Неделя 2. Теплоёмкость твёрдого тела, модель Дебая.

Здесь приводятся решения задач для разбора на семинаре для лекционного потока ФОПФ, 6 семестр, 2017-2018 уч.год. О замеченных опечатках, ошибках и неточностях просьба сообщать В.Н.Глазкову vglazkov@yandex.ru

Оглавление

Задача 2.21	
Задача 2.34	
Задача 2.54	
Задача 2.74	
Задача 2./4	4

Задача 2.21

Одномерная цепочка из одинаковых атомов, скорость звука в которой равна $s=2\cdot 10^5\, {\rm cm/ce}\kappa$, а постоянная решётки равна $a=0.3\, {\rm нm}$, находится при температуре 500К. Каково отношение среднего числа фононов с величиной квазиимпульса, соответствующей границе зоны Бриллюэна $p_{\rm max}=\hbar\pi/a$ к среднему числу фононов с квазиимпульсом $p_{\rm max}/2$. Каково это отношение при температуре 10K?

Комментарий:

Вопрос о «числе фононов с заданной величиной квазиимпульса» некорректен — с точно заданной величиной квазиимпульса число фононов скорее всего окажется равным нулю. Имеет смысл говорить о числе фононов (числе возбужденных мод колебаний) в некотором интервале Δk вблизи заданного квазиимпульса. Естественно, подразумевается что ширина этого интервала одинакова для обоих значений квазиимпульса.

Решение:

В одномерной однородной цепочке спектр упругих волн (т.е. фононов) $\omega = \frac{2s}{a} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$.

Ha заданных импульсах частоты фононов будут $\omega(p_{max}) = \frac{2s}{a} = \omega_{max}$ и

 $\omega(p_{max}/2) = \frac{\sqrt{2} s}{a} = \frac{\omega_{max}}{\sqrt{2}}$, энергии этих фононов соответствуют температурам 102К и 72К, соответственно.

Число состояний на интервал Δk постоянно в одномерном случае, поэтому искомое отношение чисел фононов будет просто отношением чисел заполнения (в двумерном и трёхмерном случае пришлось бы учитывать изменение объёма k-пространства, приходящегося на слой фиксированной ширины):

$$\alpha = \frac{n(p_{max})}{n(p_{max}/2)} = \frac{e^{\hbar \omega_{max}/(\sqrt{2}k_BT)} - 1}{e^{\hbar \omega_{max}/(k_BT)} - 1} = \begin{cases} 0.68 & \text{при } 500K\\ 0.050 & \text{при } 10K \end{cases}$$

(в ответах задачника ошибка — в показателе экспоненты двойка вместо корня).

<u>Комментарий:</u> Задача показывает, что при температурах много меньше характерной (в т.ч. дебаевской) коротковолновые фононы почти не возбуждены, а при температурах больше характерной, наоборот, возбуждён весь спектр.

Задача 2.34

Одномерная цепочка состоит из атомов с массами т и $M=9\mathrm{m}$. Оценить относительный вклад в теплоёмкость продольных оптических колебаний при температуре $T=\Theta/10$, где Θ - температура, соответствующая максимальной энергии реального спектра акустических колебаний.

Решение:

При большом различии масс атомов в модели цепочки с двумя сортами атомов частота оптической ветви почти константа. В данном случае её частота в центре зоны в $\sqrt{10/9} \approx 1.05$ раз больше частоты на краю зоны.

На краю первой зоны Бриллюэна частоты двух ветвей отличаются в $\sqrt{M/m}=3$ раза. Таким образом, энергия акустического фонона на границе зоны равна $k_B\Theta$, оптического на границе зоны Бриллюэна: $3k_B\Theta$, оптического в центре зоны: $\approx 3.15 k_B\Theta$.

Для оценки вклада оптической моды пренебрегаем ее дисперсией¹ и пользуемся простой моделью Эйнштейна:

тепловой энергии даст
$$E(T)-E_0=\int\limits_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{\hbar\,\omega(k)}{e^{\hbar\omega/(k_BT)}-1} \frac{L\,dk}{2\,\pi} \approx \frac{\hbar\,L}{\pi}\int\limits_0^{\pi/a}\omega\,e^{-\hbar\,\omega/(k_BT)}dk$$
 , в общем виде

вычисление слишком громоздко. Можно только заметить, что уменьшение заселенности состояний в центре зоны (энергия которых меньше) даст ещё меньшее значение теплоёмкости, чем оценка по модели Эйнштейна с частотой равной *минимальной* частоте фононной ветви. Но если бы температура была ещё на порядок меньше, то можно было бы получить приближенное выражение, пользуясь тем, что заселяются

только состояния в минимуме спектра (вблизи границы зоны): $\omega = \omega_{min} + \xi \left(k - \frac{\pi}{a}\right)^2$, где оценочно

$$\xi \sim (\omega_{\max} - \omega_{\min}) \frac{a^2}{\pi^2} . \qquad \text{Torde}$$

$$E(T) - E_0 \approx \frac{\hbar L}{\pi} e^{-\hbar \omega_{\min} l(k_B T)} \int_0^\infty \left(\omega_{\min} + \xi k^2 \right) e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\pi} e^{-\hbar \omega_{\min} l(k_B T)} \omega_{\min} \sqrt{\frac{k_B T}{\hbar \xi}} \int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\pi} e^{-\hbar \omega_{\min} l(k_B T)} \omega_{\min} \sqrt{\frac{k_B T}{\hbar \xi}} \int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\pi} e^{-\hbar \omega_{\min} l(k_B T)} \omega_{\min} \sqrt{\frac{k_B T}{\hbar \xi}} \int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k^2 l(k_B T)} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi k} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-\hbar \xi} dk \approx \frac{\hbar L}{\hbar \xi} \int_0^\infty e^{-$$

$$\begin{split} E(T) - E_0 \approx \frac{\pi L}{\pi} e^{-\hbar \omega_{\min} I(k_B T)} \int_0^{\pi} \left(\omega_{\min} + \xi k^2 \right) e^{-\hbar \xi k^2 I(k_B T)} dk \approx \frac{\pi L}{\pi} e^{-\hbar \omega_{\min} I(k_B T)} \omega_{\min} \sqrt{\frac{\kappa_B T}{\hbar \xi}} \int_0^{\pi} e^{-\kappa^2} dx = \\ = \frac{\hbar \omega_{\min} L}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{k_B T}{\hbar \xi}} e^{-\hbar \omega_{\min} I(k_B T)} \end{split}$$

напомним что в модели Эйнштейна было бы $E(T)-E_0 \approx N \hbar \omega_{min} e^{-\hbar \omega_{min} I(k_B T)} = \frac{L}{a} \hbar \omega_{min} e^{-\hbar \omega_{min} I(k_B T)}$

То есть, в низкотемпературном пределе эффективно число состояний сократится («цепочка эффективно

уменьшится») в
$$\sim \sqrt{\frac{k_B T}{\hbar (\omega_{max} - \omega_{min})}}$$
 раз.

¹ Вообще говоря, при $T = \Theta/10$ заселенность разных состояний в оптической моде уже будет отличаться: температура уже чуть меньше размаха дисперсии оптической моды ($\approx 0.15 k_B \Theta$). Строгое вычисление

$$E = \frac{N \hbar \Omega_{onm}}{e^{\hbar \Omega_{onm}/(k_B T)} - 1} \approx N k_B 3 \Theta e^{-3\Theta/T}$$

$$C \approx 3 N k_B \Theta e^{-3\Theta/T} \frac{3\Theta}{T^2} = N k_B \frac{(3\Theta)^2}{T^2} e^{-3\Theta/T}$$

где N — число элементарных ячеек (так как в двухатомной цепочке всего одна оптическая мода, то полное число оптических мод совпадает с числом элементарных ячеек). Так как по условию температура $T = \Theta/10$, то единицей в бозевской функции распределения можно пренебречь (характерная энергия фононов оптической моды оказывается в 30 раз больше температуры).

При температуре условия $C_{onm} = 900 e^{-30} N k_B$.

Так как цепочка одномерная, то непосредственно применять полученный на лекциях и в учебниках закон T^3 Дебая здесь нельзя и необходимо вычислить теплоёмкость «с начала». При температуре $T = \Theta/10$ можно использовать низкотемпературное приближение и не ограничивать k-пространство при интегрировании дебаевским волновым вектором — верхний предел интегрирования не важен, так как заселены только низкоэнергетические фононные состояния с малыми волновыми векторами 2 $k \ll k_D$.

$$E \approx 2 \int_{0}^{\infty} \frac{\hbar sk}{e^{\hbar sk/(k_{B}T)} - 1} \frac{L dk}{2\pi} = \frac{N a}{\pi} \frac{(k_{B}T)^{2}}{\hbar s} \int_{0}^{\infty} \frac{x dx}{e^{x} - 1} = \frac{\pi}{6} Na \frac{(k_{B}T)^{2}}{\hbar s}$$

$$C_{a\kappa} = \frac{\pi}{3} \frac{Na k_{B}^{2} T}{\hbar s}$$

Множитель 2 учитывает отрицательные значения k .

Для скорости звука в двухатомной цепочке есть точный ответ (решение задачника предполагает использование аналогии с температурой Дебая, завышающее скорость звука примерно в $4/\pi$ раз):

$$s = a\sqrt{\frac{C}{2(M+m)}} = \frac{a}{2}\omega_{a\kappa.max}\sqrt{\frac{M}{M+m}} = \frac{ak_B}{2\hbar}\Theta\sqrt{\frac{9}{10}}$$

Пренебрегая отличием корня от 1 (погрешность 5%), получим

 $C_{a\kappa} \approx N \, k_B \frac{2\pi}{3} \frac{T}{\Theta} = \frac{2\pi}{30} \, N \, k_B$ (результат на 30% больше, чем при решении с температурой Дебая в задачнике)

Для искомого отношения вкладов в теплоёмкость $\frac{C_{\mathit{onm}}}{C_{\mathit{ak}}}\!\!pprox\!4300\,e^{-30}\!pprox\!4\cdot10^{-10}$.

<u>Комментарий:</u> при росте температуры относительный вклад оптических колебаний в полную теплоёмкость будет расти и при высоких температурах, когда полная теплоёмкость цепочки будет подчинятся закону Дюлонга и Пти $C = 2 N k_B = N_{am} k_B$ (для одномерного случая) половина теплоёмкости связана с акустическими колебаниями, а половина — с оптическими. При этом экспериментальное измерение теплоёмкости это всегда измерение интегральной характеристики — суммы всех вкладов.

² Вклад «лишних» нефизических состояний, возникающих при распространении пределов интегрирования, компенсируется очень быстрым ростом экспоненты в знаменателе функции распределения.

Задача 2.54

Капиллярные волны на поверхности (закон дисперсии $\omega^2 = \sigma \, K^3/\rho$) могут вносить при низких температурах значительный вклад в теплоёмкость жидкого гелия. Какова температурная зависимость поверхностной теплоёмкости (на единицу площади) при $T \approx 0$

 $\underline{Kommenmapuŭ}\ 1:$ задача показывает, что по заданному спектру квазичастиц низкотемпературная теплоёмкость (и другие термодинамические характеристики) ищется стандартным образом.

Комментарий 2: Жидкий гелий, упоминаемый в условии задачи является очень необычной квантовой жидкостью. Температура его кипения при атмосферном давлении 4.2K, а ниже примерно 2.2K жидкий гелий переходит в сверхтекучее состояние. Об этом будет рассказываться подробнее в соответствующем разделе курса, отметим здесь только несколько существенных для обсуждения этой задачи: гелий остаётся жидким вплоть до T=0 (для кристаллизации нужно приложить давление около 30 атмосфер), в сверхтекучей фазе при температурах ниже 1K основным коллективным возбуждением в гелии являются звуковые волны (фононы), поэтому теплоёмкость жидкого гелия при низких температурах подчиняется закону Дебая T^3 .

Решение:

Волны двумерные, изотропные, поляризация единственная. Как и все колебания, при переходе на язык квазичастиц (риплонов, в данном случае) поверхностные ваолны подчиняются статистике Бозе (поскольку для линейных волн справедлив принцип суперпозиции, то статистика соответствующих квазичастиц может быть только бозевской — амплитуда волны с заданным волновым вектором может быть произвольна, что соответствует произвольному числу квазичастиц в этом состоянии).

При низких температурах будут заселены только длинноволновые моды, поэтому можно будет при интегрировании по энергии обратить верхний предел в бесконечность.

$$E = \frac{S}{(2\pi)^2} \int \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega/T} - 1} d^2 k = \frac{S \hbar}{4\pi} \int \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega/T} - 1} dk^2 = \frac{S \hbar}{4\pi} \left(\frac{\rho}{\sigma}\right)^{2/3} \int_0^\infty \frac{\omega d \omega^{4/3}}{e^{\hbar \omega/T} - 1} = \frac{S \hbar}{3\pi} \left(\frac{\rho}{\hbar^2 \sigma}\right)^{2/3} T^{7/3} \int_0^\infty \frac{x^{4/3}}{e^x - 1} dx$$

Интеграл сходящийся и после перехода к безразмерной переменной x является просто числом.³

Для температурной зависимости теплоёмкости имеем

$$C_{riplon} \propto T^{4/3}$$

<u>Комментарий 3:</u> Степень зависимости теплоёмкости от температуры меньше куба, характерного для низкотемпературной объёмной фононной теплоёмкости (в жидком гелии

при низких температурах фононы являются элементарным возбуждением, поэтому для теплоёмкости также получится закон Дебая T^3). Поэтому при достаточно низких температурах при наличии в экспериментальной ячейке свободной поверхности гелия риплонный может окажется большим. Это показывает, что при интерпретации экспериментальных данных по теплоёмкости всегда требует аккуратности, а само измерение — аккуратной постановки эксперимента.

Задача 2.74

Найти в дебаевском приближении среднеквадратичную амплитуду нулевых колебаний атома в кристалле с плотностью $\rho = 19.2 \ c/cm^3 \ c$ дебаевской температурой $\Theta = 383 \ K$ и усреднённой скоростью звука $s = 3.13 \cdot 10^5 \ cm/cek$

Комментарий к формулировке задачи (А.О.Раевский, В.Н.Глазков): Терминологически некорректно говорить об «амплитуде» колебаний квантового осциллятора⁴. Правильнее использовать термин «средний квадрат смещения». Однако термин «амплитуда нулевых колебаний» достаточно часто используется при описании свойств низкоразмерных систем. При этом эта амплитуда по определению вводится, как амплитуда колебаний классического осциллятора той же жёсткости, при которой в колебаниях запасена та же энергия. Это определение удобно своей простотой и, заранее очевидно, будет отличаться от более корректного «среднего квадрата смещения» численным множителем порядка единицы. Таким образом, такая наглядная оценка даёт возможность «прощупать» масштаб длин. А в тех случаях, когда эта величина оказывается расходящейся, небольшой численный множитель и не существенен.

<u>Комментарий к решению в задачнике (опечатки)</u>: В решении в задачнике опечатки — отсутствует корень в формуле с ответом, в формуле для A_K^2 вместо множителя 2 возник квадрат постоянной Планка и эта же двойка теряется в следующей формуле.

Решение:

Вычислим энергию, запасённую в колебаниях, непосредственно (в гармоническом приближении):

$$E = \sum_n \left(\frac{1}{2} \sum_{\vec{\delta}} \frac{C_{\vec{\delta}} (\vec{u}(\vec{r}_n) - \vec{u}(\vec{r}_n + \vec{\delta}))^2}{2} + \frac{M \ V_n^2}{2} \right)$$
, где $\vec{u}_n = \vec{u}(\vec{r}_n)$ - смещение атома в n-ой позиции. Здесь суммирование по $\vec{\delta}$ это суммирование по соседям, взаимодействие с которыми существенно, множитель $\frac{1}{2}$ перед суммой по $\vec{\delta}$ связан с тем, что каждая связь будет посчитана при суммировании дважды.

Для вычисления удобно воспользоваться тем, что в силу сохранения энергии мгновенное значение полной энергии, запасённой в колебаниях, равно среднему: $E = \langle E \rangle$, а средние кинетические и потенциальные энергии при гармонических колебаниях равны. Поэтому $E = \langle E \rangle = M \sum_n \langle V_n^2 \rangle = N \, M \, \langle \langle V_n^2 \rangle \rangle$, где N— число атомов, двойное усреднение $\langle \langle \ldots \rangle \rangle$ обозначает усреднение по времени и по положению атома.

Для дальнейших вычислений удобно сразу договориться о выборе граничных условий, чтобы пересчитать моды колебаний, и о представлении отклонений атомов от равновесия.

⁴ В издании задачника 2009 года в формулировке стоит «среднеквадратичная амплитуда»

Потребуем закреплённые граничные условия и поместим ноль отсчёта на границу образца. Тогда все моды колебаний имеют вид синусоидальных стоячих волн $u_n = A \sin(k_x x_n) \sin(k_y y_n) \sin(k_z z_n) \sin(\omega t)$, где A — это амплитуда соответствующей волны. Далее мы считаем, что колебания каждой моды имеют вполне определённую поляризацию, поэтому смещения атомов и амплитуды колебаний можно считать скалярами. Вклады различных поляризаций будут просуммированы позднее.

Скорости атомов $V_n = A \omega \sin(k_x x_n) \sin(k_y y_n) \sin(k_z z_n) \cos(\omega t)$. На второй границе образца (для простоты кубического) $k_{x,y,z} L = \pi n$, на одно состояние в k-пространстве приходится объём $\frac{\pi^3}{V}$, все $k_{x,y,z} > 0$ (объём в k-пространстве на одно состояние отличается от привычного $\frac{(2\pi)^3}{V}$ так как вместо периодических взяты закреплённые граничные условия — но в те же 8 раз из-за условия $k_{x,y,z} > 0$ отличается и доступная область k-пространства).

В каждой моде колебаний будет запасена энергия нулевых колебаний $E_0 = \frac{n \omega_k}{2}$. Прямолинейное вычисление этой же энергии через усреднение квадрата скорости по времени и по положению атома $E = \frac{A^2 \omega^2 N M}{16}$ (усреднённый квадрат каждой из

$$A\sin(\omega t)\sin(k x_{n+1}) - A\sin(\omega t)\sin(k x_n) = 2 A\sin(\omega t)\sin\left(k \frac{x_{n+1} - x_n}{2}\right)\cos\left(k \frac{x_{n+1} + x_n}{2}\right) \approx (k a) A\sin(\omega t)\cos\left(k \frac{x_{n+1} + x_n}{2}\right)$$

Таким образом, для энергии нулевых колебаний $E = \frac{NM}{4} = \frac{NC(ka)^2 A^2}{4}$. Отметим также, что

возникновение множителя $(ka)^2$ находится в соответствии с известными результатами: $\omega = s \, k$ и $s = a \, \sqrt{\frac{C}{M}}$. Так что оба конечных выражения для энергии тождественны, но через кинетическую энергию ответ получается быстрее.

⁵ Обычно, выбор граничных условий — это наш произвол: ответ для объёмных свойств большого образца от граничных условий на поверхности не зависит. Обычно в физике твердого тела выбирают периодические граничные условия. Использование здесь закреплённых граничных условий иллюстрирует возможность их применения и на взгляд автора делает картину чуть более наглядной. Однако с учётом связанной задачи 2.75 в домашней части задания надо отметить, что в случае больших амплитуд колебаний (расходимости в одномерном случае) именно закрепленные граничные условия лучше соответствуют условиям мысленного эксперимента по удержанию термодинамически неустойчивого кристалла в ячейке конечного размера. От выбора граничных условий в частности зависит минимально возможный волновой вектор, определяющий нижний предел расходящегося в макроскопическом пределе интеграла.

⁶ Здесь можно отметить, что вычисление средней кинетической энергии оказывается проще: это просто сумма квадратов скоростей атомов, а вот при вычислении энергии деформации для длинноволновых колебаний (которые, как показывает ответ, наиболее важны в этой задаче) появится градиент смещения. В одномерном случае:

⁷ Уточним, что в стоячей волне могут быть атомы в узлах волны, которые совсем не колеблются, могут быть атомы в пучностях волны, которые имеют максимальную амплитуду колебаний. Под усреднением по положению имеется в виду, что так как мы должны просуммировать по всем позициям для нахождения полной энергии, то в силу большого количества атомов это можно заменить средним значением величины, умноженным на число узлов.

гармонических функций даёт множитель $\frac{1}{2}$).

Приравниваем энергии, чтобы найти амплитуду нулевых колебаний A_{0k} для моды колебаний заданной поляризации с волновым вектором k

$$\frac{NM\omega_k^2 A_{0k}^2}{16} = \frac{\hbar\omega_k}{2}$$
$$A_{0k}^2 = \frac{8\hbar}{NM\omega}$$

Далее надо просуммировать по всем колебаниям данной поляризации и по поляризациям. Внутри одной поляризации мы разлагаем колебания по стоячим волнам $u_0(\vec{r}\,,t) = \sum_k A_{0\mathbf{k}} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \sin(\omega_k t) \quad \text{и ищем среднее значение квадрата отклонения атома от равновесия:}$

$$\langle\langle u_0^2\rangle\rangle = \langle\langle \left(\sum_k A_{0k}\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z)\sin(\omega_k t)\right)^2\rangle\rangle = \frac{1}{2^4}\sum_k A_{0k}^2 = \frac{1}{16}\sum_k A_{0k}^2.$$

При раскрытии квадрата после усреднения останутся только произведения слагаемых с одинаковыми волновыми векторами и с квадратами синуса и косинуса — иначе остаются осцилляции, которые при усреднении по узлам или по времени занулят ответ. При учёте поляризаций возникнет множитель 3: так как вектора смещений в модах разных поляризаций ортогональны вклады поляризаций суммируются независимо.

Итого, переходя от суммирования по интегрированию, получаем пока общий ответ:

$$\langle\langle u_0^2\rangle\rangle = 3\frac{V}{\pi^3} \int_{k_{x,y,z}>0} \frac{\hbar}{2NM\omega(k)} d^3k = \frac{3\hbar}{2\rho\pi^3} \int_{k_{x,y,z}>0} \frac{1}{\omega(k)} d^3k .$$

Для вычисления в общем виде необходимо знать спектр и интегрировать по всей зоне Бриллюэна. Мы пользуемся дебаевским приближением — считаем спектр изотропным и ограничиваем интегрирование дебаевским волновым вектором

$$\langle\langle u_0^2 \rangle\rangle = \frac{3\hbar}{2\rho\pi^3} \times \frac{1}{8} \int_0^{k_D} \frac{4\pi k^2}{sk} dk = \frac{3\hbar}{8\rho s\pi^2} k_D^2 = \frac{3}{8} \frac{(k_B \Theta)^2}{\pi^2 s^3 \hbar \rho} \approx 1.71 \cdot 10^{-19} cm^2 \approx (0.041 \text{ Å})^2$$

множитель $\frac{1}{8}$ связан с интегрированием по положительному октанту, также использовано равенство $\hbar \, s \, k_D = k_B \, \Theta$. Эти рассуждения могут быть повторены для двумерного и одномерного случая. Отметим дополнительно расходимость интеграла $\int \frac{dk}{\omega(k)}$ в одномерном случае.

Данные задачи относятся к вольфраму, амплитуда нулевых колебаний составляет около 2% межатомного расстояния.

<u>Комментарии к результату (С.Гуденко, А.О.Раевский, В.Н.Глазков):</u> Температура Дебая также зависит от скорости звука и плотности, поэтому ответ может быть несколько переформулирован. Необходимо, однако, иметь в виду, что в выражение для температуры Дебая $\Theta = \frac{\hbar \, s}{k_{\scriptscriptstyle R}} \big(6 \, \pi^2 \, n \big)^{1/3}$ входит не концентрация атомов, а количество примитивных

элементарных ячеек в единице объёма. Для простого случая кристаллической структуры с одним атомом в базисе (случай вольфрама) эта величина совпадает с концентрацией атомов и

тогда получаем $\langle\langle u_0^2\rangle\rangle = \frac{3}{8} \left(\frac{6}{\pi}\right)^{2/3} \frac{\hbar}{m \, s \sqrt[3]{n}}$. В общем случае с $N_{am/gq}$ атомов на

примитивную ячейку ответ умножится на $N_{am/sq}^{-2/3}$. Таким образом, чем меньше масса атома, чем меньше скорость звука, чем меньше концентрация атомов — тем больше амплитуда нулевых колебаний атома в кристалле. Для случая гелия эта амплитуда оказывается сравнима с межатомным расстоянием. Из-за этого для кристаллизации гелия необходимо приложить достаточно большое давление (на фазовой диаграмме гелия нет тройной точки и он остаётся жидким вплоть до $T\!=\!0$ при давлениях меньших примерно 30 атмосфер).

Для оценки вычислим для случая гелия безразмерное отношение (называемое параметром Линдемана): $\delta = \sqrt{\frac{\langle\langle u_0^2\rangle\rangle}{a^2}} \simeq \sqrt{0.5\frac{\hbar}{m\,s\,a}}$. Скорость звука в твёрдом гелии сильно зависит от давления, вблизи критического давления 30 атмосфер она составляет 400 м/с, межатомное расстояние в кристалле гелия составляет 2-3 Å. Отсюда $\delta \simeq 0.3$.

Можно дополнительно вспомнить модельный результат для скорости звука $s=a\sqrt{\frac{C}{m}}$ и тогда $\langle u_0^2\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{C\,m}}$. Этот результат также подчёркивает почему именно кристаллы гелия оказываются особенными — в них не только мала масса атомов, но и малы силовые постоянные из-за слабого взаимодействия атомов инертного газа между собой.