<u>הרצאה מס' 3</u>

עד כה עסקנו בתאור המבנה המסודר של הסריג המתמטי. בגבישים הפיזיקליים האטומים או היונים מתנודדים תמיד כתוצאה מפלוקטואציות תרמיות או קוונטיות (zero point motion) ב $T=0$, סביב נקודת שווי המשקל שלהם המגדירות את הסריג. נפנה כעת לתאר תנועות אלה.

נסמן ב $\vec{u}_i$ את המיקום של האטום ה i ביחס למצב שווי המשקל שלו המתואר ע"י וקטור הסריג $\vec{R}_i$ $\Leftarrow$ $\vec{r}_i = \vec{R}_i + \vec{u}_i$

ההמילטוניאן המתאר את הגביש הינו:

$$H = \sum_i \frac{1}{2M} \vec{P}_i^{\,2} + \frac{1}{2} \sum_{ij} V\left(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j\right)$$

כאשר $\vec{P}_i$ הינו התנע הצמוד ל $\vec{u}_i$ (לא $\vec{r}_i$ מכיון ש $\vec{R}_i$ קבוע - אינו דרגת חופש דינמית) ו V הינו פוטנציאל האינטראקציה בין האטום ה i וה j כשאנו מניחים כי הוא מתואר ע"י $V(\vec{r}_i-\vec{r}_j)$. מקורו של פוטנציאל זה בגלל אלקטרוני הגביש. לעתים הוא צפוי להיות הפוטנציאל האלקטרוסטטי בגבישים יוניים או פוטנציאל ונדרוולס בגבישים מולקולריים.

נניח כעת כי ההעתקים $\vec{u}_i$ של האטומים מנקודות שווי המשקל שלהם קטנים ונפתח:

$$V\left(\vec{R}_i-\vec{R}_j+\vec{u}_i-\vec{u}_j\right) = V\left(\vec{R}_i-\vec{R}_j\right) + \left(\vec{u}_i-\vec{u}_j\right)\cdot\vec{\nabla} V\left(\vec{R}_i-\vec{R}_j\right) + \frac{1}{2}\left[\left(\vec{u}_i-\vec{u}_j\right)\cdot\vec{\nabla}\right]^2 V\left(\vec{R}_i-\vec{R}_j\right) +$$

כשנציב ביטוי זה לתוך ההמילטוניאן האבר הראשון יתאר לנו את האנרגיה הפוטנציאלית של הגביש כשהאטומים מסודרים בנקודות שווי המשקל. זהו קבוע שאינו תלוי ב $\vec{u}_i$ ולכן נזניח ממנו בהמשך. האבר השני מקיים

$$\frac{1}{2}\left[\sum_i \vec{u}_i \cdot \sum_j \vec{\nabla} V(\vec{R}_i-\vec{R}_j) - \sum_j \vec{u}_j \sum_i \vec{\nabla} V(\vec{R}_i-\vec{R}_j)\right] \underset{i\leftrightarrow j}{=} \sum_i \vec{u}_i \sum_j \vec{\nabla} V(\vec{R}_i-\vec{R}_j)$$

אבל $\sum_j \vec{\nabla} V(\vec{R}_i-\vec{R}_j)$ הינו מינוס הכח הפועל על האטום ה i כתוצאה משאר האטומים כאשר הם ממוקמים במצב שווי המשקל, ולכן מצב זה מוגדר כמצב בו הכח הזה מתאפס.

קיבלנו לכן כי התיקון הראשון לאנרגיה הפוטנציאלית ביחס למצב שווי המשקל נתון על ידי הגורם הריבועי.
<u>בקירוב ההרמוני</u> רק אותו צריך לקחת בחשבון ללא תיקון מסדר גבוה יותר ב $\vec{U}$.

$$H=\frac{1}{2M}\sum_i \vec{P}_i^{\,2}+\frac{1}{4}\sum_{\substack{ij\\ \mu,\nu=x,y,z}}(U_i^\mu-U_j^\mu)\left.\frac{\partial^2 V(\vec{r})}{\partial r^\mu\partial r^\nu}\right|_{\vec{r}=\vec{R}_i-\vec{R}_j}(U_i^\nu-U_j^\nu)$$

נדון בהתנודדות הבאה חד מימדית של שרשרת בת N אטומים המרוחקים זה מזה מרחק a. כלומר $R_j=ja$

נניח: א. תנאי שפה מחזוריים (נסגור את השרשרת לטבעת) כך ש $U_i=U_{i+N}$

בהנחה זו מפשטת בדרך כלל את החישובים ואינה משנה בגבול התרמודינמי $N\to\infty$.

ב. נניח כי רק שכנים קרובים בשרשרת מצומדים אינטראקציה.

ההמילטוניאן עבור הנחה זו היא

$$H=\frac{1}{2M}\sum_i P_i^2+\frac{B}{2}\sum_i(U_i-U_{i+1})^2 \qquad B=\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2}\right|_{x=a}$$

נבצע כעת טרנספורמציה (קנונית) למשתנים כדלה (Fourier):

$$U_j=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k U_k e^{ikja}$$

$$P_j=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k P_k e^{ikja}$$

מכאן תנאי השפה המחזוריים מגבילים הערכים האפשריים של k להיות מהצורה $k=\frac{2\pi}{Na}n$

מעבר לכך נשים לב כי $e^{ikja}=e^{i(k+\frac{2\pi}{a}l)ja}$ ולכן בכתיבת הפורייה

עלינו לסכום על ערכי k הנ"ל רק עבור $n=1,\dots,N$ $(U_k\equiv U_{k+\frac{2\pi}{a}l})$.

בגלל האינווריאנטיות תחת הזזה של k ב $\frac{2\pi}{a}l$ אנו יכולים גם לבחור את n בתחום $\frac{(N-1)}{2},\dots,-\frac{(N-1)}{2}$ כך ש k (הנחה N אי זוגי) נמצא בתחום $\left[-\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right]$

שהוא ה BZ. ה-1 לשריג הישר החד מימדי שלנו עם מרחק הבעה.

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k U_k e^{ikja}=U_j=U_j^*=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k U_k^* e^{-ikja}$$

שימו לב שמכיוון ש $U_j=U_j^*$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{-k} U_{-k}^* e^{ikja}$$

$\Leftarrow$ (כנ"ל גם עבור P_k):

$$U_k^*=U_{-k}\quad,\quad P_k^*=P_{-k}$$

נשארנו עם אותו מספר דרגות חופש: N u_j ממשיים $\Leftarrow$ $\frac{N}{2}$ u_k מרוכבים.

נוכל גם להפוך את הטרנספורמציה ולקבל את u_k במונחי u_j. לצורך כך נחשב את הסכום הבא:

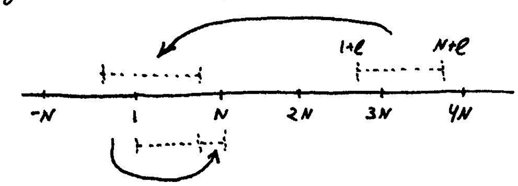
$$\sum_{j=1}^{N} e^{ikja} = \sum_{j=1}^{N} e^{i\frac{2\pi}{Na}n\cdot ja} = \sum_{j=1}^{N} e^{i\frac{2\pi}{N}n\cdot j}$$

נזיז הסכום

$$\sum_{j=1}^{N} e^{ik(ja+\ell a)} = \sum_{j=1}^{N} e^{i\frac{2\pi}{N}n(j+\ell)} = \sum_{j=\ell+1}^{N+\ell} e^{i\frac{2\pi}{N}n\cdot j}$$

נשתמש כעת בתנאי שהגדרנו j. הזזה של N אינה משנה את ערכי הסכום לכן

$$= \sum_{j=1}^{N} e^{ikja}$$



$$\left(1-e^{ik\ell a}\right)\sum_{j=1}^{N} e^{ikja} = 0 \qquad \Leftarrow$$

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^{N} e^{ikja} = \begin{cases} N & k=\frac{2\pi}{a}\cdot n \Leftrightarrow k \in \text{סריג הפוך} \\ 0 & \text{אחרת} \end{cases}$$

לצורך הפיכת הטרנספורמציה נחשב:

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} u_j e^{-ikja} = \frac{1}{N}\sum_{k'} u_{k'} \sum_{j=1}^{N} e^{i(k'-k)ja} = \frac{1}{N}\sum_{k'} u_{k'} N\delta_{k'-k,0} = u_k$$

מכיוון ש $k,k'\in 1^{st}BZ$ וקטור השריג ההפוך היחיד שניתן לקבל מהפרשם הוא וקטור האפס.

נוכל גם להראות בנוסף שהטרנספורמציה היא קנונית - שומרת על סוגרי פואסון או יחסי החילוף:

$$[u_k, P_{k'}] = \frac{1}{N}\sum_{jj'} e^{-ikja} e^{-ik'j'a}[u_j, P_{j'}]$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{jj'} e^{-ikja} e^{-ik'j'a}\, i\hbar\,\delta_{jj'}$$

$$= \frac{i\hbar}{N}\sum_{j} e^{i(k'+k)ja} = i\hbar\,\delta_{-k,k'}$$

נרשום כעת את H במונחי המשתנים החדשים

$$\sum_j P_j^2 = \frac{1}{N}\sum_j\sum_k\sum_{k'} P_k P_{k'} e^{ikja} e^{ik'ja} = \frac{1}{N}\sum_k\sum_{k'} P_k P_{k'} N \delta_{k+k',0} = \sum_k P_k P_{-k}$$

$$\sum_j (U_j - U_{j+1})^2 = \frac{1}{N}\sum_j\sum_k\sum_{k'} U_k\left[e^{ikja} - e^{ik(j+1)a}\right] U_{k'}\left[e^{ik'ja} - e^{ik'(j+1)a}\right]$$

$$= \frac{1}{N}\sum_k\sum_{k'} U_k U_{k'} \sum_j e^{i(k+k')ja}\left[1 - e^{ik'a} - e^{ika} + e^{i(k+k')a}\right]$$

$$= \sum_k U_k U_{-k}\left(2 - e^{ika} - e^{-ika}\right)$$

$$= \sum_k U_k U_{-k}\, 2(1-\cos ka)$$

$$= \sum_k 4\sin^2\frac{ka}{2}\, U_k U_{-k}$$

$$H = \sum_{k=-\frac{(N-1)}{N}\frac{\pi}{a} \text{ in steps of } \frac{2\pi}{Na}}^{\frac{(N-1)}{N}\frac{\pi}{a}} \frac{1}{2M} P_k P_{-k} + 2B\sin^2\frac{ka}{2}\, U_k U_{-k} \qquad \Leftarrow$$

נתבונן במשוואות התנועה הקלאסיות ל U_k ! P_{-k}

$$\dot{U}_k = \frac{\partial H}{\partial P_k} = \frac{1}{M} P_{-k}$$

(שים לב כל איבר ב H מופיע פעמיים:
פעם עבור $k>0$ ופעם עבור $k<0$)

$$\dot{P}_{-k} = -\frac{\partial H}{\partial U_{-k}} = 4B\sin^2\frac{ka}{2}\, U_k$$

$$\ddot{U}_k = -4\frac{B}{M}\sin^2\frac{ka}{2}\, U_k \qquad \Leftarrow$$

$$U_k = e^{-i\omega_k t}$$

עם תדירות

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{B}{M}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$

כאשר

$$H = \sum_k \frac{1}{2M} P_k P_{-k} + \frac{M\omega_k^2}{2} U_k U_{-k}$$ ההמילטוניאן הנתון לבעיה גם בצורה

מתאר אוסף של אוסצילטורים הרמוניים המאופיינים על ידי וקטור הגל k ותדירות ω_k.
הפתרון הקוונטי יהיה לכן הכללה ישירה של פתרון האוסצילטור ההרמוני.
נגדיר:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{M\omega_k}\, U_k + \frac{i}{\sqrt{M\omega_k}} P_k\right]$$

$$a_k^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{M\omega_k}\, U_{-k} - \frac{i}{\sqrt{M\omega_k}} P_{-k}\right]$$

כזכור $P_k^+ = P_{-k}$, $U_k^+ = U_{-k}$:

$$U_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{1}{\sqrt{M\omega_k}} \left(a_k + a_{-k}^+\right)$$

$$P_k = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\sqrt{M\omega_k} \left(a_k - a_{-k}^+\right)$$

נשים לב ש:

$$[a_k, a_{k'}] = \frac{i}{2\hbar}\left\{[U_k, P_{k'}] + [P_k, U_{k'}]\right\} = \frac{i}{2\hbar}\left(i\hbar\, \delta_{k,-k'} - i\hbar\, \delta_{k,-k'}\right) = 0$$

$$[a_k, a_{k'}^+] = \frac{-i}{2\hbar}\left\{[U_k, P_{-k'}] - [P_k, U_{-k'}]\right\} = \frac{-i}{2\hbar}\left(i\hbar\, \delta_{kk'} + i\hbar\, \delta_{kk'}\right) = \delta_{kk'}$$

$$H = \sum_k \frac{1}{2M}\frac{\hbar}{2} M\omega_k \left(a_k^+ - a_{-k}\right)\left(a_k - a_{-k}^+\right) + \frac{M\omega_k^2}{2}\frac{\hbar}{2}\frac{1}{M\omega_k}\left(a_k + a_{-k}^+\right)\left(a_k^+ + a_{-k}\right)$$

$$= \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{4}\left[a_k^+ a_k - a_k^+ a_{-k}^+ - a_{-k} a_k + a_{-k} a_{-k}^+ + a_k a_k^+ + a_k a_{-k} + a_{-k}^+ a_k^+ + a_{-k}^+ a_{-k}\right]$$

$$= \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2}\left[a_k^+ a_k + a_k a_k^+\right]$$ שימוש בכלל החילוף

$$= \sum_k \hbar\omega_k \left[a_k^+ a_k + \frac{1}{2}\right]$$

a_k^+ ו a_k הינם אופרטורי יצירה והשמדה (בהתאמה) של <u>בוזון</u> עם וקטור גל k.
בוזונים הינם קוונטים של תנודות שריג בדומה לפוטונים שהינם קוונטים של תנודות
השדה האלקטרומגנטי.

<u>פוננים</u> הינם <u>בוזונים</u> ניתן ליצר מספר גדול כרצוננו שלהם

המצב

$$|n_k\rangle = \left(a_k^+\right)^{n_k}|0\rangle$$

מתאר מצב בו יש n_k פוננים עם וקטור גל k, כאשר $|0\rangle$ הינו הואקום או מצב היסוד בו אין פוננים.

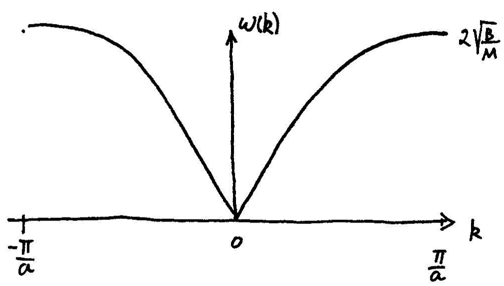
האופרטור $\hat{N}_k = a_k^+ a_k$ מודד את מספר הפוננים עם וקטור גל k במצב:

$$\hat{N}_k|n_k\rangle = n_k|n_k\rangle$$

מצב כללי עם n_{k_1} פוננים בעלי וקטור גל k_1 ···· n_{k_N} פוננים עם וקטור גל k_N הינו

$$|n_{k_1},\dots,n_{k_N}\rangle = \left(a_{k_1}^+\right)^{n_{k_1}}\cdots\left(a_{k_N}^+\right)^{n_{k_N}}|0\rangle$$

נתבונן ביחס הדיספרסיה $\omega(k)$



שימו לב כי כאשר $k\to 0$ $\omega_k\to 0$:

$$\omega_{k\to 0} = 2\sqrt{\frac{B}{M}}\,\frac{a}{2}|k| = \left(\frac{Ba^2}{M}\right)^{1/2}|k|$$

הסיבה הפיסיקלית לכך פשוטה: תנודה עם $k=0$ היא הזזה צבידה של השרשרת וזו אינה עולה אנרגיה. הסיבה לכך היא שההמילטוניאן אינואריאנטי תחת הזזה $u_i\to u_i+\lambda$ אך מצב היסוד אינו אינואריאנטי: האטומים ממוקמים בנקודות $x_j=ja$, הסימטריה ההזזה נשברה באופן ספונטני. כיוון שבאופן הזה יכולה להשבר גם עבור $x_j=ja+\lambda$ לשם מצב יסוד עם אותה אנרגיה. לכן $\omega_{k\to 0}\to 0$.
התנודה עם $k=0$ מעבירה אותנו ממצב יסוד אחד למצב יסוד אחר על ידי מצבי יסוד מנוונים הנבדלים זה מזה באופן בו הם שברו את הסימטריה.

זהו דוגמא ל <u>Goldstone mode</u>

Goldstone שהה בשנות ה60 (1962) מצא עיקרון בתורה של חלקיקים אלמנטריים כי (משפט Goldstone)

כאשר סימטריה רציפה גלובלית של ההמילטוניאן נשברת באופן ספונטני קיים ענף בוזוני של עירורים עם אנרגיה המגיעה עד לאפס.

ראו דוגמא לכך בתרגול: פונונים בשרשרת חד ממדית עם אינטראקציה $\partial^2 V=\frac{1}{r}$

קיומו של משפט זה תלוי גם בהעדרם של כוחות ארוכי טווח:

[דיון צדדי: משפט Goldstone היווה נושא ראשי למחקרים בשנות ה60 כאשר הם ניסו לפתח תורה לתאר האינטראקציות האלמנטריות בין החלקיקים. בתורות אלה סימטריות אלה נשברו באופן ספונטני עובדה שהובילה בהכרח להמצאותם של בוזונים חסרי מסה (בתורות יחסותיות מסה $\simeq$ אנרגיה) שלא נצפו בטבע. הדרך בה נפתרה הבעיה היא בעזרת הכנסת כוחות ארוכי טווח (דומה לשבירת כלל) שמעניק לבוזונים אלה מסה - Higgs Mechanism הבוזונים המסיביים הללו הינם נושאי הכח האלקטרו-חלש: $W^{\pm}, Z$ שהתגלו בראשית שנות ה80]

שמו גם לב כי מהירות החבורה של הפונון $\frac{\partial\omega}{\partial k}$ מתאפסת על קצות ה BZ $k=\pm\frac{\pi}{a}$: נקודות בהן $\frac{\partial\omega}{\partial k}=0$ נקראות נקודות Van-Hove ועוד נשוב ונפגוש בהן ונבין את חשיבותן כשנדון בתכונות התרמודינמיות הנובעות מקיום פונונים בגביש. נתחיל לעשות זאת כעת בחישוב החום הסגולי של השרשרת החד ממדית.

האנרגיה הממוצעת של השרשרת נתונה ע"י

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\sum_i e^{-\beta E_i}$$

כאשר $\beta=\frac{1}{k_B T}$ והסכום היא על המצבים העצמיים של המערכת. במקרה שלנו מצבים אלה מאופיינים ע"י מספרי האכלוס של הפונונים $n_{k_1}\cdots n_{k_N}$ $\Leftarrow$

$$\sum_i e^{-\beta E_i} \rightarrow \sum_{n_{k_1}\cdots n_{k_N}=0}^{\infty} e^{-\beta\left[(n_{k_1}+\frac{1}{2})\hbar\omega_{k_1}+\cdots(n_{k_N}+\frac{1}{2})\hbar\omega_{k_N}\right]}$$

$$= \prod_{k\in\{k_1\cdots k_N\}} \left[e^{-\frac{\beta}{2}\hbar\omega_k} + e^{-\frac{3}{2}\beta\hbar\omega_k} + e^{-\frac{5}{2}\beta\hbar\omega_k} + \cdots \right]$$

נסכם הטור הגאומטרי:

$$= \prod_k \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\hbar\omega_k}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_k}}$$

$$\Rightarrow \langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_k \ln \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega_k}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_k}} = \sum_k \frac{1}{2}\hbar\omega_k + \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{e^{\beta\hbar\omega_k}-1}$$

האבר הראשון מתאר את ה zero point energy של האוסצילטורים ואינו תלוי בטמפרטורה.
האבר השני מתאר את האנרגיה כתוצאה מעירור האוסצילטורים. n_k פוננים בתדירות ω_k תורמים $n_k\hbar\omega_k$ לאנרגיה ביחס למצב היסוד לכן נוכל לפרש את
כמספר האכלוס הממוצע של הפוננים עם ω_k:

$$n_k = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_k}-1}$$

לצורך המשך החישוב נרצה להפוך את הסכום על k לאינטגרל.
נשים לב כי k מקבל N ערכים שונים בתחום $\left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ המרוחקים זה מזה בשיעור $\Delta k = \frac{2\pi}{Na}$

⇐ כאשר $N\to\infty$:

$$\sum_k f(k) = \frac{1}{\Delta k}\sum_k \Delta k\, f(k) \xrightarrow{\Delta k\to 0} \frac{1}{\Delta k}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk\, f(k)$$

מכיון שהאבר הראשון אינו תלוי בטמפרטורה ומכיון שאנו מעוניינים בחום הסגולי $C_V = \frac{\partial}{\partial T}\langle E\rangle$ נתמקד באבר השני:

$$Na\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{2\pi}\frac{\hbar\omega_k}{e^{\beta\hbar\omega_k}-1}$$

נבצע משחק עם $\omega\delta$:

$$= Na\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{2\pi}\,\delta(\omega-\omega_k)\,\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

$$g(\omega) = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{2\pi}\,\delta(\omega-\omega_k)$$

נשים כאן את צפיפות המצבים של הפוננים
$g(\omega)\Delta\omega$ מספר אופני התנודה ליחידת אורך עם אנרגיה בחלון האנרגיה $\Delta\omega$.

$$\omega_k=\omega_{-k}: \; = 2\int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{2\pi}\,\delta(\omega-\omega_k)$$

$$= 2\int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{2\pi}\,\frac{\delta(\omega-k)}{\left|\frac{\partial\omega_k}{\partial k}\right|_{\omega_k=\omega}}$$

עבור $k>0$:

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = a\sqrt{\frac{B}{M}}\cos\frac{ka}{2} = a\sqrt{\frac{B}{M}}\sqrt{1-\sin^2\frac{ka}{2}}$$

כאשר $\omega_k = \omega$ $\quad$ $k = \frac{2}{a}\sin^{-1}\left(\frac{\omega}{2}\sqrt{\frac{M}{B}}\right)$

$\Leftarrow$

$$\left.\frac{\partial \omega}{\partial k}\right|_{\omega=\omega_k} = a\sqrt{\frac{B}{M}}\cdot\sqrt{1-\frac{\omega^2 M}{4B}}$$

$$= \frac{a}{2}\sqrt{\frac{4B}{M}-\omega^2}$$

$\Leftarrow$

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a}\frac{1}{\sqrt{\frac{4B}{M}-\omega^2}}\cdot\begin{cases} 1 & 0<\omega<\sqrt{\frac{4B}{M}} \\ 0 & \text{אחרת} \end{cases}$$

במקרה זה האינטגרל על פונקציה דלתא: מפושט

שימו לב כי $g(\omega)\to\infty$ כאשר $\omega = 2\sqrt{\frac{B}{M}}$ לומר כאשר $k=\pm\frac{\pi}{a}$ אלה הנקודות (נקודות van Hove) בהן $\frac{\partial \omega}{\partial k}=0$. נדבר לסינגולריות van Hove בהמשך.

$$\langle E\rangle = \frac{2N}{\pi}\int_0^{\sqrt{\frac{4B}{M}}}\frac{d\omega}{\sqrt{\frac{4B}{M}-\omega^2}}\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

$$= \frac{2N}{\pi}\frac{1}{\beta}\int_0^{\beta\hbar\sqrt{\frac{4B}{M}}}\frac{1}{\sqrt{\frac{4B}{M}(\hbar\beta)^2-x^2}}\frac{x}{e^x-1}dx$$

נציב $x=\beta\hbar\omega$

נחשב כעת בשני גבולות:

א. טמפרטורות נמוכות: $k_BT \ll \hbar\sqrt{\frac{4B}{M}}$

במקרה זה ניתן להחליף את גבול האינטגרציה העליון ב-∞ ולהזניח מהחלק x^2 בשורש.

$$\langle E\rangle = \frac{N}{\pi}\sqrt{\frac{M}{B}}\frac{(k_BT)^2}{\hbar}\underbrace{\int_0^\infty dx\,\frac{x}{e^x-1}}_{\frac{\pi^2}{6}}$$

$$C_v = \frac{\pi}{3}\sqrt{\frac{M}{B}}\frac{k_B^2}{\hbar}N\cdot T$$

ולכן שולטים בפסיקה באנרגיה נמוכה

שימו לב — המצב העיקרי בטמפרטורה של האנרגיה הממוצעת זה נובע מהעובדה לומר את אותו התשובה בלי אנרגיה $\hbar\omega \gtrsim T$. כוונתי אלה (בלי $k \simeq 0$) הם המורכים בטמפרטורה נמוכה!

מכיון שיחסים זה $\omega_k \simeq k$ בצורת המודם קודם 1 $\quad E \simeq \int_0^T d\omega \cdot \omega \propto T^2$

ב. טמפרטורות גבוהות $k_B T \gg \hbar\sqrt{\frac{4B}{M}}$

כאן נוכל לקחת $e^x \simeq 1+x$ מכיון שהאינטגרציה היא על ערכי $x \ll 1$.

$$\langle E \rangle = \frac{2N}{\pi} k_B T \underbrace{\int_0^{\beta\hbar\sqrt{\frac{4B}{M}}} \frac{dx}{\sqrt{\frac{4B}{M}(\hbar\beta)^2 - x^2}}}_{\frac{\pi}{2}} = N k_B T \quad ; \quad C_V = N k_B$$

זו התוצאה הקלאסית המוכרת של משפט החלוקה השווה (equipartition) הקובע כי לכל אחד ריבועי בהמילטוניאן תורם $\frac{1}{2}k_B T$ לאנרגיה הממוצעת של המערכת.

בטמפרטורות גבוהות התנהגות המערכת קלאסית ולכן אנו מקבלים את התוצאה הקלאסית הנקראת גם החוק של Dulong and Petit.