עד כה עסקנו בנושא ספקטרום הפוננים בשריג חד מימדי. בתרגול תכלילו את הטיפול לספקטרום הפונ' של שריג תלת מימדי.

הבעיה איתה מעוניין לבחון את תנועות השריג על פני סקלות אורך הגדולות בהרבה מקבוע השריג $\Leftrightarrow$ $k \ll \frac{2\pi}{a}$. בתחום זה אנו מצפים כי התנועות שנמצא לא יהיו רגישות לפרטי השריג.

נבחון בגבול הרצף של המודל החד מימדי שפתרנו:

המערכת הבדידה

הבעיה הבדידה: N המסות $u_j(t)$ סביב $R_j = ja$ $\quad j=1\cdots N$

אורך השרשרת $L=Na$

לגרנז'יאן:

$$L = \sum_j \frac{M}{2}\left(\frac{du_j}{dt}\right)^2 - \frac{B}{2}\left(u_j-u_{j-1}\right)^2$$

$$= a\sum_j \frac{1}{2}\left(\frac{M}{a}\right)\left(\frac{du_j}{dt}\right)^2 - \frac{1}{2}(Ba)\left(\frac{u_j-u_{j-1}}{a}\right)^2$$

תנע ויחסי חילוף:

$$P_j = M\frac{du_j}{dt} \quad , \quad [u_i, P_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

המילטוניאן:

$$H = a\sum_j \frac{1}{2(M/a)}\left(\frac{P_j}{a}\right)^2 + \frac{1}{2}Ba\left(\frac{u_j-u_{j-1}}{a}\right)^2$$

משוואת התנועה:

$$M\frac{d^2u_j}{dt^2} = B\left(u_{j+1}+u_{j-1}-2u_j\right)$$

פתרון:

$$u_j(t) = \sum_{k\in 1^{st}BZ} u_k\, e^{i(kja-\omega_k t)}$$

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

המערכת הרציפה

בגבול הרצף $N\to\infty,\ a\to 0$ כך ש- $Na=L$

האינדקס הבדיד j הופך לפרמטר רציף $x=ja$

$u_j(t) \to u(x,t) \qquad x\in[0,L]$

שימו לב: x הינו אינדקס (רציף) ולא דרגת חופש

$$L = \int_0^L dx\ \frac{\rho}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 - \frac{\bar{B}}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2$$

כאשר $\rho=\frac{M}{a}$ הינה צפיפות המסה (ליניארית) ו- $\bar{B}=aB$ ה- bulk modulus.

$$\frac{P_j}{a} = \frac{M}{a}\frac{du_j}{dt} \rightarrow \underbrace{\Pi(x)}_{\text{צפיפות תנע}} = \rho\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}$$

$$[u(x,t), \Pi(x',t)] = i\hbar\,\delta(x-x')$$

$$H = \int_0^L dx\ \frac{1}{2\rho}\Pi^2(x) + \frac{\bar{B}}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2$$

$$\rho\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \bar{B}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$u(x,t) = \sqrt{\frac{2\pi}{L}}\sum_{k=-\frac{\pi}{a}\to-\infty}^{\frac{\pi}{a}\to\infty} u(k)\, e^{i[kx-\omega(k)t]} \quad , \ \Delta k = \frac{2\pi}{L} \Leftarrow k\in 1^{st}BZ$$

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{\bar{B}}{\rho}}\,|k|$$

שימו לב כי גבול הרצף משחזר באופן אמין את תוצאות המודל הבדיד כל עוד $k \ll \frac{2\pi}{a}$
אך בתהליך הגבול איבדנו אינפורמציה על המתרחש בסקלות אורך של קבוע השריג - מכיון שבגבול
הוא שואף לאפס.

נכליל כעת את תוצאת גבול הרצף לשלושה מימדים. בקרוב ההרמוני בו אנו עובדים ההמילטוניאן יהיה תבנית ריבועית בנגזרות $\vec{u}(\vec{r},t)$. המקדמים תלויים בסימטריה של השריג שלגביו לוקחים את גבול הרצף (בתרגול תלמדו את הסימטריות הללו שאכן אלה צריכים לנבוע מהיותם מתארים אינטראקציות בין אטומים הנמצאים על שריג. ותתבקשו לפתור דוגמא פרטית על שריג FCC).
כדי לפשט את הטיפול בכל הנושא אנו נניח כי מודל הרצף שלנו הינו איזוטרופי תחת סיבובים לא שבר. דרישה זו מטילה מגבלות חמורות על האיברים שאנו יכולים לרשום בהמילטוניאן - עלינו לבנות סקלר מרכיבים של $\vec{u}$ ונגזרותיו.
זו הדרך המקובלת בה משתמשים בתאור הטבע - רושמים את ההמילטוניאן או הלגרנז'יאן הכללי ביותר המקיימים סימטריה נתונה.
במקרה שלנו ההמילטוניאן הכללי ביותר שאנו יכולים לרשום עם נגזרות עד סדר שני הינו
אבר מהסוג $\vec{u}^2$ אסור מכיון שהוא לא אינוריאנטי תחת הזזה.

$$H = \int d^3r \left[\frac{1}{2\rho}\vec{\pi}^2 + \frac{1}{2}(\mu+\lambda)(\vec{\nabla}\cdot\vec{u})^2 - \frac{1}{2}\mu\,\vec{u}\cdot\nabla^2\vec{u} \right]$$

השינוי בצפיפות האנרגיה תחת ריווח $u(\vec{r})=\alpha\vec{r}$ הינו $\frac{\alpha^2}{2}(\lambda+\frac{2}{3}\mu)$
השינוי תחת עיוות גזירה $u_x=\alpha y,\ u_y=u_z=0$ הינו $\alpha^2\frac{\mu}{2}$

μ ו-λ נקראים Lamé coefficients. בשריג האיזוטרופי תחת אותה סימטריה סבוב בדידה, דרישת הסימטריה מאיברי ההמילטוניאן נוצרת יותר וניתן לרשום יותר איברים המקיימים דרישות אלה ובהתאם נדרשים יותר פרמטרים כדי לתאר את האנרגיה הפוטנציאלית.
בשריג קובי לדוגמא יש צורך ב 3 פרמטרים.

משוואת התנועה:

$$\rho\frac{\partial\vec{u}}{\partial t} = (\mu+\lambda)\vec{\nabla}(\vec{\nabla}\cdot\vec{u}) + \mu\nabla^2\vec{u}$$

נחפש פתרון מהצורה

$$\vec{u}(\vec{r},t) = \vec{\epsilon}\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

כאשר $\vec{\epsilon}$ הינו <u>וקטור הפולריזציה</u> באורך יחידה: $|\vec{\epsilon}|=1$.

$k=|\vec{k}|$:

$$\Rightarrow -\rho\omega^2\vec{\epsilon} = -(\mu+\lambda)\vec{k}(\vec{k}\cdot\vec{\epsilon}) - \mu k^2\vec{\epsilon}$$

לשלוש משוואות אלה (אחת לכל רכיב) שלושה פתרונות בלתי תלויים: שלושה אופנים - אחד לכל כיוון בו נשברה סימטריית ההזזה.

1. אם $\vec{\epsilon} = \frac{\vec{k}}{k}$ אופן התנודה, או האופן, נקרא אופן תנודה או <u>אופן אורכי</u> (longitudinal):
כיוון תנועת רכיבי החומר מקביל לכיוון התקדמות הגל:

$$\rightarrow \rightarrow \cdot \cdot \leftarrow \leftarrow \leftarrow \cdot \cdot \rightarrow \rightarrow \cdots \qquad \xrightarrow{\vec{k}}$$

כאשר התדירות המתאימה לו:

$$\omega_\ell = \sqrt{\frac{2\mu+\lambda}{\rho}} \cdot k \equiv v_\ell \cdot k$$

2. אם $\vec{\epsilon}\cdot\vec{k}=0$ ($\vec{\epsilon}$ מאונך לכיוון התקדמות הגל) האופן נקרא <u>אופן רוחבי</u> (transverse)
קיימים שני כיוונים בלתי תלויים הניצבים ל-$\vec{k}$ ולכן שני אופני תנודה רוחביים בלתי תלויים. כיוון תנועת האטומים מאונך לכיוון התקדמות הגל:

$$\uparrow \uparrow \cdot \cdot \downarrow \downarrow \downarrow \cdot \cdot \uparrow \uparrow \cdots \qquad \xrightarrow{\vec{k}}$$

כאשר התדירות המתאימה לו:

$$\omega_t = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}\, k \equiv v_t \cdot k$$

שים לב כי במקרה הפשוט שאנו בוחנים שני ענפי התנודה הרוחביים מנוונים: הם בעלי אותו יחס דיספרסיה. במקרה זו אין סימטריה מלאה תחת סיבובים אלא המודל מקיים סימטריה סביב [illegible] בלבד. הדבר לא יקרה בדרך כלל. במודל אנאיזוטרופי יתכן גם כי כיוון הפולריזציה של האופן לא יהיה אורכי או רוחבי טהור - דבר זה יקרה רק עבור $\vec{k}$ לאורך צירי סימטריה מיוחדים בשריג.

נעבור כעת אל ייצוג למקרה הרב מימדי

$$\vec{u}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{V}} \sum_{\vec{k}} \vec{u}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad \vec{k} = \left[n_x \cdot \frac{2\pi}{L_x},\ n_y \frac{2\pi}{L_y},\ n_z \frac{2\pi}{L_z}\right]$$

inside 1^{st} BZ

$$\vec{\pi}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{V}} \sum_{\vec{k}} \vec{\pi}(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\int d^3r\, \vec{u}(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{V}} \sum_{\vec{k}'} \vec{u}(\vec{k}') \underbrace{\int e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} d^3r}_{V\delta_{k',k}} \Rightarrow \vec{u}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 V}} \int d^3r\, \vec{u}(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$[u^\mu(\vec k), \pi^\nu(\vec k')] = \frac{1}{(2\pi)^3 V}\int d^3r\, d^3r'\, e^{-i[\vec k\cdot\vec r + \vec k'\cdot\vec r']}\underbrace{[u^\mu(\vec r), \pi^\nu(\vec r')]}_{i\hbar\delta^{\mu\nu}\delta(\vec r-\vec r')}$$

$$= \frac{i\hbar}{(2\pi)^3 V}\int d^3r\, e^{-i(\vec k+\vec k')\vec r}\,\delta^{\mu\nu}$$

$$= \frac{i\hbar}{(2\pi)^3}\,\delta^{\mu\nu}\,\delta_{\vec k,-\vec k'}$$

$$a_{\vec k,s} = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{2\hbar}}\left[\sqrt{\rho\,\omega_{\vec k,s}}\;\vec\epsilon_s\cdot\vec u_{\vec k} + \frac{i}{\sqrt{\rho\,\omega_{\vec k,s}}}\;\vec\epsilon_s\cdot\vec\pi_{\vec k}\right]$$

$s=1,2,3$ מתאים לענף האקוסטי האורכי ולשני הענפים האקוסטיים הרוחביים

$$a^{+}_{\vec k,s} = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{2\hbar}}\left[\sqrt{\rho\,\omega_{\vec k,s}}\;\vec\epsilon_s\cdot\vec u_{-\vec k} - \frac{i}{\sqrt{\rho\,\omega_{\vec k,s}}}\;\vec\epsilon_s\cdot\vec\pi_{-\vec k}\right]$$

$$[a_{\vec k,s}, a_{\vec k',s'}] = 0, \qquad [a_{\vec k,s}, a^{+}_{\vec k',s'}] = \delta_{\vec k,\vec k'}\,\delta_{s,s'}$$

נבטא את $\vec u(\vec r)$ ו $\vec\pi(\vec r)$ באמצעות ה $a_{\vec k,s}$:

$$\sum_{\vec k,s}\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_{\vec k,s}}}\;\vec\epsilon_s\left(a_{\vec k,s} + a^{+}_{-\vec k,s}\right)e^{i\vec k\cdot\vec r}$$

$$= \sum_{\vec k,s}\sqrt{\frac{(2\pi)^3}{V}}\;\vec\epsilon_s\left(\vec\epsilon_s\cdot\vec u_{\vec k}\right)e^{i\vec k\cdot\vec r} = \vec u(\vec r)$$

השתמשנו בעובדה שוקטורי הפולריזציה מהווים שלשה אורתונורמלית:

$$\sum_\mu \epsilon_s^\mu\cdot\epsilon_{s'}^\mu = \delta_{ss'}$$

המטריצה ϵ_s^μ אורתוגונלית לפי שורות וטורים:

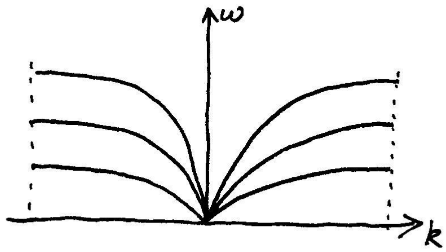
$$\sum_s \epsilon_s^\mu\cdot\epsilon_s^\nu = \delta_{\mu\nu}$$

$$\Rightarrow \sum_{s,\nu}\epsilon_s^\mu\,\epsilon_s^\nu\,u_{\vec k}^\nu = u_{\vec k}^\mu$$

ובאופן דומה ל $\vec\pi(\vec r)$:
$$\vec\pi(\vec r) = \sum_{\vec k,s}\sqrt{\frac{\hbar\rho\omega_{\vec k,s}}{2V}}\;\vec\epsilon_s\left(a_{\vec k,s} - a^{+}_{-\vec k,s}\right)e^{i\vec k\cdot\vec r}$$

$$H = \sum_{\vec{k},s} \hbar\omega_{\vec{k},s}\left(a^{+}_{\vec{k},s}a_{\vec{k},s} + \frac{1}{2}\right)$$ אשר לכן להראות כי כלשון ש :

נתבונן בספקטרום הפונוני של גביש מונואטומי תלת מימדי ונהיה מעוניינים לחשב את החום הסגולי שלו. הספקטרום הפונוני יכלול 3 ענפים אקוסטים, לצורך הכוון מסוים במרחב k הוא יהיה



עלינו לחשב

$$E = \sum_{\vec{k}\in 1^{st} BZ}\sum_{s} \frac{\hbar\omega_s(\vec{k})}{e^{\beta\hbar\omega_s(\vec{k})}-1}$$

$$\xrightarrow{V\to\infty} V\sum_s \int_{1^{st} BZ} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{\hbar\omega_s(\vec{k})}{e^{\beta\hbar\omega_s(\vec{k})}-1}$$

$$= V\int_0^{\infty} d\omega\, g(\omega)\,\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

עם

$$g(\omega) = \sum_s \int_{1^{st} BZ} d^3k \frac{1}{(2\pi)^3}\delta\left[\omega - \omega_s(\vec{k})\right]$$

בשכיח הספקטרום הפונוני $\omega_s(\vec{k})$ מתנהג בצורה שונה לאורך כיוונים שונים בשריג ולחשב $g(\omega)$ תוך שימוש בתלות המדויקת של $\omega_s(\vec{k})$ ב $\vec{k}$ היא משימה קשה הניתנת לביצוע בכלל רק במחשב.

לצורך חישוב אנליטי הציע Debye להחליף את הספקטרום המדויק במודל בו לכל הענפים האקוסטים יש דיספרסיה לינארית עם אותה מהירות $\omega = ck$. ברור זה נכון רק עבור $k_BT \ll \hbar\frac{\pi c}{a}$ (כי התמונה הקוטבה מהיין מהירות הענפים ליד $k=0$! a קבוע השריג). תחת תנאי זה הפונונים המעורבים יהיו רק באנרגיות נמוכות עם k הרחוק מקצות ה B.Z שבו הקירוב הלינארי ליחס הדיספרסיה תקף.

במודל הזה

$$g(\omega) = \underset{\text{שלושה ענפים}}{3}\int_0^{k_D} 4\pi dk\, k^2 \frac{1}{(2\pi)^3}\delta\left[\omega - ck\right]$$

$$= \frac{3}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{c^3}\cdot\begin{cases}1 & 0<\omega<\omega_D = ck_D \\ 0 & \text{אחרת}\end{cases}$$

k_D ו-ω_D הינם וקטור הגל והתדירות של Debye. הם נקבעים מתוך הדרישה הבאה:

תכונה כללית של $g(\omega)$ היא

$$\int_0^\infty d\omega\, g(\omega) = \int_0^\infty d\omega \sum_s \int_{1^{st}BZ} d^3k \frac{1}{(2\pi)^3}\delta(\omega-\omega_s(k))$$

$$= 3\int_{1^{st}BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{3N}{V}$$

מכיון שמספר ערכי k בתוך ה-1st BZ הינו מספר נקודות הסריג = האטומים בגביש כולו.

בכדי שצפיפות מצבי הפוננים במודל Debye תקיים תנאי כללי זה נדרוש

$$3\frac{N}{V} = \frac{3}{2\pi^2c^3}\int_0^{\omega_D} d\omega\, \omega^2 = \frac{\omega_D^3}{2\pi^2c^3} \quad\Rightarrow\quad \omega_D = \left[6\pi^2c^3\frac{N}{V}\right]^{1/3}$$

כעת נעבור לאנרגיה הכוללת כאשר רק קיימים פוננים (אקוסטים) במערכת.

$$E = V\int_0^{\omega_D} d\omega\, \frac{3}{2\pi^2c^3}\,\omega^2\,\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

$$= V\,\frac{3(k_BT)^4}{2\pi^2c^3\hbar^3}\int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} dx\, \frac{x^3}{e^x-1}$$

כאשר $\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$ היא טמפרטורת Debye.

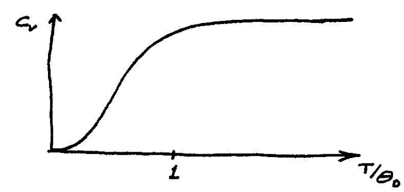
בגבול $T \ll \Theta_D$ האינטגרל הופך לאינטגרל מ-0 ל-∞ ושווה למספר טהור עם התוצאה

$$E \propto T^4 \quad\rightarrow\quad C_V \propto T^3$$

שים לב כי תלות T נתונה על ידי המימד (3 לעומת 1 בבעית השרשרת אותה פתרנו בעבר)
תרומת הפוננים $\sim T^3$ לחום הסגולי היא לרוב התרומה החשובה ביותר לחום הסגולי השונה בגבישים.
בעיקר במבודדים בהם אין תרומה מאלקטרונים חופשיים.

בגבול $T \gg \Theta_D$ מובטח לנו מתוך האופן בו קבענו את ω_D לקבל את התשובה הנכונה.
בפרט האינטגרל הופך ל $\int_0^{\Theta_D/T} dx\, x^2 = \frac{1}{3}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^3$

$$E = 3Nk_BT \quad , \quad C_V = 3Nk_B$$



מתוך השוואת החום הסגולי המדוד לערך שקיבלנו מתוך מודל Debye ניתן להעריך את Θ_D.

בעופרת שהיא מתכת רכה - C קטן $\Theta_D \approx 88\,K$

ביהלום הקשה $\Theta_D \approx 1280\,K$

בשריג עם בסיס יופיעו ענפים נוספים. לדוגמא בשריג עם בסיס דו אטומי יופיעו בנוסף ל-3 הענפים האקוסטים 3 ענפים אופטים. כפי שראינו במקרה החד ממדי התדירה שנדרשת אנרגיה סופית כדי לעורר אותם שגורמת את התרומה שתורמים לחום הסגולי בטמפרטורות נמוכות קטנה אקספוננציאלית. בטמפרטורות גבוהות הם יספקו תרומה של $3Nk_B$ לחום הסגולי - שים לב כי במקרה זה N הוא מספר תאי היחידה (2 אטומים בכל תא).

עד כה הנחנו כי מצב היסוד של המערכת שובר את סימטריית ההזזה של ההמילטוניאן ולקחנו את השלכות התנודות (שהנחנו כי הן קטנות) של האטומים סביב מצב שווי המשקל שלהם בשריג. כעת אנו במצב המאפשר לנו לבדוק את הקונסיסטנטיות של הנחת המוצא שלנו - האם אכן האטומים מבצעים תנודות קטנות סביב השריג האידיאלי?
לצורך כך אנו מעוניינים במדד לגודל התנודות האטומיות. במבט ראשון נראה כי $\langle \vec{u} \rangle$ הינו מועמד טבעי אך נשים לב שהתנודות האטומים סימטריות סביב מצב שווי המשקל ולכן $\langle \vec{u} \rangle = 0$
נתבונן לכן ב $\langle \vec{u}^2 \rangle$

$$\langle \vec{u}^2(r) \rangle = \frac{\sum_{\{n_k\}} \langle \{n_k\} | \vec{u}^2(r) | \{n_k\} \rangle e^{-\beta E_{\{n_k\}}}}{\sum_{\{n_k\}} e^{-\beta E_{\{n_k\}}}}$$

$$u(\vec{r}) = \sum_{\vec{k},s} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\vec{k}s}}}\ \vec{\epsilon}_s \left(a_{\vec{k},s} + a^{+}_{-\vec{k},s}\right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\Rightarrow \langle \{n_k\} | \vec{u}^2(r) | \{n_k\} \rangle = \sum_s \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\hbar}{2\rho V} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{k}s}\omega_{\vec{k}'s}}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\vec{r}} \underbrace{\langle \{n_k\} | \left(a_{k,s} + a^{+}_{-\vec{k}s}\right)\left(a_{\vec{k}'s} + a^{+}_{-k's}\right) | \{n_k\} \rangle}_{\left(1 + 2n_{\vec{k}s}\right)\delta_{\vec{k},-\vec{k}'}}$$

$$= \sum_{\vec{k}\in 1^{st}BZ} \sum_s \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\vec{k}s}} \left(2n_{\vec{k}s} + 1\right)$$

$$\Rightarrow \langle \vec{u}^2\rangle = \sum_s \sum_{\vec{k}\in BZ} \frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\vec{k},s}}\left[1 + 2\langle n_{\vec{k}s}\rangle\right]$$

נשתמש ב $\langle n_{\vec{k}s}\rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{\vec{k}s}}-1}$ ונניח מודל Debye (3 ענפים אקוסטיים עם אותו $\omega_k = ck$)

$$\langle u^2\rangle = \frac{3\hbar}{(2\pi)^3\rho c}\int_{BZ} d^3k \, \frac{1}{k}\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar ck}-1}\right]$$

$$= \frac{3\hbar}{2\pi^2\rho c}\int_0^{k_D} dk\, k^2 \frac{1}{k}\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar ck}-1}\right]$$

האיבר הראשון מתאר את תרומת ה zero point motion והשני את התנודות בטמפרטורה סופית.

$$\xrightarrow{T > T_D} \frac{3\hbar}{2\pi^2\rho c}\int_0^{k_D} dk\, k\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\beta\hbar c}\frac{1}{k}\right] = \frac{3\hbar}{2\pi^2\rho c}\left[\frac{k_D^2}{4} + \frac{k_B k_D}{\hbar c}T\right]$$

החישוב שערכנו מאפשר לנו גם לאמוד באופן גס את טמפרטורת ההיתוך של המוצק. אנו מצפים שהמוצק יתוך כאשר אמפליטודת התנודות היא מסדר גודל של קבוע הסריג (Lindemann criterion) $\langle u^2\rangle \simeq a^2$. תנאי זה נותן לנו משוואה ממנה ניתן להוציא את טמפרטורת ההיתוך T_m:

שימו לב כי מתקיים ש $\frac{k_D}{\rho c^2} = \frac{\omega_D}{M}\frac{V}{Nc^3} \approx \frac{1}{M\omega_D^2}$ $\Leftarrow$ $T_m \sim \frac{Ma^2}{\hbar^2}k_B T_D^2$

$[\text{confinement energy}]^{-1}$

זהו באופן אמפירי גס מכיוון שהקירוב ההרמוני עליו מבוססת תוצאה זו נשבר כאשר $|u| \sim a$.

מהחישוב שערכנו נוכל להסיק גם מסקנה כללית יותר. נבחן את התלות ב $\langle u^2\rangle$ הפעם בממד d לאו דווקא $d=3$ ונעשה זאת עבור טמפרטורות גבוהות [illegible]

$$\langle u^2\rangle \sim \int_0^{k_D} dk \cdot k^{d-1}\cdot\frac{1}{k}\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\beta\hbar c}\frac{1}{k}\right]$$

פקטורי k אלה נובעים מיחס הדיספרסיה $\omega = ck$

$$\int_0^{k_D} dk\, k^{d-2}$$ נקבל לכן כי התרומה ל $\langle u^2\rangle$ מתנודות zero point motion נתונה ב:

$$\int_0^{k_D} dk\, k^{d-3}$$ התרומה ל $\langle u^2\rangle$ מתוך הפלקטואציות התרמיות ב:

אנו רואים כי התרומה מ zero point motion מתבדרת כאשר מתרומה מk קטנים עבור $d \leq 1$
וכי התרומה מפלקטואציות התרמיות מתבדרת " $d \leq 2$

אנו מגיעים לכן למסקנה כי לא יתכן קיומו של שבירה בטמפרטורות סופיות עבור $d \leq 2$
יתכן קיום שבירה ב $T=0$ ב $1<d$ אך לא עבור $d \leq 1$.
ככל שיורדים במימד הפלקטואציות הופכות משמעותיות יותר ויותר והן גורמות לשחזר את הסימטריה
אחרי המעבר שמצב היסוד שבר.
שימו לב כי ניתן לעקוב אחר סיבת ההתבדרות הנ"ל לאחר את יחס הדיספרסיה $\omega=ck$ עבור
k קטנים כאמור. כפי שכבר ראינו יחס דיספרסיה זה נובע מתוך השבירה הספונטנית של
הסימטריה ע"י מצב היסוד בהתאם למשפט Goldstone לכן נוכל להסיק מסקנה כללית יותר:

<u>משפט Mermin-Wagner</u> : סימטריה רציפה לא יכולה להשבר ספונטנית בטמפרטורה
סופית ב $d \leq 2$ וב $T=0$ ב $d \leq 1$.

משפט זה תקף גם לגבי שבירת סימטריות רציפות השונות מסימטריות ההזזה והסיבוב אותן שובר
השריג. לדוגמא למודל הייזנברג לפרומגנט $H=-J\sum_{\langle ij\rangle}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j$ סימטריה רציפה של סיבוב כל
הספינים בצורה מסוימת. מתוך משפט MW נקבל כי לא יתכן קיום של מצב פרומגנטי
השובר סימטריה זו בשני ממדים:

$$\begin{array}{cccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{array}$$ עבור $T>0$

ובממד אחד פרומגנט $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ לא יתקיים בכל טמפרטורה שהיא כולל $T=0$. -
הפלקטואציות התרמיות והקוונטיות הורסות אותו.