

MIT Açık Ders Malzemeleri

<http://ocw.mit.edu>

8.333 İstatistiksel Mekanik I: Parçacıkların İstatistiksel Mekaniği

2007 Güz

Bu materyallerden alıntı yapmak veya Kullanım Şartları hakkında bilgi almak için <http://ocw.mit.edu/terms> ve <http://tuba.acikders.org.tr> sitesini ziyaret ediniz.

## VI. Kuantum İstatistiksel Mekaniği

Klasik istatistiksel mekaniğin uygulanabilirliğinde kısıtlamalar mevcuttur. Düşük sıcaklıklarda kuantum mekaniği etkilerini dahil etme ihtiyacı açıkça ortaya çıkar. Bu bölümde, öncelikle moleküler gazların ve katıların ısı sığaları bağlamında klasik sonuçlardaki hataları ve kara cisim ışımasındaki morötesi felaketini göstereceğiz. Sonrasında kuantum kavramlarını kullanarak istatistiksel mekaniği yeniden formüle edeceğiz.

### VI. Seyreltik Çok Atomlu Gazlar

Çok atomlu moleküllerden oluşan bir seyreltik gaz düşünelim.  $n$  atomun her bir molekülü için Hamiltonyen şöyledir,

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{i=1}^n \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \mathcal{V}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n), \quad (\text{VI.1})$$

burada,  $\mathcal{V}$  potansiyel enerjisi moleküler bağlardaki tüm bilgileri içerir. Basitlik açısından, moleküldeki tüm atomların aynı kütleyle sahip olduğunu varsaydık. Kütleler farklı ise,  $\vec{q}_i$  koordinatlarını  $\sqrt{m_i/m}$  ile (ve momentumları  $\sqrt{m/m_i}$  ile) yeniden ölçeklendirerek Hamiltonyeni yukarıdaki şekle getirebiliriz; burada  $m_i$ ,  $i$ inci atomun kütlesidir. Moleküller *arasındaki* etkileşimleri göz ardı edersek, bir seyreltik gazın üleşim fonksiyonu şu şekildedir,

$$Z(N) = \frac{Z_1^N}{N!} = \frac{1}{N!} \left\{ \int \prod_{i=1}^n \frac{d^3\vec{p}_i d^3\vec{q}_i}{h^3} \exp \left[ -\beta \sum_{i=1}^n \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \beta \mathcal{V}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n) \right] \right\}^N. \quad (\text{VI.2})$$

Molekülü birarada tutan kimyasal bağlar genellikle oldukça kuvvetlidir (enerjisi elektron volt mertebesinde). İlgili ayrışma sıcaklıklarından ( $\approx 10^4 K$ ) çok daha küçük olan tipik erişilebilir sıcaklıklarda, molekülün iyi tanımlanmış bir şekli vardır ve sadece küçük deformasyonlara uğrar. Bu deformasyonların tek parçacık üleşim fonksiyonu  $Z_1$ 'ye katkısı şöyle hesaplanabilir,

- ilk adım,  $\mathcal{V}$  potansiyelini minimize ederek  $(\vec{q}_1^*, \dots, \vec{q}_n^*)$  denge pozisyonlarının bulunmasıdır.
- Daha sonra denge etrafındaki küçük deformasyonların enerji maliyeti  $\vec{q}_i = \vec{q}_i^* + \vec{u}_i$  yazılarak ve  $\vec{u}$ 'nun kuvvetleri cinsinden bir açılım yaparak elde edilir,

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}^* + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \sum_{\alpha,\beta=1}^3 \frac{\partial^2 \mathcal{V}}{\partial q_{i,\alpha} \partial q_{j,\beta}} u_{i,\alpha} u_{j,\beta} + \mathcal{O}(u^3). \quad (\text{VI.3})$$

(Burada,  $i, j = 1, \dots, n$ , atomları tanımlar ve  $\alpha, \beta = 1, 2, 3$  belirli bir bileşeni nitelendirir). Açılım kararlı bir denge konfigürasyonu etrafında olduğu için, denklem (VI.3)'de birincil türevler eksiktir ve ikincil türevlerin matrisi *pozitif tanımlıdır*, yani sadece negatif olmayan özdeğerlere sahiptir.

- (c) Molekülün *normal modları*  $3n \times 3n$  boyutundaki  $\partial^2 \mathcal{V} / \partial q_{i,\alpha} \partial q_{j,\beta}$  matrisini köşegenleştirerek elde edilir. Ortaya çıkan  $3n$  tane  $K_s$  özdeğerleri, her bir modun *sertliğini* gösterir. Değişkenleri, başlangıçtaki  $\{\vec{u}_i\}$  deformasyonlardan, normal modların  $\{\tilde{u}_s\}$  genliklerine değiştirebiliriz. İlgili eşlenik momentumlar  $\tilde{p}_s = m\dot{\tilde{u}}_s$  dir.  $\{\vec{u}_i\}$ 'den  $\{\tilde{u}_s\}$ 'ya dönüşüm *birimsel* olduğu için (vektör uzunluğu korunarak),  $\sum_i \vec{p}_i^2 = \sum_s \tilde{p}_s^2$  ve ortaya çıkan deformasyon Hamiltonyeninin kuadratik kısmı şöyledir,

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{V}^* + \sum_{s=1}^{3n} \left[ \frac{1}{2m} \tilde{p}_s^2 + \frac{K_s}{2} \tilde{u}_s^2 \right]. \quad (\text{VI.4})$$

(Faz uzayında integral ölççeğini koruduklarından,  $\prod_{i,\alpha} du_{i,\alpha} dp_{i,\alpha} = \prod_s d\tilde{u}_s d\tilde{p}_s$ , bu tip dönüşümler aynı zamanda kanoniktir.)

Her bir molekülün ortalama enerjisi yukarıdaki Hamiltonyenin beklenen değeridir. Her bir kuadratik serbestlik derecesi klasik olarak enerjiye bir  $k_B T / 2$  faktörü katkısı yaptığı için,

$$\langle \mathcal{H}_1 \rangle = \mathcal{V}^* + \frac{3n + m}{2} k_B T. \quad (\text{VI.5})$$

Sadece sonlu sertlikteki modlar potansiyel enerji depolayabilirler ve  $m$ , sıfırdan farklı  $K_s$  ye sahip bu tip modların sayısı olarak tanımlanır. Aşağıdaki potansiyel simetrileri bazı özdeğerleri sıfır yapar:

(a) *Öteleme simetrisi*:  $\mathcal{V}(\vec{q}_1 + \vec{c}, \dots, \vec{q}_n + \vec{c}) = \mathcal{V}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n)$  olduğu için,  $\vec{Q} = \sum_{\alpha} \vec{q}_{\alpha} / n$  kütle merkezi koordinatında enerji depolanmaz, yani  $\mathcal{V}(\vec{Q}) = \mathcal{V}(\vec{Q} + \vec{c})$  ve ilgili üç  $K_{\text{öteleme}}$  değeri sıfırdır.

(b) *Dönme simetrisi*: Molekülün dönmeleri ile ilgili potansiyel enerji de yoktur ve ilgili sertlik için  $K_{\text{dön}} = 0$ 'dır. Dönel modların sayısı,  $0 \leq r \leq 3$ , molekülün şekline bağlıdır; örneğin, çubuk şeklindeki bir molekülde eksene paralel bir dönme yeni bir konfigürasyona neden olmadığı için  $r = 2$ 'dir.

Matrisin geri kalan  $m = 3n - 3 - r$  özvektörleri sıfır olmayan sertliğe sahip olup *titreşimsel* normal modlara karşılık gelir. Denklem (VI.5),’den molekül başına düşen enerji şöyledir,

$$\langle \mathcal{H}_1 \rangle = \frac{6n - 3 - r}{2} k_B T. \quad (\text{VI.6})$$

İlgili ısı sığaları,

$$C_V = \frac{(6n - 3 - r)}{2} k_B, \quad \text{and} \quad C_P = C_V + k_B = \frac{(6n - 1 - r)}{2} k_B, \quad (\text{VI.7})$$

sıcaktan bağımsızdır.  $\gamma = C_P/C_V$  oranı adyabatik işlemlerle kolayca ölçülebilir. Yukarıdaki sav temelinde beklenen  $\gamma$  değerleri bir takım farklı moleküller için aşağıda verilmiştir.

Tek atomlu	He	$n = 1$	$r = 0$	$\gamma = 5/3$
İki atomlu	O <sub>2</sub> veya CO	$n = 2$	$r = 2$	$\gamma = 9/7$
Doğru. üç atomlu	O-C-O	$n = 3$	$r = 2$	$\gamma = 15/13$
Düzlem. üç atomlu	H/O\H	$n = 3$	$r = 3$	$\gamma = 14/12 = 7/6$
Dört atomlu	NH <sub>3</sub>	$n = 4$	$r = 3$	$\gamma = 20/18 = 10/9$

Seyreltik gazların ısı sığası ölçümleri, yukarıdaki tahminlerle örtüşmez. Örneğin, oksijen gibi iki atomlu bir gaz için  $C_V/k_B = 7/2$  değeri, ancak birkaç bin Kelvin üzerindeki derecelerde gözlenir. Oda sıcaklıklarında, 5/2’lik daha düşük bir değer gözlenirken, 10<sup>0</sup>K civarı gibi daha da düşük sıcaklıklarda bu değer 3/2’ye düşer. Düşük sıcaklıktaki değer, tek atomlu bir gazinkine benzer ve dönel ve titreşimsel serbestlik derecelerinde enerji depolaması olmadığını gösterir. İzin verilen enerji düzeyleri kuantumlaştırılırsa bu gözlemler açıklanabilir.

• **Titreşimsel modlar:** İki atomlu bir molekülde  $K \equiv m\omega^2$  sertliğinde bir titreşimsel mod bulunur, burada  $\omega$ , salınım frekansını gösterir. Bu mod için klasik üleşim fonksiyonu şöyledir,

$$\begin{aligned} Z_{\text{vib}}^c &= \int \frac{dp dq}{h} \exp \left[ -\beta \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \right) \right] \\ &= \frac{1}{h} \sqrt{\left( \frac{2\pi m}{\beta} \right) \left( \frac{2\pi}{\beta m \omega^2} \right)} = \frac{2\pi}{h\beta\omega} = \frac{k_B T}{\hbar\omega}, \end{aligned} \quad (\text{VI.8})$$

burada,  $\hbar = h/2\pi$ . Bu modda depolanan ilgili enerji,

$$\langle \mathcal{H}_{\text{vib}} \rangle^c = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\partial \ln(\beta \hbar \omega)}{\partial \beta} = \frac{1}{\beta} = k_B T, \quad (\text{VI.9})$$

kinetik ve potansiyel serbestlik dereceleri başına  $k_B T/2$ 'den gelir. Kuantum mekaniğinde izin verilen enerji değerleri  $n = 0,1,2, \dots$  ile şöyle kuantumlanır,

$$\mathcal{H}_{\text{vib}}^q = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{VI.10})$$

Her bir ayırık düzeyin olasılığının Boltzmann ağırlığı ile orantılı (daha sonra doğrulanacaktır) olduğunu varsayarsak, bir normalleştirme çarpanı mevcuttur

$$Z_{\text{vib}}^q = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}. \quad (\text{VI.11})$$

Yüksek sıcaklık limiti,

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} Z_{\text{vib}}^q = \frac{1}{\beta\hbar\omega} = \frac{k_B T}{\hbar\omega},$$

denklem (VI.8)'ye denk düşer (kısmen klasik faz uzayı ölçümü olarak  $h$  seçimine bağlı olarak).

Titreşimsel enerjinin beklenen değeri şöyledir,

$$E_{\text{vib}}^q = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\partial}{\partial \beta} \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}. \quad (\text{VI.12})$$

İlk terim, sıfır sıcaklıktaki taban durumunda bile mevcut olan *kuantum dalgalanmalarının* enerji maliyetidir. İkinci terim ise *termal dalgalanmalara* bağlı ek enerjii tanımlar. Ortaya çıkan ısı sığası,

$$C_{\text{vib}}^q = \frac{dE_{\text{vib}}^q}{dT} = k_B \left( \frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^2}, \quad (\text{VI.13})$$

$k_B$ 'nin sadece  $T \gg \theta_{\text{vib}}$  sıcaklıklarında klasik değerini elde eder; burada  $\theta_{\text{vib}} = \hbar\omega/k_B$  titreşimsel enerji kuantumu ile ilgili karakteristik bir sıcaklıktır.  $T \ll \theta_{\text{vib}}$  için  $C_{\text{vib}}^q$ ,  $\exp(-\theta_{\text{vib}}/T)$  şeklinde sıfıra gider.  $\theta_{\text{vib}}$ 'nin tipik değerleri  $10^3$  ile  $10^4$  Kelvin aralığındadır; bu da ısı sığasının klasik değerinin neden sadece daha yüksek sıcaklıklarda gözlemlendiğinin açıklamasıdır.

• **Dönel Modlar:** İki atomlu moleküllerin ısı sığalarındaki düşük sıcaklık anomalisini açıklamak için dönel serbestlik derecelerinin kuantumlaşmasını incelememiz gerekir. Klasik olarak, iki atomlu bir molekülün yönelimi  $\theta$  ve  $\phi$  olmak üzere iki açı ile belirlenir ve Lagrangianı (kinetik enerjiye eşit) şöyledir,

$$\mathcal{L} = \frac{I}{2} \left( \dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\phi}^2 \right), \quad (\text{VI.14})$$

burada,  $I$  eylemsizlik momentidir. Eşlenik momentumlar,

$$p_\theta = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = I\dot{\theta}, \quad p_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = I \sin^2 \theta \dot{\phi}, \quad (\text{VI.15})$$

cinsinden dönüşler için Hamiltonyen şu şekildedir,

$$\mathcal{H}_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} \left( p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right) \equiv \frac{\vec{L}^2}{2I}, \quad (\text{VI.16})$$

burada,  $\vec{L}$  açısal momentumdur. Klasik üleşim fonksiyonundan,

$$\begin{aligned} Z_{\text{rot}}^c &= \frac{1}{h^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} dp_\theta dp_\phi \exp \left[ -\frac{\beta}{2I} \left( p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right) \right] \\ &= \left( \frac{2\pi I}{\beta} \right) \left( \frac{4\pi}{h^2} \right) = \frac{2Ik_B T}{h^2}, \end{aligned} \quad (\text{VI.17})$$

depolanan enerji, iki serbestlik derecesi için beklendiği gibi şu şekildedir,

$$\langle E_{\text{rot}} \rangle^c = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left( \frac{\beta h^2}{2I} \right) = k_B T, \quad (\text{VI.18})$$

Kuantum mekaniğinde, açısal momentumun izin verilen değerleri  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  olmak üzere  $\vec{L}^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$  şeklinde kuantumlanır ve her bir durum  $2\ell + 1$ 'lik (seçilmiş bir yön boyunca,  $L_z = -\ell, \dots, +\ell$ ) yozlaşmaya sahiptir. Bu durumda bu düzeyler için şöyle bir üleşim fonksiyonu elde edilir,

$$Z_{\text{rot}}^q = \sum_{\ell=0}^{\infty} \exp \left[ -\frac{\beta \hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2I} \right] (2\ell + 1) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \exp \left[ -\frac{\theta_{\text{rot}} \ell(\ell + 1)}{T} \right] (2\ell + 1), \quad (\text{VI.19})$$

burada,  $\theta_{\text{rot}} = \hbar^2 / (2Ik_B)$  dönel enerji kuantumuna ilişkin karakteristik bir sıcaklıktır. Toplam genel olarak analitik bir biçimde hesaplanamazken, yüksek ve düşük sıcaklık limitlerini inceleyebiliriz:

(a)  $T \gg \theta_{\text{rot}}$  için, denklem (VI.19)'daki terimler yavaşça değişir ve toplam yerine şu integral alınabilir

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} Z_{\text{rot}}^q &= \int_0^\infty dx (2x + 1) \exp \left[ -\frac{\theta_{\text{rot}} x(x + 1)}{T} \right] \\ &= \int_0^\infty dy e^{-\theta_{\text{rot}} y/T} = \frac{T}{\theta_{\text{rot}}} = Z_{\text{rot}}^c, \end{aligned} \quad (\text{VI.20})$$

yani, denklem (VI.17)'nin klasik sonucu elde edilir.

(b)  $T \ll \theta_{\text{rot}}$  için ilk birkaç terim toplamı tayar eder ve

$$\lim_{T \rightarrow \infty} Z_{\text{rot}}^q = 1 + 3e^{-2\theta_{\text{rot}}/T} + \mathcal{O}(e^{-6\theta_{\text{rot}}/T}), \quad (\text{VI.21})$$

şöyle bir enerjiye yol açar

$$E_{\text{rot}}^q = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \approx -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[ 1 + 3e^{-2\theta_{\text{rot}}/T} \right] \approx 6k_B \theta_{\text{rot}} e^{-2\theta_{\text{rot}}/T}. \quad (\text{VI.22})$$

Ortaya çıkan ısı sığası düşük sıcaklıklarda şu şekilde sıfıra gider,

$$C_{\text{rot}} = \frac{dE_{\text{rot}}^q}{dT} = 3k_B \left( \frac{2\theta_{\text{rot}}}{T} \right)^2 e^{-2\theta_{\text{rot}}/T} + \dots \quad (\text{VI.23})$$

Tipik  $\theta_{\text{rot}}$  değerleri, 1 ve  $10^0 K$  arasındadır; bu durum ısı sığası ölçümlerindeki düşük sıcaklık davranışını açıklar. Çok düşük sıcaklıklarda, tek katkı kütle merkezinin kinetik enerjisinden gelir ve molekül tek atomlu bir parçacık gibi davranır. (Isı sığası, özdeş parçacıklar bağlamında tartışılacağı gibi, kuantum istatistiklerine bağlı olarak daha da düşük sıcaklıklarda sıfır olur.)

## VI. B Bir Katının Titreşimleri

Parçacıklar arasındaki çekici etkileşmeler, önce düşük sıcaklıklarda gaz halden sıvı hale yoğunlaşmaya neden olur ve sonunda daha da düşük sıcaklıklarda donarak katı hale dönüşmeye yol açar. Termodinamiğini tartışma amacıyla, katı madde,  $n = N \gg 1$  atomlu, denklem (VI.1)'e benzer bir Hamiltonyene tabi çok büyük bir molekül olarak değerlendirilebilir. Bu durumda bir önceki bölümde belirtilmiş olan adımları takip edebiliriz.

(a) Katı maddenin klasik taban durumu konfigürasyonu  $\mathcal{V}$  potansiyelini minimize ederek elde edilir. Hemen hemen her durumda, minimum enerji, bir *örgü* oluşturan, periyodik bir atom düzenine karşılık gelir.  $\hat{a}, \hat{b}$ , ve  $\hat{c}$  *taban vektörleri* cinsinden, basit bir kristaldeki atomların konumları şöyle verilir,

$$\vec{q}^*(\ell, m, n) = \left[ \ell \hat{a} + m \hat{b} + n \hat{c} \right] \equiv \vec{r}, \quad (\text{VI.24})$$

Burada,  $\{\ell, m, n\}$  bir tamsayı üçlüsüdür.

(b) Sonlu sıcaklıklarda, atomlar ufak deformasyonlara uğrayabilir

$$\vec{q}_{\vec{r}} = \vec{r} + \vec{u}(\vec{r}), \quad (\text{VI.25})$$

bunun potansiyel enerjideki maliyet şöyledir,

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}^* + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{r}, \vec{r}' \\ \alpha, \beta}} \frac{\partial^2 \mathcal{V}}{\partial q_{\vec{r}, \alpha} \partial q_{\vec{r}', \beta}} u_{\alpha}(\vec{r}) u_{\beta}(\vec{r}') + O(u^3). \quad (\text{VI.26})$$

(c) Bir kristalin normal modlarının bulunması, kristalin *öteleme simetrisi* ile oldukça kolaylaşır. Özellikle ikincil türevlerin matrisi sadece iki noktanın *bağlı* konumuna bağlıdır

$$\frac{\partial^2 \mathcal{V}}{\partial q_{\vec{r},\alpha} \partial q_{\vec{r}',\beta}} = K_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (\text{VI.27})$$

Bir *Fourier tabanı* kullanarak, matrisi en azından kısmen köşegenleştirmek için böyle bir simetriden faydalanmak her zaman mümkündür,

$$u_{\alpha}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{N}} \tilde{u}_{\alpha}(\vec{k}). \quad (\text{VI.28})$$

Toplam, bir *Brillouin bölgesi* içindeki  $\vec{k}$  dalga vektörlerine kısıtlıdır. Örneğin, kenarı  $a$  olan bir kübik örgüde  $\vec{k}$ 'nin her bir bileşeni,  $[-\pi/a, \pi/a]$  aralığındadır. Bunun nedeni, bu aralık dışındaki dalga vektörlerinin  $(k_x + 2\pi m/a)(na) = k_x(na) + 2m\pi$  olduğundan ek bir bilgi taşımaması ve  $2\pi$ 'nin katı olan herhangi bir fazın denklem (VI.28)'deki toplam üzerinde etki yapmamasıdır. Fourier modları cinsinden, deformasyonların potansiyel enerjisi şöyledir

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}^* + \frac{1}{2N} \sum_{\substack{(\vec{r},\vec{r}'),(\vec{k},\vec{k}') \\ \alpha,\beta}} K_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tilde{u}_{\alpha}(\vec{k}) e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} \tilde{u}_{\beta}(\vec{k}'). \quad (\text{VI.29})$$

Şu düzenlemeyi yaparak,

$$\vec{r} = \vec{R} + \frac{\vec{\rho}}{2}, \quad \text{and} \quad \vec{r}' = \vec{R} - \frac{\vec{\rho}}{2}.$$

değişkenleri bağlı ve kütle merkezi koordinatlarına değiştirebiliriz

$$\vec{\rho} = \vec{r} - \vec{r}', \quad \text{and} \quad \vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2},$$

Bu durumda denklem (VI.29) aşağıdaki gibi sadeleşir,

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}^* + \frac{1}{2N} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}' \\ \alpha,\beta}} \left( \sum_{\vec{R}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{R}} \right) \left( \sum_{\vec{\rho}} K_{\alpha\beta}(\vec{\rho}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{\rho}/2} \tilde{u}_{\alpha}(\vec{k}) \tilde{u}_{\beta}(\vec{k}') \right). \quad (\text{VI.30})$$

İlk parantezdeki toplam  $N\delta_{\vec{k}+\vec{k}',0}$  olduğu için

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \mathcal{V}^* + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\alpha,\beta} \left[ \sum_{\vec{\rho}} K_{\alpha\beta}(\vec{\rho}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} \right] \tilde{u}_{\alpha}(\vec{k}) \tilde{u}_{\beta}(-\vec{k}) \\ &= \mathcal{V}^* + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\alpha,\beta} \tilde{K}_{\alpha\beta}(\vec{k}) \tilde{u}_{\alpha}(\vec{k}) \tilde{u}_{\beta}(\vec{k})^*, \end{aligned} \quad (\text{VI.31})$$



Burada,  $\tilde{K}_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \sum_{\vec{\rho}} K_{\alpha\beta}(\vec{\rho}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{\rho})$  ve  $\tilde{u}_{\beta}(\vec{k})^* = \tilde{u}_{\beta}(-\vec{k})$ ,  $\tilde{u}_{\beta}(\vec{k})$  nın karmaşık eşleniğidir.

Bu nedenle farklı Fourier modları kuadratik düzeyde ayrışır ve ikincil türevlerin  $3N \times 3N$  boyutlu matrisini köşegenleştirme işi,  $3 \times 3$  boyutlu  $\tilde{K}_{\alpha\beta}(\vec{k})$  matrisinin her bir  $\vec{k}$  için ayrı ayrı köşegenleştirilmesine indirgenir.  $\tilde{K}_{\alpha\beta}$ 'nin formu, kristalin nokta grup simetrisi ile daha da kısıtlanır. Bu kısıtlamaların tartışılması bu bölümün amaçları arasında yer almamaktadır ve basitlik açısından  $\tilde{K}_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \delta_{\alpha,\beta} \tilde{K}(\vec{k})$ 'nin hali hazırda köşegenleşmiş olduğunu varsayacağız. (İzotropik bir madde için bu, hacim ve kayma modülleri arasında özel bir ilişkiyi gerektirir.)

Deformasyonların kinetik enerjisi şöyledir,

$$\sum_{i=1}^N \frac{m}{2} \dot{q}_i^2 = \sum_{\vec{k}, \alpha} \frac{m}{2} \dot{u}_{\alpha}(\vec{k}) \dot{u}_{\alpha}(\vec{k})^* = \sum_{\vec{k}, \alpha} \frac{1}{2m} \tilde{p}_{\alpha}(\vec{k}) \tilde{p}_{\alpha}(\vec{k})^*, \quad (\text{VI.32})$$

burada,

$$\tilde{p}_{\alpha}(\vec{k}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_{\alpha}(\vec{k})} = m \dot{u}_{\alpha}(\vec{k}),$$

$\tilde{u}_{\alpha}(\vec{k})$ 'ya eşlenik momentumdur. Ortaya çıkan deformasyon Hamiltonyeni

$$\mathcal{H} = \mathcal{V}^* + \sum_{\vec{k}, \alpha} \left[ \frac{1}{2m} |\tilde{p}_{\alpha}(\vec{k})|^2 + \frac{\tilde{K}(\vec{k})}{2} |\tilde{u}_{\alpha}(\vec{k})|^2 \right], \quad (\text{VI.33})$$

$\omega_{\alpha}(\vec{k}) = \sqrt{\tilde{K}(\vec{k})/m}$  frekanslarına sahip  $3N$  bağımsız salıngaçları tanımlar.

Klasik bir hesapta, sıfırdan farklı sertliğe sahip her bir harmonik salıngaç, katının içsel enerjisine  $k_B T$  katkısında bulunur.  $3N$  salıngacın en fazla 6 tanesinin (kristalin tekdüze ötelenme ve dönmelerine karşılık gelen) sıfır sertlikte olması beklenir. Bu nedenle  $1/N$  mertebesine kadar kapsamsal olmayan düzeltmelere göre, (VI.33) Hamiltonyenine ilişkin klasik içsel enerji  $3N k_B T$ 'dir ve bu atom başına  $3k_B$ 'lik sıcaklıktan bağımsız ısı sığasına yol açar. Esasen, ölçülen ısı sığası düşük sıcaklıklarda sıfıra gider. Yine, bir önceki bölümde tartışıldığı gibi, bu gözlemi her bir salıngacın enerji düzeylerinin kuantumlaşması ile ilişkilendirebiliriz. Her bir harmonik modun ayrı ayrı kuantumlaşması Hamiltonyenin aşağıdaki izin verilen değerlerini verir,

$$\mathcal{H}^q = \mathcal{V}^* + \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}) \left( n_{\vec{k}, \alpha} + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{VI.34})$$

burada  $\{n_{\vec{k}, \alpha}\}$  tamsayılar kümesi, salıngaçların kuantum mikrodurumunu tanımlar. Salıngaçlar bağımsız olduğundan üleşim fonksiyonları,

$$Z^q = \sum_{\{n_{\vec{k}, \alpha}\}} e^{-\beta \mathcal{H}^q} = e^{-\beta E_0} \prod_{\vec{k}, \alpha} \sum_{n_{\vec{k}, \alpha}} e^{-\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}) n_{\vec{k}, \alpha}} = e^{-\beta E_0} \prod_{\vec{k}, \alpha} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k})}} \right], \quad (\text{VI.35})$$

denklem (VI.11) gibi tekil salıngaç üleşim fonksiyonlarının çarpımıdır. ( $E_0$ ,  $\mathcal{V}^*$ 'in yanında tüm salıngaçların taban durum enerjilerini içerir.)

İçsel enerji şu şekildedir,

$$E(T) = \langle \mathcal{H}^q \rangle = E_0 + \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}) \langle n_{\alpha}(\vec{k}) \rangle, \quad (\text{VI.36})$$

burada, ortalama *doluluk sayıları* şu şekilde verilir,

$$\begin{aligned} \langle n_{\alpha}(\vec{k}) \rangle &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}) n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}) n}} = - \frac{\partial}{\partial (\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k}))} \ln \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k})}} \right) \\ &= \frac{e^{-\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k})}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k})}} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\alpha}(\vec{k})} - 1}. \end{aligned} \quad (\text{VI.37})$$

Kuantum mekaniksel etkileri kapsama yolunda ilk girişim olarak, tüm salıngaçların aynı  $\omega_E$  frekansına sahip olduklarının varsayıldığı *Einstein modelini* alabiliriz. Bu model, ideal konumlarına  $\bar{K} = \partial^2 v / \partial q^2 = m \omega_E^2$  sertlikle yaylarla sabitlenmiş atomlara karşılık gelir. Ortaya çıkan içsel enerji,

$$E = E_0 + 3N \frac{\hbar \omega_E e^{-\beta \hbar \omega_E}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_E}}, \quad (\text{VI.38})$$

ve ısı sığası,

$$C = \frac{dE}{dT} = 3N k_B \left( \frac{T_E}{T} \right)^2 \frac{e^{-T_E/T}}{(1 - e^{-T_E/T})^2}, \quad (\text{VI.39})$$

basitçe tek bir salıngacınkilerle orantılıdır (denklem (VI.12) ve (VI.13)). Karakteristik bir  $T_E = \hbar \omega_E / k_B$  sıcaklığı ile, ısı sığasının üstel olarak sıfıra düşüşü mevcuttur. Ancak, deneysel olarak ölçülmüş olan ısı sığasındaki sıfıra düşüş  $T^3$  şeklinde çok daha yavaş olur.

Bu çelişki, düşük sıcaklıklarda ısı sığasına yapılan en büyük katkının, en kolay uyarılan en düşük frekanslı salıngaçlardan sağlandığını vurgulayan *Debye modeli* ile çözülür. Buna karşılık olarak, en düşük enerji modları,  $k = |\vec{k}|$  en küçük dalga

vektörlerine veya  $\lambda = 2\pi/k$  en uzun dalga vektörlerine tekabül eder.  $\vec{k} = 0$  olan modlar örgünün yalın ötelenmesini gösterir ve sıfır sertliğe sahiptir. Süreklilik itibariyle  $\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \tilde{K}(\vec{k}) = 0$  olmasını bekleriz ve kristal simetrisini göz ardı edersek, küçük dalga vektörlerinde  $\tilde{K}(\vec{k})$  açılımı şu şekli alır

$$\tilde{K}(\vec{k}) = Bk^2 + \mathcal{O}(k^4).$$

Reel uzaydaki  $K(\vec{r} - \vec{r}') = K(\vec{r}' - \vec{r})$ 'den kaynaklanan  $\tilde{K}(\vec{k}) = \tilde{K}(-\vec{k})$  eşitliği açılımda tek kuvvetli terimlerin bulunmamasına yolaçar. Uzun dalga boylarına karşılık gelen frekanslar şöyledir,

$$\omega(\vec{k}) = \sqrt{\frac{Bk^2}{m}} = vk, \quad (\text{VI.40})$$

burada,  $v = \sqrt{B/m}$ , kristaldeki ses hızıdır. (Gerçek bir maddede,  $\tilde{K}_{\alpha\beta}$ ,  $\delta_{\alpha\beta}$  ile orantılı değildir ve sesin farklı polarizasyonları farklı hızlara sahiptir.)

Titreşimsel modların kuantumuna genellikle *fonon* adı verilir. Denklem (VI.40)'daki dağılım ilişkisini kullanarak, fononların içsel enerjiye katkılarını şöyle gösterebiliriz,

$$\langle \mathcal{H}^q \rangle = E_0 + \sum_{\vec{k}, \alpha} \frac{\hbar v k}{e^{\beta \hbar v k} - 1}. \quad (\text{VI.41})$$

$L_x \times L_y \times L_z$  boyutlarına sahip bir kutudaki periyodik sınır koşulları ile izin verilen dalga vektörleri şöyledir,

$$\vec{k} = \left( \frac{2\pi n_x}{L_x}, \frac{2\pi n_y}{L_y}, \frac{2\pi n_z}{L_z} \right), \quad (\text{VI.42})$$

burada,  $n_x$ ,  $n_y$ , ve  $n_z$  tamsayıdır. Büyük boy limitinde, bu modlar çok yoğun biçimde toplanmıştır ve bir  $d^3\vec{k}$  hacim elemanındaki mod sayısı şöyledir,

$$d\mathcal{N} = \frac{dk_x}{2\pi/L_x} \frac{dk_y}{2\pi/L_y} \frac{dk_z}{2\pi/L_z} = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3\vec{k} \equiv \rho d^3\vec{k}. \quad (\text{VI.43})$$

Faz uzayı yoğunluğu  $\rho$  kullanılarak, izin verilen dalga vektörleri üzerinden her türlü toplam, şu şekilde bir integrale değiştirilebilir,

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) = \int d^3\vec{k} \rho f(\vec{k}). \quad (\text{VI.44})$$

Böylece denklem (VI.41) şu şekilde yeniden yazılabilir,

$$E = E_0 + 3V \int^{\text{B.Z.}} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar v k}{e^{\beta\hbar v k} - 1}, \quad (\text{VI.45})$$

burada, integral Brillouin bölgesinin hacmi üzerinden alınır ve 3 çarpanı üç polarizasyon için aynı ses hızını varsaymaktan gelir.

Brillouin bölgesinin şekline bağlılığı nedeniyle, denklem (VI.45)'deki enerji için basit bir kapalı ifade vermek mümkün değildir. Ancak, yüksek ve düşük sıcaklık limitlerini inceleyebiliriz. İki limiti birbirinden ayıran karakteristik sıcaklık;

$$T_D = \frac{\hbar v k_{\text{max}}}{k_B} \approx \frac{\hbar v}{k_B} \cdot \frac{\pi}{a}, \quad (\text{VI.46})$$

bölgenin sınırındaki yüksek frekans modlarına karşılık gelir.  $T \gg T_D$  için tüm modlar klasik biçimde davranır. Denklem (VI.45)'in integrandı sadece  $k_B T$ 'dir ve modların toplam sayısı  $3N = 3V \int^{\text{B.Z.}} d^3\vec{k}/(2\pi)^3$  olduğu için  $E(T) = E_0 + 3Nk_B T$  ve  $C = 3Nk_B$  klasik sonuçları bulunur.  $T \ll T_D$  için ise, denklem (VI.45)'in paydasındaki  $\exp(\beta\hbar v k)$  terimi Brillouin bölgesi sınırında çok büyüktür. İntegrale en önemli katkı küçük  $k$ 'den gelir ve integral aralığını sonsuza uzatmanın getireceği hata küçüktür. Değişkenleri  $x = \beta\hbar v |\vec{k}|$ 'e çevirdikten sonra küresel simetriye bağlı olarak  $d^3\vec{k} = 4\pi x^2 dx / (\beta\hbar v)^3$  kullanarak, denklem (VI.45) şöyledir,

$$\begin{aligned} \lim_{T \ll T_D} E(T) &\approx E_0 + \frac{3V}{8\pi^3} \left( \frac{k_B T}{\hbar v} \right)^3 4\pi k_B T \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} \\ &= E_0 + \frac{\pi^2}{10} V \left( \frac{k_B T}{\hbar v} \right)^3 k_B T. \end{aligned} \quad (\text{VI.47})$$

(Belirli integralinin  $\pi^4/15 \approx 6.5$  değeri standart tablolarda bulunabilir.) Ortaya çıkan ısı sığası,

$$C = \frac{dE}{dT} = k_B V \frac{2\pi^2}{5} \left( \frac{k_B T}{\hbar v} \right)^3, \quad (\text{VI.48})$$

gözlemlere uygun olarak  $C \propto Nk_B (T/T_D)^3$  şeklindedir. Bu sonucun fiziksel yorumu şu şekildedir:  $T \ll T_D$  sıcaklıklarda fonon modların sadece bir kısmı termal olarak uyarılabilir. Bunlar,  $\hbar\omega(\vec{k}) \ll k_B T$  enerji kuantumuna sahip düşük frekanslı fononlardır. Uyarılan fononların dalga vektörleri  $|\vec{k}| < k^*(T) \approx (k_B T / \hbar v)$  koşulunu sağlar. Genel olarak,  $d$  uzay boyutunda, bu modların sayısı yaklaşık olarak  $V k^*(T)^d \sim V (k_B T / \hbar v)^d$ 'dir. Her bir uyarılmış mod klasik biçimde ele alınabilir ve içsel

enerjiye yaklaşık  $k_B T$  katkısı yapar, böylece  $E \sim V(k_B T/\hbar v)^d k_B T$  şeklinde ölçeklendirilir. İlgili ısı sıçması  $C \sim V k_B (k_B T/\hbar v)^d$ ,  $T^d$  biçiminde sıfıra gider.

## VI.C Kara Cisim Işıması

Fononlar katı ortamın titreşimleridir. Sıvı ve gaz durumlarda da (boylamsal) ses modları bulunur. Ancak, 'boş' vakum bile, sonlu sıcaklıklarda termal olarak uyarılabilen elektromanyetik (EM) alan dalgalanmaları yani *fotonları* barındırır. Bu alanın normal modları EM dalgalarıdır, bu dalgalar  $\vec{k}$  değerinde bir dalga sayısı ve  $\alpha$  ile gösterilen iki olası polarizasyon ile karakterize edilir. (Serbest uzayda  $\nabla \cdot \vec{E} = 0$  olduğu için elektrik alan  $\vec{k}$ 'ya dik olmalıdır ve sadece *enine* uzanan modlar bulunur.) Uygun koordinatların seçilmesiyle EM alan için Hamiltonyen harmonik salıngaçların bir toplamı şeklinde yazılabilir,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \alpha} \left[ \left| \tilde{p}_{\vec{k}, \alpha} \right|^2 + \omega_{\alpha}(\vec{k})^2 \left| \tilde{u}_{\alpha}(\vec{k}) \right|^2 \right], \quad (\text{VI.49})$$

burada  $c$  ışık hızı olmak üzere  $\omega_{\alpha}(\vec{k}) = ck$ 'dir.

Periyodik sınır koşulları ile,  $L$  büyüklüğündeki bir kutuda izin verilen dalga vektörleri şöyledir  $\vec{k} = 2\pi(n_x, n_y, n_z)/L$ , burada,  $\{n_x, n_y, n_z\}$  tamsayıdır. Fakat, fononlardan farklı olarak,  $\vec{k}$  büyüklüğünü kısıtlayan bir Brillouin bölgesi yoktur ve bu tamsayılar istendiği kadar büyük olabilir. Böylesi bir kısıtlamanın olmaması, klasik bir hesapta *morötesi faciaya* yol açar: Dalga vektörü için bir limit bulunmadığı için, mod başına  $k_B T$  tayin etmek yüksek frekanslı modlarda depolanan sonsuz bir enerjiye neden olur. (Düşük frekanslar sonlu kutu büyüklüğü ile kesilir). Planck'in önermiş olduğu izin verilen EM enerji değerlerinin şu Hamiltonyene göre kuantumlaşması gerektiği görüşü aslında bu zorluğu çözmeye yöneliktir,

$$\mathcal{H}^q = \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar c k \left( n_{\alpha}(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right), \quad n_{\alpha}(\vec{k}) = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{VI.50})$$

Fononlar için olduğu gibi, içsel enerji şöyle hesaplanır,

$$E = \langle \mathcal{H}^q \rangle = \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar c k \left( \frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta \hbar c k}}{1 - e^{-\beta \hbar c k}} \right) = V E_0 + \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} \frac{\hbar c k}{e^{\beta \hbar c k} - 1}. \quad (\text{VI.51})$$

Sıfır noktası enerjisi aslında sonsuzdur fakat yalnızca enerji farkları ölçüldüğü için genellikle bu durum göz ardı edilir. Değişkenlerin  $x = \beta \hbar c k$  olarak değişmesi uyarılma enerjisini hesaplamamızı sağlar,

$$\begin{aligned} \frac{E^*}{V} &= \frac{\hbar c}{\pi^2} \left( \frac{k_B T}{\hbar c} \right)^4 \int_0^\infty \frac{dx x}{e^x - 1} \\ &= \frac{\pi^2}{15} \left( \frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3 k_B T. \end{aligned} \quad (\text{VI.52})$$

EM ışımaya aynı zamanda kabın duvarlarına bir basınç uygular. (VI.50)'deki Hamiltonyenin üleşim fonksiyonundan,

$$Z = \sum_{\{n_\alpha(\vec{k})\}} \exp \left[ -\beta \hbar \omega(\vec{k}) \left( n_\alpha(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right) \right] = \prod_{\vec{k}, \alpha} \frac{e^{-\beta \hbar c k / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar c k}}, \quad (\text{VI.53})$$

serbest enerji şöyledir,

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \ln Z = k_B T \sum_{\vec{k}, \alpha} \left[ \frac{\beta \hbar c k}{2} + \ln (1 - e^{-\beta \hbar c k}) \right] \\ &= 2V \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left[ \frac{\hbar c k}{2} + k_B T \ln (1 - e^{-\beta \hbar c k}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{VI.54})$$

Foton gazına bağlı basınç şu şekildedir,

$$\begin{aligned} P &= - \left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_T = - \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} [\hbar c k + 2k_B T \ln (1 - e^{-\beta \hbar c k})] \\ &= P_0 - \frac{k_B T}{\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 \ln (1 - e^{-\beta \hbar c k}) \quad (\text{kısmi integral al}) \\ &= P_0 + \frac{k_B T}{\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^3}{3} \frac{\beta \hbar c e^{-\beta \hbar c k}}{1 - e^{-\beta \hbar c k}} \quad (\text{denklem (VI.51)'le karşılaştır}) \\ &= P_0 + \frac{1}{3} \frac{E}{V}. \end{aligned} \quad (\text{VI.55})$$

Aynı zamanda bir de sonsuz, sıfır noktası basıncı  $P_0$  bulunduğunu hatırlayalım. Basıncıdaki bu farklar, iletken levhalar arasında ölçülebilir nitelikte *Casimir kuvvetine* neden olur.

Enerji yoğunluğunun 1/3 katı ekstra basınç, göreceli parçacıklı bir gazınki ile kıyaslanabilir. (Test problemlerinde gösterildiği üzere,  $\mathcal{E} \propto |\vec{p}|^s$  dağılım ilişkisi,  $d$  boyutta bir  $P = (s/d)(E/V)$  basıncına yol açar.) Parçacıklı bir gaz benzetmesi üzerinden devam edecek olursak, kap duvarında bir delik açılması halinde birim alan ve birim zaman içinde kaçan enerji akışı şöyledir,

$$\phi = \langle c_\perp \rangle \frac{E}{V}. \quad (\text{VI.56})$$

Tüm fotonlar  $c$  hızına sahiptir ve gelen hızın deliğe dik bileşeninin ortalaması şu şekilde hesaplanabilir,

$$\langle c_{\perp} \rangle = c \times \frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi/2} 2\pi \sin \theta d\theta \cos \theta = \frac{c}{4}, \quad (\text{VI.57})$$

bu da sonuç olarak şunu verir,

$$\phi = \frac{1}{4} c \frac{E}{V} = \frac{\pi^2}{60} \frac{k_B^4 T^4}{\hbar^3 c^2}. \quad (\text{VI.58})$$

$\phi = \sigma T^4$  olarak elde edilen sonuç, *kara cisim ışıması için Stephan-Boltzmann kanunudur* ve

$$\sigma = \frac{\pi^2}{60} \frac{k_B^4}{\hbar^3 c^2} \approx 5.67 \times 10^{-8} \text{Wm}^{-2}\text{K}^{-4}, \quad (\text{VI.59})$$

*Stephan sabitidir.* Kara cisim ışıması karakteristik bir frekans bağımlılığına sahiptir:

$$\mathcal{E}(k, T) = \frac{\hbar c}{\pi^2} \frac{k^3}{e^{\beta \hbar c k} - 1}, \quad (\text{VI.60})$$

$k$  dalga vektöründeki enerji yoğunluğu olmak üzere,  $E(T)/V = \int dk \mathcal{E}(k, T)$  olsun.  $[k, k + dk]$  aralığında yayılan ışımının akısı  $I(k, T)dk$ 'dir, öyle ki,

$$I(k, T) = \frac{c}{4} \mathcal{E}(k, T) = \frac{\hbar c^2}{4\pi^2} \frac{k^3}{e^{\beta \hbar c k} - 1} \rightarrow \begin{cases} ck_B T k^2 / 4\pi & \text{for } k \ll k^*(T) \\ \hbar c^2 k^3 e^{-\beta \hbar c k} / 4\pi^2 & \text{for } k \gg k^*(T) \end{cases}. \quad (\text{VI.61})$$

Karakteristik  $k^*(T) \approx k_B T / \hbar c$  dalga vektörü kuantum ile klasik rejimleri birbirinden ayırır. Bu, morötesi felaketi ortadan kaldıran üst kesişi sağlar.