

01;05

## Влияние размерности фононного спектра на устойчивость состояний конденсированных сред

© В.М. Кузнецов, В.И. Хромов

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
125047 Москва, Россия  
e-mail: vikhromov@mail.ru

(Поступило в Редакцию 22 марта 2011 г.)

В рамках приближений Эйнштейна и Дебая рассмотрена задача о влиянии показателя размерности  $d_f$  фононного спектра, являющегося его структурной характеристикой в континуальных моделях, на устойчивость состояний конденсированных сред. В основу оценки устойчивости фазового состояния положен критерий Линдемана, обобщенный на произвольные значения  $0 \leq d_f \leq \infty$ . На примере исследования возможностей получения молекулярного водорода в сверхтекучем состоянии обсуждена проблема изменения физических характеристик вещества с помощью регулирования структуры его фононного спектра. Проведено сопоставление моделей Эйнштейна и Дебая в задаче динамики атомных колебаний и показана расходимость последней при размерностях фононного спектра  $d_f < 2$ , а также ее несоответствие при высоких температурах модели классического осциллятора для всех размерностей, кроме  $d_f \rightarrow \infty$ .

### Введение

В квантовой теории теплоемкости Эйнштейна предполагается, что реальный спектр колебаний атомов твердого тела можно заменить одной специально подобранной частотой  $\langle \omega \rangle$ . Полный спектр акустических колебаний учитывается в континуальной модели Дебая, разработанной для однородного изотропного пространства волновых векторов с показателем размерности  $d_f = 3$ . Естественным развитием указанных моделей является их обобщение на произвольные значения  $0 \leq d_f \leq \infty$ . Впервые такие попытки были сделаны (см., например, [1]) введением целочисленных значений:  $d_f = 2$  (двумерное) и  $d_f = 1$  (линейное) волновых пространств для описания температурных зависимостей теплоемкости плоских и цепочечных молекулярных структур. Дробное значение размерности  $d_f$  можно ввести в рамках фрактальной пространственной геометрии. Так, в работе [2] это сделано с целью построения теории фрактонов, в [3] — для описания низкотемпературной зависимости теплоемкости при  $1 \leq d_f \leq 3$ , а в [4,5] — для общего представления теории Дебая в диапазоне  $0 \leq d_f \leq \infty$ .

На основании исследований [1–5] выяснилось, что размерность фононного спектра  $d_f$  является столь же фундаментальным параметром континуальной модели вещества, что и его характеристическая (дебаевская) температура  $\theta_H$ .

Используя закон решеточной теплоемкости, по этому параметру можно провести классификацию конденсированных сред [5], в то время как по значениям характеристической температуры  $\theta_H$  она возможна лишь по группам веществ с одинаковой размерностью  $d_f$ .

### Устойчивость конденсированных сред в моделях Дебая и Эйнштейна

Об устойчивости агрегатной фазы вещества в конденсированном состоянии можно судить по величине отклонения колеблющегося атома от равновесного положения. При этом Линдеманом было эмпирически установлено, что неустойчивое состояние, связываемое с фазовым переходом (плавлением), возникает, когда среднеквадратичное смещение  $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ -атома от положения равновесия, отнесенное к межатомному расстоянию  $a$ , достигает значения  $\gamma = (\langle r^2 \rangle^{1/2}/a) \approx 0.1 - 0.25$ . Это соотношение дает приближенный критерий, который в рамках гармонического приближения ( $r \ll a$ ) позволяет оценить температуру  $T_m$  плавления для неквадратичных кристаллов, для которых  $T_m > \theta_H$ . В дальнейшем для определенности будем придерживаться значения  $\gamma \approx 0.1$ .

Температурозависимая функция  $\gamma(T)$ , оценивающая амплитуду смещений частиц (формула Линдемана) при обобщении на произвольную размерность  $d_f$  фононного спектра в дебаевском приближении, имеет вид [6]

$$\gamma_D(T) = \frac{\langle r^2(T) \rangle^{1/2}}{a} = \left\{ \frac{3\hbar^2 \mu d_f T^{d_f-1}}{M k_B a^2 (\theta_H^{d_f} - \theta_N^{d_f})} \times \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{(\exp x) - 1} \right] x^{d_f-2} dx \right\}^{1/2}, \quad (1)$$

где  $x = \hbar\omega/k_B T$ ,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $\omega$  — частота атомных колебаний,  $\mu$  — коэффициент, учитывающий число колебаний в многоатомной структуре,  $M$  — масса атома (молекулы) осциллятора,  $a$  — среднее расстояние между

частицами.<sup>1</sup>

$$\theta_H = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B}, \quad \theta_N = \frac{\hbar\omega_{\min}}{k_B}$$

— характеристические температуры, соответствующие максимальной  $\omega_{\max}$  и минимальной  $\omega_{\min}$  частотам тепловых колебаний в твердом теле соответственно.

Выражение (1) часто применяется в случае  $\theta_N = 0$  (макроскопическое тело  $L \gg a$ ) и  $d_f = 3$  (закон Дебая) при расчетах температуры  $T_m$  плавления и фактора Дебая–Валлера (параметр, используемый в мессбауэровской спектроскопии и рассеянии рентгеновских лучей и нейтронов). Тот факт, что при высоких температурах оно не приводит к значениям  $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ , даваемым моделью классического гармонического осциллятора (см., например, [7]), в литературе обычно не комментируется. Более того, при значениях размерности фононного спектра  $d_f \leq 2$  интеграл в выражении (1) является расходящимся на низких частотах. Низкочастотную расходимость выражения (1) можно по аналогии с „ультрафиолетовой катастрофой“ в теории излучения абсолютно черного тела назвать „инфракрасной катастрофой“ [6].

Ниже будет показано, что применение дебаевского приближения (1) к расчету температурной зависимости величины  $\gamma_D(T)$  в твердотельных структурах с  $d_f < 2$  приводит к величинам  $\gamma_D(T) \approx 0.1$  при температурах  $T \ll T_m$ , т.е. далеких от температуры плавления  $T_m$ . Поэтому в общем случае произвольных значений  $d_f$  в задачах температурной динамики колебаний атомов твердого тела следует отказаться от дебаевского приближения и перейти к эйнштейновской модели, выбирая, например, в качестве характерной среднюю частоту фононного спектра

$$\begin{aligned} \langle \omega \rangle &= \frac{1}{3N} \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \omega g(\omega) d\omega \\ &= \frac{d_f}{d_f + 1} \omega_{\max} \frac{1 - (\frac{\theta_N}{\theta_H})^{d_f+1}}{1 - (\frac{\theta_N}{\theta_H})^{d_f}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $N$  — число колеблющихся атомов,

$$\frac{\theta_N}{\theta_H} \approx \frac{a}{L} \ll 1$$

— относительная величина обрезания фононного спектра для образца с характерным размером  $L$ ,

$$g(\omega) = \frac{3Nd_f\omega^{d_f-1}}{\omega_{\max}^{d_f} - \omega_{\min}^{d_f}}$$

— функция плотности состояний фононного спектра.

<sup>1</sup> Предполагается, что оно может быть выбрано соответствующим образом вне зависимости от упорядоченности пространственного распределения частиц в исследуемой структуре, находящейся в трехмерном евклидовом пространстве.

При этом выражение для температурной зависимости амплитуды смещений частиц в формуле Линдемана приобретает вид

$$\begin{aligned} \gamma_E(T) &= \frac{\langle r^2(T) \rangle^{1/2}}{a} \\ &= \left\{ \frac{3\hbar\mu}{Ma^2} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\frac{\hbar\langle \omega \rangle}{k_B T}) - 1} \right] \frac{1}{\langle \omega \rangle} \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Таким образом, произвольный спектр  $g(\omega)$  колебаний можно учесть как в модели Дебая (1), так и в модели Эйнштейна (3), но различным образом.

Для классической модели динамики твердого тела, как системы температурозависимых осцилляторов, имеем

$$\gamma_C(T) = \frac{1}{a\langle \omega \rangle} \sqrt{\frac{3\mu k_B T}{M}}. \quad (4)$$

Обычно в аналогах выражения (3) значения  $\theta_N$  и  $d_f$  полагаются равными  $\theta_N \rightarrow 0$  и  $d_f = 3$ , а вместо средней частоты  $\langle \omega \rangle$  фононного спектра используется дебаевская частота  $\omega_{\max}$ . Следует отметить, что формально  $\langle \omega \rangle \rightarrow \omega_{\max}$  при  $d_f \rightarrow \infty$  (см. (2)) и отличается от средней частоты  $\langle \omega \rangle$  дебаевского ( $d_f = 3$ ) спектра на 25%.

При  $T \gg \theta_H$  выражение (3) переходит в формулу (4) при любых значениях  $d_f$  и  $\theta_N/\theta_H$ . В то же время функция (1) при высоких температурах переходит в

$$\gamma'_C(T) = \frac{1}{a\omega_{\max}} \sqrt{\frac{3\mu k_B T}{M}} \frac{d_f}{(d_f - 2)^2} f\left(\frac{\theta_N}{\theta_H}\right), \quad (5)$$

где

$$f\left(\frac{\theta_N}{\theta_H}\right) = \frac{1 - (\theta_N/\theta_H)^{d_f-2}}{1 - (\theta_N/\theta_H)^{d_f}}.$$

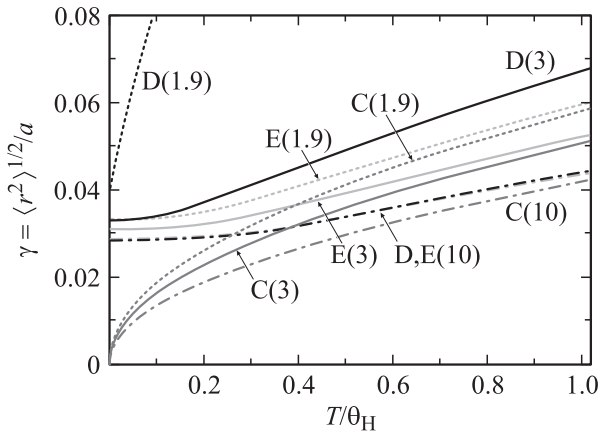
Это выражение, в свою очередь, переходит в (4) только при  $d_f \rightarrow \infty$ , когда множитель  $d_f/(d_f - 2) \rightarrow 1$  и  $f(\theta_N/\theta_H) \rightarrow 1$ .

На рис. 1 для различных значений  $d_f$  построены зависимости (1)–(4) от безразмерной температуры  $T/\theta_H$  при  $M = 100$  а.е.м.,  $a = 3.0$  Å,  $\mu = 1$ ,  $\theta_N/\theta_H = 10^{-5}$ . Асимптотика задачи такова, что приближение  $d_f \rightarrow \infty$  практически выполняется уже при  $d_f \geq 10$ , и значения  $\gamma_D$ ,  $\gamma_E$ ,  $\gamma_C$  при  $T/\theta_H > 1$  совпадают друг с другом. При  $d_f = 3$  они различаются, а при  $d_f < 2$ , в частности уже при  $d_f = 1.9$  (D(1.9) на рис. 1), в соотношении (1) наблюдается расходимость.

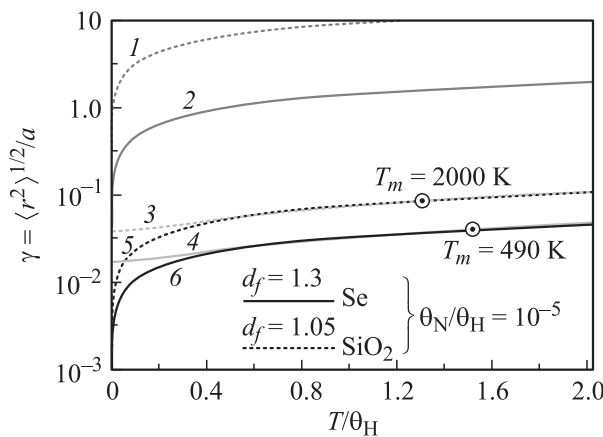
На рис. 2 для отношения  $\theta_N/\theta_H \sim 10^{-5}$ , т.е. для макроскопических ( $L \approx 10^5 a$ ) образцов, в качестве которых были выбраны Se ( $d_f = 1.3$ ,  $\mu = 1$ ;  $\theta_H = 310$  К,  $a = 4.1$  Å,  $T_m = 490$  К,  $M = 13.4 \cdot 10^{-27}$  кг) и SiO<sub>2</sub> ( $d_f = 1.05$ ,  $\mu = 3$ ;  $\theta_H = 1490$  К,  $a = 2$  Å,  $T_m = 2000$  К,  $M = 10^{-25}$  кг)<sup>2</sup>, приведены температурные зависимости  $\gamma(T/\theta_H)$ , рассчитанные по соотношениям (1)–(4).

<sup>2</sup> Справочные данные и данные расчетов из работы [4].

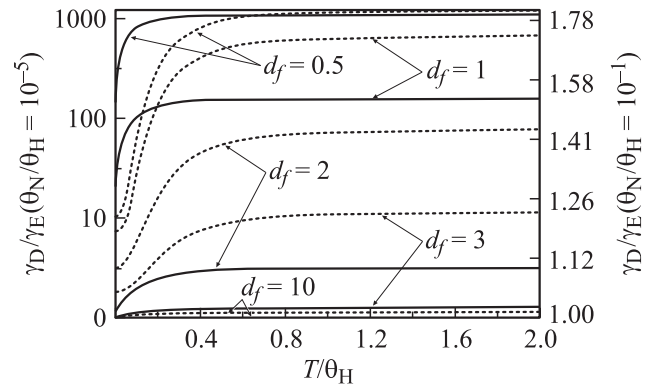
Результаты расчетов свидетельствуют о том, что относительные среднеквадратичные смещения в приближении Эйнштейна (3) при температурах  $T \approx T_m$  коррелируют с критерием Линдемана в отличие от явно завышенных значений  $\gamma_D(T)$  дебаевской модели. Более того, соответствующие дебаевскому приближению данные для  $\gamma_D(T)$ , приведенные на рис. 2 для Se и SiO<sub>2</sub>, указывают на то, что эти вещества не должны существовать в твердом состоянии даже при комнатных температурах ( $\gamma_D \approx 0.1$  при  $T \approx 10^{-3}$  К для Se и  $T \approx 10^{-5}$  К для SiO<sub>2</sub>). В то же время для веществ с размерностью фононного спектра  $d_f > 2$  расходимость интеграла в (1) отсутствует. Расчетные значения отношения  $\gamma_D/\gamma_E = f(T/\theta_H)$ , не зависящего от конкретных характеристик вещества, таких как  $M$ ,  $a$ ,  $\mu$ ,  $\theta_H$ , приведены на рис. 3. Видно, что отношение  $\gamma_D/\gamma_E$  приближается к единице, если показатель  $d_f \gg 1$ , а также при сильном обрезании фононного спектра (на рисунке  $\theta_N/\theta_H = 0.1$ ),



**Рис. 1.** Температурные изменения среднеквадратичных смещений частиц в непрерывных моделях: D — Дебая, E — Эйнштейна, C — классический гармонический осциллятор. В скобках указаны значения  $d_f$ .



**Рис. 2.** Температурные зависимости среднеквадратичных смещений при колебаниях атомов Se (сплошные линии) и молекул SiO<sub>2</sub> (пунктир): кривые 1, 2 — приближение Дебая; 3, 4 — приближение Эйнштейна; 5, 6 — классический осциллятор.



**Рис. 3.** Температурные зависимости отношений среднеквадратичных смещений частиц в моделях Дебая и Эйнштейна для разноразмерных ( $\theta_N/\theta_H \approx a/L$ ) образцов: сплошные кривые  $\theta_N/\theta_H = 10^{-5}$ , пунктирные кривые —  $\theta_N/\theta_H = 0.1$ .

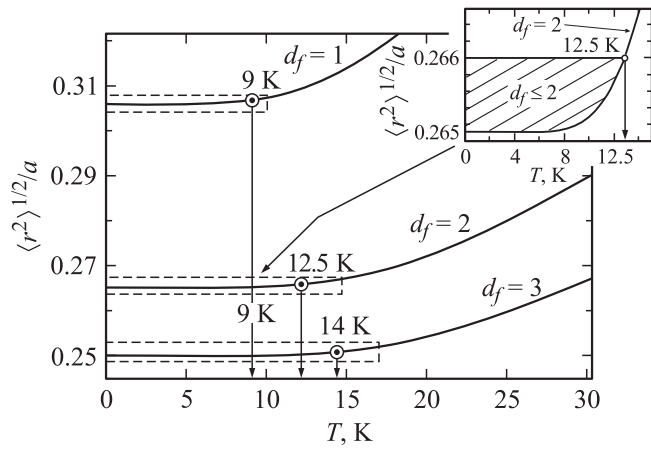
когда его длинноволновая часть значительно подавлена, что имеет место, например, в нанобъектах.

## Устойчивость квантовых кристаллов

Оставаясь в рамках гармонического приближения, с целью получения качественных выводов рассмотрим задачу устойчивости для квантовых кристаллов, образованных атомами или молекулами легких элементов (например, H<sub>2</sub>, He и их изотопами). В таких системах амплитуды нулевых колебаний существенно превышают значения, даваемые критерием Линдемана, т.е.  $\langle r_0^2 \rangle^{1/2} \leq a$ , делая его неприменимым для оценки температуры фазового перехода (плавления). Волны де-Бройля соседних атомов в квантовых кристаллах перекрываются, что не позволяет считать их локализованными, как это имеет место в узлах кристаллической решетки классических твердотельных систем. Делокализация и, как следствие, смещение всех атомов приводят, по-видимому, к относительной „нечувствительности“ структуры к критерию Линдемана при больших амплитудах нулевых колебаний в квантовых кристаллах. При этом нормировка на один атом в расчетах величины  $\gamma(T)$  сохраняется.

Чтобы разрушить такую структуру, достаточны небольшие тепловые энергии, поэтому для квантовых кристаллов выполняется условие  $T_m < \theta_H$ . На рис. 4 приведены результаты расчетов функции  $\gamma_E(T)$  для молекулярного водорода H<sub>2</sub> с параметрами:  $d_f = 3$ ,  $\mu = 2$ ,  $\theta_H = 110$  К,  $\theta_N/\theta_H = 10^{-3}$ ;  $a = 3.75$  Å,  $T_m = 14$  К,  $M = 3.34 \cdot 10^{-27}$  kg, а также его модельных модификаций с уменьшенными значениями размерности  $d_f$  фононного спектра.

Снижения размерности  $d_f$  реального объекта можно добиться, переходя к наномасштабу образца, помещая, например, исследуемый материал в поры матрицы иного вещества или нанотрубки. На такую возможность



**Рис. 4.** Относительные среднеквадратичные смещения молекул обычного ( $d_f = 3$ ) и модифицированного ( $d_f = 2$  и  $d_f = 1$ ) водорода.

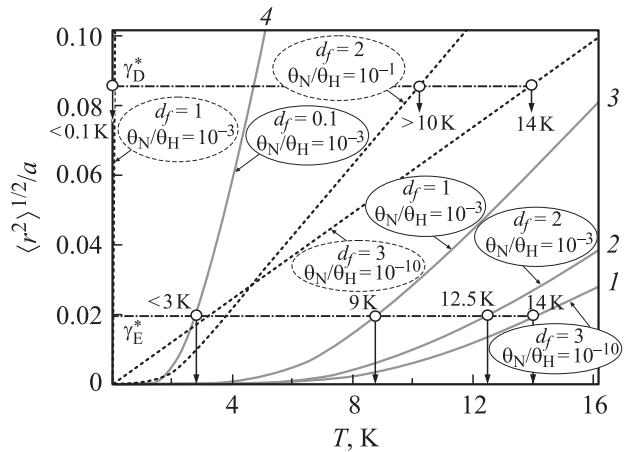
указывают результаты работы [6], основанные на экспериментальных данных по уменьшению температуры  $T_m$  плавления различных веществ при переходе от микро-размерных образцов к наномасштабным [8]. При этом оказывается, что если размерность фонового спектра исходного микрообразца  $d_f = 3$ , то в наночастицах того же материала она может быть снижена до значений  $d_f \approx 2$ , а в нанотрубках, по-видимому, и до  $d_f \approx 1$ .

У всех кривых зависимости  $\gamma_E(T)$  на рис. 4 в области низких температур  $T < T_m$  наблюдается характерное плато, хотя незначительный температурный рост этой величины все же наблюдается. Именно из-за него и происходят потеря устойчивости и фазовый переход вещества при тепловых колебаниях. Поэтому в дальнейшем будем предполагать, что критичной для потери устойчивости и соответствующего фазового перехода является значение тепловой части функции (3), т.е.  $\gamma_E^*(T_m, \theta_H, \theta_N, d_f)$  в точке плавления (для молекулярного водорода  $T = T_m = 14$  K,  $\theta_H = 110$  K,  $\theta_N = 0$ ,  $d_f = 3$ ).

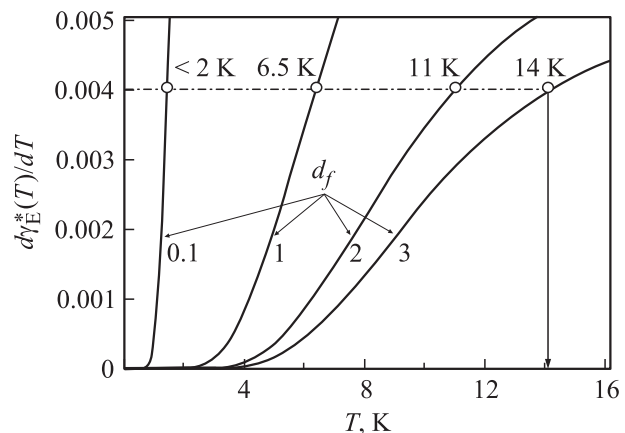
Примем в качестве „разумного предположения“, что именно это значение  $\gamma_E^*$ , полученное на основе экспериментальных данных, можно использовать для оценок температуры плавления „модифицированного“ водорода, т.е. при других значениях  $d_f$ .

Как известно, большой интерес представляет изучение возможности понижения температуры  $T_m$  плавления водорода с целью перевода его в сверхтекучее состояние. Для этого необходимо выполнение температурного условия  $T_m < T_\lambda$ , где  $T_\lambda$  — температура перехода в сверхтекучую фазу. В работе [9] для  $H_2$  приведена близкая к  $T_\lambda$  величина температуры идеального бозе-газа  $T_{\lambda 0} \approx 6$  K, а для понижения температуры  $T_m$  предложены различные способы: создание отрицательных давлений, понижение характеристической температуры  $\theta_H$  за счет введения примесей, создания квантовых возбуждений (примесей) и др. Тем не менее проблема получения сверхтекучего водорода пока не решена.

В этой связи обратим внимание на еще одну возможность создания условий, благоприятствующих переходу в сверхтекучее состояние: понижение  $T_m$  за счет уменьшения размерности  $d_f$  фонового спектра. Насколько изменится при этом первоначальное состояние водорода, в том числе величина  $a$  и характеристическая температура  $\theta_H$ , сказать трудно, хотя ее уменьшение благоприятно сказывается на приближении к состоянию сверхтекучести [9]. Поэтому ниже будем придерживаться значений  $a$  и  $\theta_H$  обычного водорода. Выполненные при этом предположении расчеты по определению зависимости  $T_m$  от  $d_f$  для „тепловой“ части выражения (3) представлены на рис. 5, где кривая 1 соответствует „невозмущенному“ состоянию  $H_2$  ( $\theta_N/\theta_H = 10^{-10}$ ,  $d_f = 3$ ), кривая 2 — водороду в нанопорах ( $\theta_N/\theta_H = 0.1$ ,  $d_f = 2$ ), а кривая 3 — в нанотрубках ( $\theta_N/\theta_H = 10^{-3}$ ,  $d_f = 1$ ). Видно, что условие  $T_m < T_\lambda$  для этих случаев не достигается, и необходимо более значительное снижение размерности — до значений  $d_f = 0.5 - 0.1$  (кривая 4),



**Рис. 5.** Предполагаемое снижение температуры плавления в модификациях молекулярного водорода по критерию  $\gamma_E^*$  ( $T_m = 14$  K,  $d_f = 3$ ). Штриховые кривые — приближение Дебая.



**Рис. 6.** Предполагаемое снижение температуры плавления в модификациях молекулярного водорода по критерию  $[d\gamma_E^*(T)/dT]_{T=14\text{ K}} = \text{const}$ .

которое может иметь место в кластерной форме вещества. Об этом свидетельствуют результаты обработки колебательных спектров крупных кластеров, исследованных в работе [10] с помощью пакета квантово-химических программ GAMESS.

Для определения состояния потери устойчивости можно предложить и другую оценку, полагая, например, что „критичной“ является не величина  $\gamma_E^*$ , обусловленная вкладом тепловой части энергии колебаний в точке  $T = T_m$ , а ее температурное изменение в этой точке, т.е. величина производной  $[d\gamma_E^*(T)/dT]_{T=T_m}$ . Результаты соответствующих расчетов представлены на рис. 6. Они свидетельствуют о приближении к условиям наступления режима сверхтекучего состояния в области значений  $d_f \approx 1$ . Можно, конечно, предлагать и другие теоретические критерии для оценки потери устойчивости в квантовых кристаллах, но это малопродуктивно. Во-первых, потому, что при определении динамических характеристик квантовых кристаллов существен учет ангармонизма. Поэтому полученные выше в гармоническом приближении численные значения  $T_m$  могут оказаться иными. Во-вторых, строгих критериев потери устойчивости нет до сих пор даже для обычных кристаллических веществ, о чем свидетельствует вековой опыт применения критерия Линдемана, не имеющего достаточных теоретических обоснований, но подтвержденного экспериментально. Поэтому реальные изменения характеристик водорода, охлаждаемого в нанопорах или нанотрубках, можно установить только путем проведения соответствующих экспериментов.

## Устойчивость неквантовых твердотельных структур

Вернемся к рассмотрению сред с малыми амплитудами нулевых колебаний и размерностями фононного спектра, изменяющимися в диапазоне  $0 \leq d_f < \infty$ . Ради общности не будем сужать этот диапазон для решения задачи об устойчивости вещества, хотя для большинства устойчивых твердотельных состояний его можно ограничить значениями  $1 \leq d_f \leq 3$ . Тем не менее следует отметить, что и область значений  $d_f \gg 1$  не является „экзотикой“, как это может показаться. Например, этот диапазон неявно присутствует в различного рода оценках и приближенных решениях задач, когда средняя частота фононного спектра  $\langle \omega \rangle \rightarrow \omega_{\max}$  и можно не учитывать вклад всех частот, кроме  $\omega_{\max}$  и близких к ней. Выражение (1) переходит в (4) только при  $d_f \rightarrow \infty$ . Хорошо известные различия в значениях низкотемпературной ( $T < \theta_H$ ) зависимости теплоемкости, даваемые при  $d_f = 3$  моделями Эйнштейна —  $C_E(T) \approx \exp(-\hbar\langle \omega \rangle/k_B T)$  и Дебая —  $C_D(T) \approx T^3$  при  $d_f \rightarrow \infty$ , полностью отсутствуют (практически, как показывают расчеты, совпадение  $C_E(T) \approx C_D(T)$  имеет место уже при  $d_f \geq 10$ ).

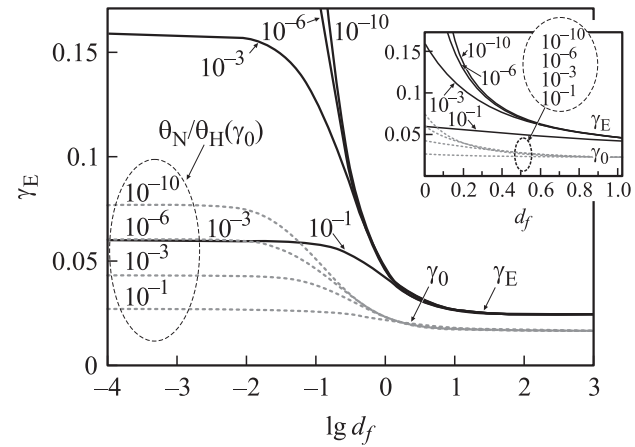


Рис. 7. Устойчивость состояний конденсированной среды в зависимости от размерности фононного спектра. На вставке — фрагмент рисунка в линейном масштабе оси  $d_f$ .

Что касается области  $d_f < 1$ , то к ней можно отнести некоторые рыхлые фрактальные структуры [11], различные кластеры, а также структуры, для которых малые размерности  $d_f$  появляются в определенном температурном диапазоне. Последнее имеет место, например, при фазовых переходах в белках [12], а также при некоторых аномалиях в поведении теплоемкости твердых тел при низких температурах [8].

Для оценки границы устойчивости по величине  $d_f$  будем пользоваться критерием Линдемана в форме (3), применяя его к „типичным“ неквантовым структурам. Пусть, например, вещество характеризуется параметрами:  $M = 100$  а. м. у.,  $T = \theta_H = 300$  К,  $a = 3.0$  Å и  $\theta_N/\theta_H = (10^{-1} - 10^{-10})$ . Тогда зависимость величины  $\gamma_E$  от  $\lg d_f$  будет иметь вид кривых, представленных на рис. 7, где пунктиром выделен вклад в  $\gamma_E$  нулевых колебаний, обозначенный  $\gamma_0$ . Видно (см. вставку на рис. 7), что в этом случае неустойчивость ( $\gamma_E > 0.1$ ) возникает при  $d_f \leq 0.3$  для массивных ( $\theta_N/\theta_H = 10^{-10}$ ) образцов и ее граница смещается в сторону меньших значений  $d_f$  в зависимости от величины обрезания  $\theta_N/\theta_H$  фононного спектра. Если изменять массу атомов  $M = (50 - 200$  а. м. у.) и температуру (например,  $T_1 = \theta_H = 300$  К,  $T_2 = 0.1\theta_H = 30$  К), то результаты аналогичных расчетов по определению величины  $d_f$ , при

Значения показателя  $d_f$ , при которых достигается критерий Линдемана в динамической модели Эйнштейна.  $\theta_H = 300$  К,  $a = 3$  Å

$M$ , а. м. у.	$\theta_N/\theta_H$					
	$10^{-3}$		$10^{-6}$		$10^{-10}$	
	Температуры $T_1, T_2$ , К					
	300	30	300	30	300	30
50	0.465	0	0.495	0.077	0.493	0.112
100	0.225	0	0.297	0.007	0.305	0.059
200	0.055	0	0.178	0	0.195	0.019

которой достигается значение  $\gamma_E = 0.1$ , можно свести в таблицу.

Приведенные в таблице данные свидетельствуют о том, что в указанном диапазоне изменения параметров  $M$ ,  $T$  и  $\theta_N/\theta_H$  твердотельная структура устойчива, если  $1 \leq d_f \leq \infty$ , а в области значений  $0 \leq d_f \leq 1$  среда, вообще говоря, неустойчива. При этом, согласно критерию Линдемана, граница устойчивости по  $d_f$  смещается в сторону меньших значений размерности при увеличении массы атомов  $M$ , уменьшении размеров  $L(\theta_N/\theta_H \rightarrow 1)$  тела, а также при снижении температуры.

## Заключение

1. Показано, что при расчетах амплитуд колебаний атомов в упругой среде применение дебаевского приближения приводит к низкочастотной расходимости, если показатель размерности фононного спектра  $d_f < 2$ . Эйнштейновский подход, основанный на использовании средней частоты фононного спектра, свободен от этого недостатка и применим при любых значениях показателя  $d_f$ .

2. На примере задачи о возможности получения водорода в сверхтекучем состоянии показано, что с помощью изменения показателя  $d_f$ , отражающего структуру фононного спектра, можно влиять на физические характеристики вещества, например его температуру плавления.

3. С помощью критерия Линдемана определены границы устойчивости состояний конденсированных сред с показателями размерности фононного спектра в диапазоне значений  $0 \leq d_f < \infty$ .

## Список литературы

- [1] Тарасов В.В. Проблемы физики стекла. М.: Стройиздат, 1979. 256 с.
- [2] Alexander S., Laermans C., Orbach R., Rosenberg H.M. // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 28. P. 4615–4619.
- [3] Якубов Т.С. // ДАН СССР. 1990. Т. 310. С. 145.
- [4] Кузнецов В.М., Хромов В.И. // ЖТФ. 2008. Т. 78. Вып. 11. С. 11–16.
- [5] Кузнецов В.М., Хромов В.И. // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. Вып. 11. С. 98–103.
- [6] Кузнецов В.М., Хромов В.И. // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. Вып. 10. С. 66–72.
- [7] Стишов С.М. // УФН. 1974. Т. 114. Вып. 1. С. 3–40.
- [8] Суздаев И.П. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: Комкнига, 2005. 289 с.
- [9] Гейликман Б.Т. // ФТТ. 1973. Т. 15. Вып. 11. С. 3293–3297.
- [10] Егоров Б.В., Коцеев А.В., Маркачёв Ю.Е. // Мат. моделирование. 2002. Т. 14. С. 109–115.
- [11] Уэбман И. // Фракталы в физике. М.: Мир, 1988. С. 488–497.
- [12] Кузнецов В.М., Хромов В.И. Труды 52-й науч. конф. МФТИ. 2009. Ч. VI. С. 80–81.