion Interactions: Designing Ion Mobility Based on Lattice Dynamics. *Advanced Energy Materials*, *11*(15), ISSN 1614-6832, https://doi.org/10.1002/aenm.202002787

Douglas, J.F. (2016). Localization model description of diffusion and structural relaxation in glass-forming Cu-Zr alloys. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, *2016*(5), ISSN 1742-5468, https://doi.org/10.1088/1742-5468/2016/05/054048

Dehaoui, A. (2015). Viscosity of deeply supercooled Water and its coupling to molecular diffusion. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, *112*(39), 12020-12025, ISSN 0027-8424, https://doi.org/10.1073/pnas.1508996112

Abdulagatov, I.M. (2015). Thermal-Diffusivity and Heat-Capacity Measurements of Sandstone at High Temperatures Using Laser Flash and DSC Methods. *International Journal of Thermophysics*, *36*(4), 658-691, ISSN 0195-928X, https://doi.org/10.1007/s10765-014-1829-4

Schmuck, M. (2015). Homogenization of the Poisson-Nernst-Planck equations for ion transport in charged porous media. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, *75*(3), 1369-1401, ISSN 0036-1399, https://doi.org/10.1137/140968082

Turton, D.A. (2014). Stokes-Einstein-Debye failure in molecular orientational diffusion: Exception or rule?. *Journal of Physical Chemistry B*, *118*(17), 4600-4604, ISSN 1520-6106, https://doi.org/10.1021/jp5012457