

Двухатомная модель квантового кристалла

Ю.М. Полуэктов

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина
E-mail: yuripoluektov@kipt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 27 ноября 2007 г.

В рамках двухатомной модели рассмотрены ангармонические нулевые колебания кристалла. Показано, что амплитуда таких колебаний не может превосходить предельного значения, составляющего некоторую часть межатомного расстояния. Сжатие кристалла уменьшает амплитуду нулевых колебаний, а растяжение увеличивает ее. Найдена зависимость температуры плавления кристалла от параметра де Бура, которая качественно близка к наблюдаемой зависимости. Показано, что в классическом пределе для температуры плавления справедлива формула Линдемана. Существует критическое значение параметра де Бура, при котором температура плавления обращается в нуль. При значениях параметра де Бура, меньших критического, но близких к нему, плавление носит существенно квантовый характер.

У рамках двохатомної моделі розглянуто ангармонічні нульові коливання кристала. Показано, що амплітуда таких коливань не може перевершувати граничного значення, що складає деяку частину міжатомної відстані. Стиск кристала зменшує амплітуду нульових коливань, а розтягання збільшує її. Знайдено залежність температури плавлення кристала від параметра де Бура, яка якісно близька до залежності, що спостерігається. Показано, що в класичному наближенні для температури плавлення справедлива формула Ліндемана. Існує критичне значення параметра де Бура, при якому температура плавлення стає рівною нулю. При значеннях параметра де Бура, менших критичного, але близьких до нього, плавлення носить істотно квантовий характер.

PACS: 63.20.Ry Ангармонические решеточные моды;
64.70.D– Переходы твердое тело–жидкость;
67.80.–s Квантовые кристаллы.

Ключевые слова: квантовый кристалл, параметр де Бура, нулевые ангармонические колебания, критерий Линдемана, температура плавления.

1. Введение

На возможность проявления в некоторых кристаллах при низких температурах эффектов, обусловленных ангармоническими нулевыми колебаниями, обратил внимание де Бур [1]. Фазовые диаграммы квантовых многочастичных систем теоретически изучали Носанов с сотрудниками [2,3]. Работы по микроскопической теории квантовых кристаллов и ссылки на более ранние работы приведены в сборнике [4], а обзор современного состояния физики квантовых кристаллов содержится в [5]. Новые качественные эффекты в квантовых кристаллах, такие как квантовая диффузия и возможность в них сверхтекучести, были предсказаны Андреевым и Лифшицем [6]. В последнее время интерес к квантовым кристаллам вырос в

связи с появлением экспериментов, результаты которых интерпретировались как проявление сверхтекучести в кристаллах [7–11].

Согласно [6], в квантовых кристаллах имеется принципиальная возможность появления вакансий, которые из-за наличия нулевых колебаний могут существовать при нуле температуры. В кристалле, содержащем нулевые вакансии, возможны два вида движения, один из которых характерен для твердого тела другой — для жидкости. Феноменологические уравнения, описывающие динамику такого уникального объекта, получены в работе [6]. В микроскопическом подходе соответствующие уравнения выведены в [12,13]. Хотя до сих пор нулевые вакансии экспериментально обнаружены не были [14,15], вопрос о

существовании состояний многочастичных бозе-систем, в которых были бы нарушены одновременно как трансляционная, так и фазовая симметрия, остается весьма актуальным [13,16]. Продолжает быть актуальной и проблема перехода жидкость–твердое тело, как в классическом, так и в квантовом случае, в частности для гелия, который остается жидким вплоть до самых низких температур и кристаллизуется только под давлением. Теоретическое описание плавления представляет сложную проблему. Обычно ограничиваются простейшими соображениями, такими как использование критерия Линдемана [17,18], согласно которому плавление кристалла наступает тогда, когда среднеквадратичная амплитуда относительных колебаний возрастает до критической величины, составляющей определенную часть расстояния между атомами.

Для описания плавления кристалла недостаточно часто используемого представления твердого тела в виде набора независимых линейных осцилляторов, поскольку обязательно следует учитывать ангармонические эффекты. Причем необходимо решать существенно нелинейную задачу, а не рассматривать ангармонические эффекты как малую поправку к гармоническому приближению. В простейшем подходе, который использован в данной работе, достаточно исследовать нелинейную динамику двух взаимодействующих атомов. Рассмотренная модель является квантовым обобщением двухатомной модели твердого тела, предложенной Френкелем [19]. При анализе гамильтониана этой модели, имеющего вид гамильтониана асимметричного нелинейного осциллятора, использован новый метод построения теории возмущений, предложенный ранее автором [20]. Этот метод, основанный на аналогии с методом самосогласованного поля [21], позволяет с хорошей точностью учесть нелинейные эффекты уже в главном приближении. Из двухатомной модели следует, что как для высоких температур, так и в квантовом случае амплитуда колебаний атомов кристаллической решетки не может превосходить некоторое предельное значение. В частности, показано, что в классическом пределе максимальное значение амплитуды колебаний связано с температурой плавления формулой, которая из качественных соображений была получена Линдеманом. Показано, что амплитуда нулевых колебаний зависит от давления: повышение давления приводит к уменьшению амплитуды колебаний атомов, а растяжение кристалла — к ее увеличению. Получена зависимость температуры плавления от параметра де Бура, которая качественно близка к зависимости, наблюдаемой экспериментально. Из вида этой зависимости следует, что имеется критическое значение параметра де Бура, при котором температура плавления обращается в нуль. При значениях параметра де Бура, меньших

критического, но близких к нему, плавление носит существенно квантовый характер.

2. Описание модели

Твердое тело представляет собой связанное состояние очень большого числа частиц, своеобразную гигантскую молекулу. Рассмотрим, следуя [19], простейший случай, когда таких частиц только две. Разумеется, рассматривая двухатомную молекулу как модель твердого тела, мы тем самым не учитываем многочастичную природу реальных твердых тел. Тем не менее многие существенные особенности такой крайне упрощенной модели должны остаться справедливыми и для системы многих частиц. Рассмотрим одномерную ситуацию. Пусть две одинаковые частицы массой m_0 , находящиеся в точках x_1 и x_2 , взаимодействуют посредством потенциала $U(x)$, где $x = x_2 - x_1$. Чтобы смоделировать внешнее воздействие на твердое тело, предположим, что на атомы могут действовать одинаковые противоположно направленные силы F и $-F$. При $F > 0$ эти силы растягивают систему, при $F < 0$ сжимают. Данная задача двух тел сводится к задаче о движении одного тела с приведенной массой $m = m_0/2$ в поле эффективного потенциала

$$U_{\text{eff}}(x) = U(x) - Fx. \quad (1)$$

Предполагаем, что потенциал $U(x)$ на малых расстояниях имеет характер отталкивания, а на больших расстояниях — притяжения. В некоторой точке x_0 он достигает минимума. При сжатии эффективный потенциал всегда имеет минимум в точке, определяемой условием равенства нулю производной эффективного потенциала $U'_{\text{eff}}(x_*) = 0$. При растягивающей силе эффективный потенциал имеет минимум только тогда, когда сила меньше некоторого критического значения: $F < F_m$. Это следует из того, что алгебраическое уравнение

$$U'(x_*) = F, \quad (2)$$

определяющее расстояние x_* , на котором эффективный потенциал при наличии силы достигает минимума, не имеет решения при $F > F_m$. В дальнейшем везде в качестве потенциала взаимодействия будем использовать потенциал Леннарда-Джонса

$$U(x) = 4\epsilon_U [(\sigma/x)^{12} - (\sigma/x)^6]. \quad (3)$$

В отсутствие внешней силы эффективный потенциал совпадает с потенциалом (3), который достигает минимального значения $U(x_0) = -\epsilon_U$ на расстоянии $x_0 = 2^{1/6}\sigma$. В присутствии внешних сил минимум эффективного потенциала для потенциала (3), согласно (2), определяется уравнением

$$z^{-7} - z^{-13} = \tilde{F}, \quad (4)$$

где введены безразмерные величины: $z = x^*/x_0$ — отношение равновесного расстояния между атомами при наличии внешней силы к равновесному расстоянию в отсутствие силы и $\tilde{F} = 2^{1/6} \sigma F/12\varepsilon_U$. Очевидно, при $\tilde{F} = 0$ параметр $z = 1$. Решение уравнения (4) удобно представить графически (рис. 1). Корни уравнения (4) определяются точками пересечения прямой \tilde{F} с кривой $\varphi(z) = z^{-7} - z^{-13}$. Как видим, при $\tilde{F} > \tilde{F}_m = (42/169)(7/13)^{1/6} \approx 0,224$ уравнение (4) не имеет решения и, следовательно, \tilde{F}_m — это та сила, которую надо превысить, чтобы разорвать связанное состояние двух атомов, а $z_m = (13/7)^{1/6} \approx 1,11$ — это максимальное расстояние в единицах x_0 , на которое можно удалить связанные атомы под действием внешних сил без учета квантовых эффектов.

При $0 < \tilde{F} < \tilde{F}_m$ уравнение (4) имеет два корня: меньший z_1 и больший z_2 . Из этих двух корней следует выбрать меньший, так как при $\tilde{F} \rightarrow 0$ именно этот корень стремится к равновесному расстоянию $z = 1$ в отсутствие внешних сил и, следовательно, отвечает минимуму эффективного потенциала. Большой корень определяет максимум эффективного потенциала. При $\tilde{F} < 0$ уравнение (4) всегда имеет один корень $z < 1$, т.е. происходит сжатие «твердого тела» под действием внешней силы. Рассмотрены условия равновесия двухатомной системы без учета ее квантовой динамики. Учет квантовых эффектов, как увидим, значительно уменьшает ее прочность. Поэтому критическая сила, которую следует приложить, чтобы разорвать связь двух частиц, оказывается существенно меньше полученной выше силы \tilde{F}_m .

Пусть $\xi = x - x^*$ — разность между фактическим расстоянием между атомами x и равновесным расстоянием x^* , определяемым уравнением (2). Разложим эффективную потенциальную энергию (1) в ряд по ξ , удержав члены до третьего порядка:

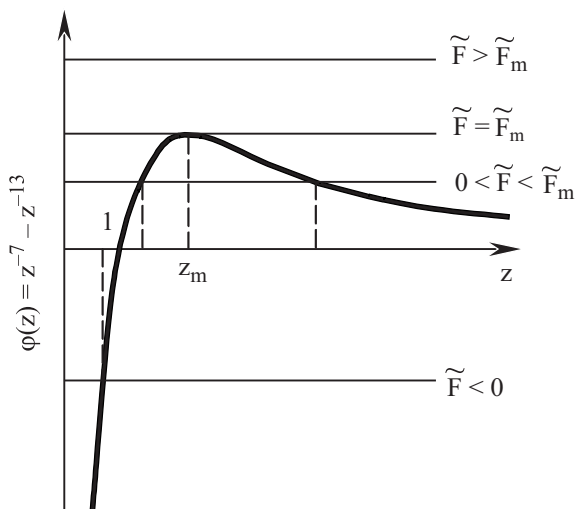


Рис. 1. Графическое решение уравнения (4).

$$U_{\text{eff}}(\xi) \approx U(x^*) - F x^* + \frac{1}{2} U''(x^*) \xi^2 + \frac{1}{6} U'''(x^*) \xi^3. \quad (5)$$

Линейное слагаемое выпадает из разложения (5) в силу условия (2). С учетом (5), гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид гамильтониана асимметричного ангармонического осциллятора

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \xi^2}{2} + \alpha \xi^3, \quad (6)$$

где $p = -i\hbar d/d\xi$ — оператор импульса, $m = m_0/2$ — приведенная масса. В (6) опущена постоянная $U(x^*) - F x^*$, от которой отсчитывается энергия системы. Квадрат частоты и постоянная α , характеризующая степень ангармоничности, определяются формулами

$$\omega^2 = \frac{U''(x^*)}{m}, \quad \alpha = \frac{U'''(x^*)}{6}. \quad (7)$$

Для потенциала Леннарда-Джонса (3) эти параметры с учетом (4) можно записать в виде

$$\omega^2 = \omega_0^2 \frac{13}{6z^{14}} \left(1 - \frac{7}{13} z^6\right), \quad \alpha = -\alpha_0 \frac{13}{9z^{15}} \left(1 - \frac{4}{13} z^6\right), \quad (8)$$

где $\omega_0^2 = 72\varepsilon_U/2^{1/3} m\sigma^2$ — квадрат частоты, $\alpha_0 = 252\varepsilon_U/\sqrt{3}\sigma^3$ — величина коэффициента ангармоничности в отсутствие внешних сил.

Если какая-либо величина (как, например, ω^2 и α в (8)) является функцией параметра $\Phi(z)$, то совместно с (4) эти две зависимости параметрически определяют зависимость данной величины от внешней силы $\Phi(\tilde{F})$. Для ω^2 и α такие зависимости представлены на рис. 2. Как видим, при положительном \tilde{F} (растяжении) квадрат собственной частоты уменьшается с ростом силы и при максимальном ее значении \tilde{F}_m обращается

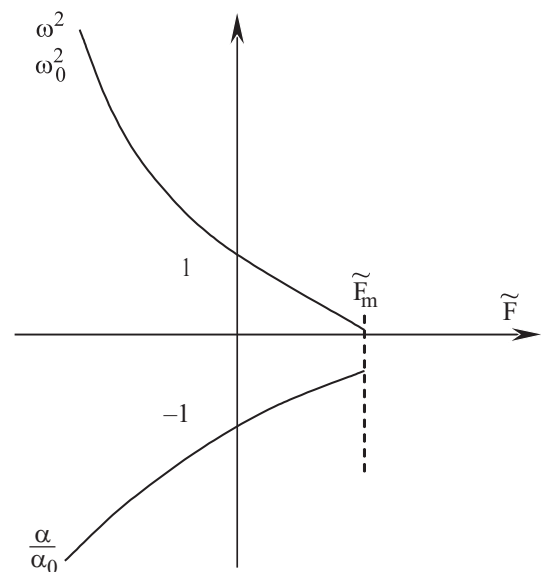


Рис. 2. Зависимость квадрата частоты ω^2 и коэффициента ангармоничности α от внешней силы.

в нуль. При отрицательной силе (сжатии) квадрат частоты растет с ростом абсолютной величины силы. Коэффициент ангармоничности, оставаясь всегда отрицательным, уменьшается по абсолютной величине с увеличением силы.

Используя разложение (5), мы фактически аппроксимировали потенциал (3) более простым потенциалом, тем самым упростили задачу, качественно не изменив картину. Действительно, потенциал (5), как и точный потенциал (3), имеет непрерывный спектр и потенциальную яму, которая может содержать дискретные энергетические уровни. Эти потенциалы различаются при больших x . Если потенциал Леннарда-Джонса при $x \rightarrow \infty$ стремится к нулю, то потенциал (5) уходит в минус бесконечность. Поскольку нас интересуют связанные состояния частиц, то различие в поведении этих потенциалов на больших расстояниях несущественно. Следует отметить еще одно обстоятельство. Строго говоря, энергетический спектр в случае асимметричного осциллятора является непрерывным в силу возможности туннелирования частицы сквозь потенциальный барьер. Однако из-за малой вероятности такого туннелирования, которое приведет лишь к малому уширению энергетического уровня, частица может находиться в потенциальной яме фактически только при определенных значениях энергии. При построении модели будем пренебрегать туннелированием сквозь барьер и считать энергетический спектр в потенциальной яме дискретным.

Отметим также, что учет в разложении (5) членов, пропорциональных ξ^4 , не улучшит, как может показаться, предлагаемую модель. Наоборот, в этом случае ситуация качественно изменится. Поскольку потенциал будет неограниченно возрастать при $\xi \rightarrow \infty$, то энергетический спектр окажется везде дискретным. Такая ситуация качественно отличается от той, которая имеет место для потенциала Леннарда-Джонса.

3. Асимметричный ангармонический осциллятор

Таким образом, гамильтониан двухатомной модели твердого тела (6) имеет вид гамильтониана асимметричного ангармонического осциллятора. Стандартный подход к решению этой квантовомеханической задачи заключается в использовании теории возмущений, основанной на выборе в качестве главного приближения модели гармонического осциллятора. Однако такой подход оказывается в данном случае неудовлетворительным и не позволяет корректно исследовать поставленную задачу. Это очевидно уже из того, что в рассматриваемом случае потенциальная яма имеет конечную глубину и содержит конечное число энергетических уровней либо не содержит их вовсе. Выбор в качестве главного приближения гармонического осциллятора, имеющего бесконечное число уров-

ней, не позволяет учесть это обстоятельство и формально позволяет искать поправки к любому энергетическому уровню. Возможен, однако, другой выбор главного приближения, который позволяет учесть более полно основные черты гамильтониана (6), а именно нелинейные эффекты и наличие конечного числа квазидискретных уровней.

Для дальнейшего оказывается более удобным записать гамильтониан (6) в терминах операторов рождения a^+ и уничтожения a , через которые операторы координаты и импульса выражаются формулами

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^+ + a), \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^+ - a). \quad (9)$$

Операторы a^+ , a действуют в пространстве, базисные векторы которого определены соотношениями

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (10)$$

и подчинены бозе-условиям коммутации: $[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1$. Векторы состояний $|n\rangle$ являются собственными векторами гамильтониана гармонического осциллятора

$$H_0 = \hbar\omega(a^+a + 1/2), \quad (11)$$

имеющего собственные значения энергии

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad (12)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$. Среди собственных векторов $|n\rangle$ гамильтониана H_0 существует вектор с $n = 0$, называемый вакуумным, обладающий свойством $a|0\rangle = 0$. Этому вектору отвечает минимальное значение энергии осциллятора $E_0 = \hbar\omega/2$.

В терминах операторов рождения и уничтожения гамильтониан асимметричного осциллятора (6) принимает вид

$$H = \hbar\omega \left[a^+a + \frac{1}{2} + \tilde{\alpha}(a^+ + a)^3 \right]. \quad (13)$$

Квадрат отрицательной безразмерной постоянной $\tilde{\alpha}$, характеризующей величину нелинейности, можно записать в виде

$$\tilde{\alpha}^2 = \frac{\hbar\alpha^2}{8m^3\omega^5} \equiv \frac{49 \cdot 2^{5/6}}{384} \Lambda. \quad (14)$$

Это соотношение является определением параметра Λ . С помощью соотношений (8), (9) нетрудно убедиться, что в отсутствие внешней силы параметр Λ совпадает с параметром, введенным де Буром [1]:

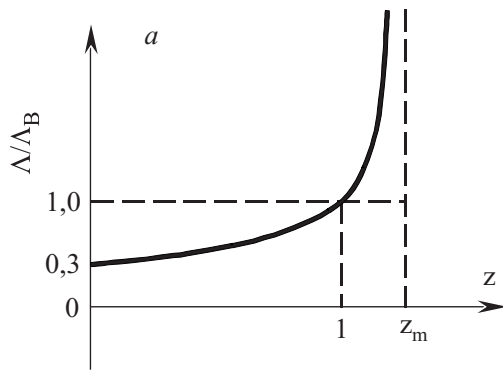
$$\Lambda_B = \frac{\hbar}{\sigma\sqrt{\epsilon U m a}}. \quad (15)$$

При наличии внешней силы параметр Λ зависит от F (или от давления), поэтому будем называть его зависящим от давления параметром де Бура. Из (8), (9), (14) следует, что его зависимость от z имеет вид

$$\Lambda(z) = \Lambda_B \frac{4}{9} \sqrt{\frac{6}{13}} \frac{\left(1 - \frac{4}{13} z^6\right)^2}{\left(1 - \frac{7}{13} z^6\right)^{5/2}}. \quad (16)$$

Формула (16) совместно с (4) параметрически задает зависимость Λ от силы. Поскольку параметр Λ определяет степень ангармоничности кристалла, а следовательно, степень его «квантовости», то при сжатии ($z < 1$) кристалл становится «менее квантовым», а при растяжении ($z > 1$) — «более квантовым». При сжатии параметр Λ уменьшается и в пределе $z \rightarrow 0$ стремится к конечной величине, равной $(4/9)(\sqrt{6}/13)\Lambda_B \approx 0,302 \Lambda_B$. При растяжении параметр Λ резко возрастает и стремится к бесконечности при $z \rightarrow z_m$ (рис. 3). При малых деформациях можно ограничиться линейным по $\delta = z - 1$ приближением. Тогда внешняя сила с деформацией связаны соотношением $\tilde{F} = 3\delta/2^{1/6}$, а зависимость (16) примет вид

$$\Lambda = \Lambda_B \left(1 + \frac{73}{6} \delta\right). \quad (17)$$



а

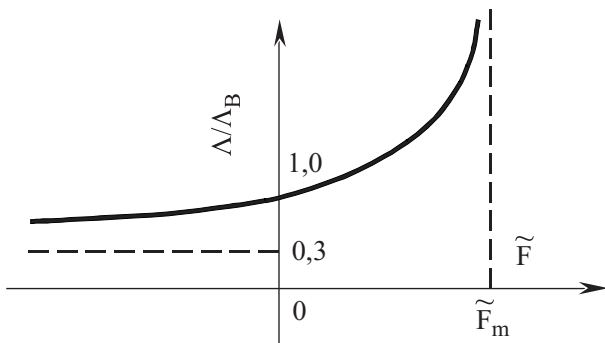


Рис. 3. Зависимость параметра де Бура от: параметра z , характеризующего длину кристалла (а); внешней силы (б).

Обращает на себя внимание большая величина численного коэффициента $73/6 \approx 12,17$ перед малой величиной δ в последней формуле. Применимость формулы (17) ограничена условием $\delta \ll 6/73 \approx 0,082$. Таким образом, даже слабая деформация приводит к существенному изменению параметра де Бура, а следовательно, изменению степени ангармоничности. Перейдем к решению уравнения Шредингера с гамильтонианом (13). Разобьем этот гамильтониан на основную часть и возмущение иным способом, являющимся аналогом подхода, используемого при построении модели самосогласованного поля [22,23]:

$$H = H_S + H_C. \quad (18)$$

Невозмущенный гамильтониан выберем в виде, содержащем члены не выше второго порядка по операторам a^+, a :

$$H_S = \hbar\omega \left[a^+ a + \frac{1}{2} - A(a^+ + a) - \frac{B}{2}(a^+ + a)^2 - C \right], \quad (19)$$

где A, B, C — вещественные параметры. Тогда гамильтониан возмущения примет вид

$$H_C = \hbar\omega \left[\tilde{\alpha}(a^+ + a)^3 + A(a^+ + a) + \frac{B}{2}(a^+ + a)^2 + C \right]. \quad (20)$$

Поскольку при таком разбиении полный гамильтониан (13) не изменился, то параметры A, B, C могут, вообще говоря, считаться произвольными. Это позволяет подобрать их так, чтобы гамильтониан главного приближения H_S был в некотором смысле максимально близок к полному гамильтониану (13).

При температурах близких к нулю система находится преимущественно в основном состоянии. Не фиксируя пока параметры A, B, C , решим стационарное уравнение Шредингера для гамильтониана нулевого приближения:

$$H_S |0\rangle = E^{(0)} |0\rangle, \quad (21)$$

где $|0\rangle$ — вектор основного состояния (вакуума), $E^{(0)}$ — энергия основного состояния. Уравнение (21) может быть решено последовательным применением унитарных преобразований, с помощью которых H_S приводится к виду гамильтониана гармонического осциллятора (11). Вначале устраним в H_S линейные по a^+, a члены, используя унитарный оператор

$$V_1 = \exp \chi (a^+ - a), \quad (22)$$

где χ — вещественное число. Оператор (22) осуществляет сдвиг операторов a^+, a на число χ : $V_1^+ a V_1 = a + \chi$. С помощью (22) уравнение (21) приводится к виду $H'_S V_1^+ |0\rangle = E^{(0)} V_1^+ |0\rangle$, где $H'_S = V_1^+ H_S V_1$.

В гамильтониане H'_S линейные по a^+ , a члены будут отсутствовать, если потребовать выполнение условия

$$(1-2B)\chi - A = 0. \quad (23)$$

В H'_S останутся только квадратичные члены вида a^+a , a^{+2} , a^2 . Чтобы H'_S привести к виду (11), следует устранить фазово-неинвариантные квадратичные члены a^{+2} , a^2 . Это осуществляется с помощью унитарного оператора

$$V_2 = \exp \frac{1}{2} \psi (a^{+2} - a^2), \quad (24)$$

который «перепутывает» операторы a^+ , a : $V_2^+ a V_2 = u a + v a^+$, где $u = \text{ch} \psi$, $v = \text{sh} \psi$. Иначе говоря, оператор (24) реализует каноническое преобразование Боголюбова. С помощью операторов (22), (24) уравнение Шредингера (21) может быть преобразовано к виду

$$H_S^* V_2^+ V_1^+ |0\rangle = E_I^{(0)} V_2^+ V_1^+ |0\rangle, \quad (25)$$

где $H_S^* = V_2^+ V_1^+ H_S V_1 V_2$. Параметры u и v подбираются так, чтобы из H'_S выпали члены с a^{+2} , a^2 . Это требование приводит к следующим уравнениям:

$$\begin{aligned} Bu - (1-B+\varepsilon)v &= 0, \\ (1-B-\varepsilon)u - Bv &= 0, \end{aligned} \quad (26)$$

где ε — положительный вещественный параметр, определяемый из условия разрешимости системы однородных линейных уравнений (26):

$$\varepsilon = \sqrt{1-2B}. \quad (27)$$

С учетом условия $u^2 - v^2 = 1$ находим

$$u^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1-B}{\varepsilon} + 1 \right), \quad v^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1-B}{\varepsilon} - 1 \right), \quad uv = \frac{B}{2\varepsilon}. \quad (28)$$

В результате приходим к гамильтониану вида

$$H_S^* = \hbar\omega \left[\varepsilon \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \varepsilon^2 \chi^2 - C \right], \quad (29)$$

который, очевидно, имеет собственные векторы, совпадающие с собственными векторами гамильтониана гармонического осциллятора (11). Таким образом, из (25) получаем, что $V_2^+ V_1^+ |0\rangle = |0\rangle$ или

$$|0\rangle = V_1 V_2 |0\rangle, \quad (30)$$

где $|0\rangle$ — вектор основного состояния гамильтониана гармонического осциллятора (11). Из (25) следует, что энергия основного состояния системы, описываемой гамильтонианом (19), определяется формулой

$$E^{(0)} = \hbar\omega \left[\frac{1}{2} \varepsilon - \varepsilon^2 \chi^2 - C \right]. \quad (31)$$

Как видно, энергия нулевых колебаний системы с гамильтонианом (19) отличается от энергии нулевых колебаний гармонического осциллятора.

До сих пор параметры A, B, C , входящие в гамильтонианы основного приближения (19) и возмущения (20), оставались неопределенными. Определим эти параметры. Для этого построим выражение

$$J = [(0|H - H_S|0)]^2, \quad (32)$$

где среднее по состоянию $|0\rangle$ от разности точного и аппроксимирующего гамильтонианов имеет вид

$$\begin{aligned} (0|H - H_S|0) &\equiv (0|H_C|0) = \\ &= \tilde{\alpha} (0|(a^+ + a)^3|0) + A(0|(a^+ + a)|0) + \frac{B}{2} (0|(a^+ + a)^2|0) + C. \end{aligned} \quad (33)$$

Средние в (33) выражаются через параметры χ и ε , так что получаем

$$(0|H_C|0) = \tilde{\alpha} \left[\frac{6}{\varepsilon} \chi + 8\chi^3 \right] + 2A\chi + \frac{B}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon} + 4\chi^2 \right) + C. \quad (34)$$

Поскольку величина (32) характеризует отличие точного гамильтониана от аппроксимирующего, потребуем, чтобы связь между параметрами A, B, C и χ, ε была такова, чтобы J принимала минимальное значение. Для этого потребуем выполнение условий

$$\frac{\partial J}{\partial \chi} = \frac{\partial J}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial J}{\partial C} = 0. \quad (35)$$

Последнее условие в (35) эквивалентно требованию равенства средних от точного и аппроксимирующего гамильтонианов:

$$(0|H|0) = (0|H_S|0). \quad (36)$$

Другие условия (35) приводят к уравнениям

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha} \left[\frac{3}{\varepsilon} + 12\chi^2 \right] + 2B\chi + A &= 0, \\ B &= -12\tilde{\alpha}\chi. \end{aligned} \quad (37)$$

К этим уравнениям следует присоединить уравнения (23) и (27). В итоге, с учетом (14), получаем уравнение, определяющее параметр ε как функцию параметра де Бурэ:

$$\varepsilon^5 - \varepsilon + b\Lambda = 0, \quad (38)$$

где численный коэффициент $b = 147/4 \cdot 2^{1/6} \approx 32,74$. Параметры χ, A, B и C могут быть выражены через ε и $\tilde{\alpha}$ (или Λ):

$$\chi = \frac{\varepsilon^2 - 1}{24\tilde{\alpha}}, \quad A = \frac{\varepsilon^2(\varepsilon^2 - 1)}{24\tilde{\alpha}}, \quad B = \frac{1 - \varepsilon^2}{2},$$

$$C = -\frac{(\varepsilon^2 - 1)^2(2\varepsilon^2 + 1)}{864\tilde{\alpha}^2}. \quad (39)$$

Параметр χ определяет среднее значение координаты в состоянии $|0\rangle$:

$$\bar{\xi} \equiv \langle 0|\xi|0\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \chi. \quad (40)$$

Квадрат среднеквадратичного отклонения координаты в состоянии $|0\rangle$ определяется формулой

$$\overline{\xi^2} - (\bar{\xi})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega\varepsilon}. \quad (41)$$

Волновая функция основного состояния имеет вид смещенной гауссовой функции

$$\langle \xi|0\rangle = \left(\frac{m\varepsilon\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\varepsilon\omega}{2\hbar}(\xi - \bar{\xi})^2\right]. \quad (42)$$

Обратим внимание, что для гармонического осциллятора $\bar{\xi} = 0$, т.е. эффект расширения кристалла за счет нулевых колебаний в гармоническом приближении не может быть описан.

4. Условие существования кристалла

Решение уравнения (38), которое является основным в данной теории, удобно представить графически (рис. 4). Его корни определяются точками пересечения кривой $y_1 = \varepsilon - \varepsilon^5$ и прямой $y_2 = b\Lambda$. Кривая $y_1(\varepsilon)$ достигает максимума $y_{1m} = 4/5^{5/4} = 0,535$ при $\varepsilon_* = 1/5^{1/4} = 0,669$. Из рис. 5 видно, что имеется критическое значение параметра де Бура

$$\Lambda_* = 16 \cdot 2^{1/6} / 735 \cdot 5^{1/4} \approx 0,016, \quad (43)$$

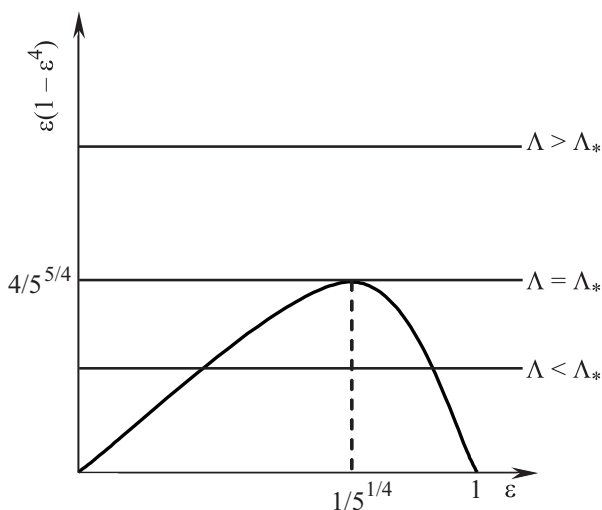


Рис. 4. Графическое решение уравнения (38).

такое, что при $\Lambda > \Lambda_*$ решение отсутствует. Это означает, что при указанных значениях параметра де Бура дискретный уровень в потенциальной яме отсутствует и, следовательно, невозможно существование связанного состояния, которое в рассматриваемой модели нами трактуется как кристаллическое. Поскольку в этом состоянии частицы делокализованы, то естественно рассматривать такое состояние как жидкое или газообразное (в данной модели они не различимы). При $\Lambda = \Lambda_*$ имеется один корень уравнения (38) $\varepsilon_* = 1/5^{1/4}$, т.е. становится возможным образование связанного состояния (кристалла). Следовательно, физический смысл критического значения параметра де Бура (43) состоит в том, что при данном его значении кристаллизация (плавление) происходит уже при нулевой температуре. При $\Lambda < \Lambda_*$ уравнение (38) имеет два положительных корня: ε_+ и ε_- . Из двух положительных корней уравнения (38) следует выбрать больший ε_+ (который будем обозначать просто ε), поскольку именно для него выполняется очевидное требование: $\Lambda \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 1$. Таким образом, кристалл может существовать в области параметров де Бура $0 < \Lambda < \Lambda_*$. При этом параметр ε меняется от единицы до $\varepsilon_* = 1/5^{1/4}$.

Из рассмотренной модели следует, что существует характерное значение параметра де Бура Λ_* , которое позволяет разделить конденсированные среды, межатомное взаимодействие в которых может быть описано потенциалами типа (3), на две группы. К первой группе относятся вещества, у которых параметр де Бура меньше Λ_* , следовательно, вещества этой группы находятся в кристаллическом состоянии при нулевом давлении и нулевой температуре. В эту группу входит подавляющее большинство известных конденсированных сред. Ко второй группе относятся вещества, параметр де Бура которых больше критического значения Λ_* . Такие среды не кристаллизуются (остаются квантовыми жидкостями) в отсутствие давления до самых низких температур. В настоящее время известны всего два таких вещества — изотопы гелия ^3He и ^4He . Разумеется, нельзя надеяться, что численное значение критического параметра де Бура $\Lambda_* \approx 0,016$, полученное выше в рамках простой модели, близко к реальной величине. Это следует уже из того, что, например, атом ^4He в твердой ГПУ фазе, в которую кристаллизуется гелий при $T = 0$ К и $P > 25$ атм, окружен 12 ближайшими соседями, так что потенциальная яма, в которой находится атом, гораздо глубже, чем та, которая имеет место в модели с двумя атомами. Ниже будет дана оценка критического значения параметра де Бура для реальных сред.

Используя условие существования кристалла $0 < \Lambda(z) < \Lambda_*$ и формулу (4), можно построить фазовую диаграмму в координатах $\tilde{F} - \Lambda_B$ (рис. 5). Кривая

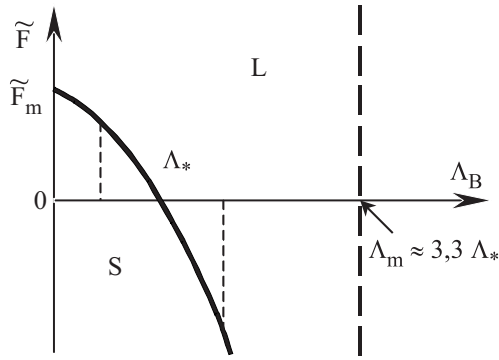


Рис. 5. Фазовая диаграмма в координатах $\tilde{F} - \Lambda_B$; S — область существования кристалла, L — область существования жидкости.

на рис. 5 разделяет область существования жидкости (L) и твердого тела (S). При $0 < \Lambda_B < \Lambda_*$ кристалл существует не только при нулевой силе или под давлением, но даже если кристалл растянут некоторой силой, меньшей F_m . При $\Lambda_* < \Lambda_B < \Lambda_m$ кристалл может существовать, только если он находится под давлением, причем давление должно быть тем больше, чем больше величина параметра де Буря Λ_B . Существует предельное значение параметра де Буря $\Lambda_m = 9/4(\sqrt{13/6}\Lambda_*) \approx 3,3\Lambda_*$, такое, что если параметр де Буря Λ_B среды превосходит это значение, то она не может кристаллизоваться ни при каких давлениях. Такую гипотетическую конденсированную среду можно было бы назвать абсолютной квантовой жидкостью.

Сделаем несколько замечаний по поводу определения параметра де Буря. Встречаются утверждения, что квантовые кристаллы — это кристаллы, параметр де Буря которых порядка единицы. Это утверждение не совсем точно по той причине, что само определение параметра де Буря неоднозначно. В оригинальной работе де Буря [1] введенный им параметр содержал постоянную Планка \hbar (не перечеркнутую). В более поздних работах параметр де Буря чаще всего определяется через \hbar (формула (15)). Очевидно, что возможны оба определения, хотя они отличаются на 2π . В более общем виде параметр де Буря можно определить соотношением

$$\Lambda_B = C \frac{\hbar}{\sigma \sqrt{\varepsilon_U m_a}}, \quad (44)$$

где C — произвольная положительная вещественная постоянная. Таким образом, величина параметра Λ_B зависит от выбора постоянной C в (44). Существенной является не абсолютная величина Λ_B , которая может быть различной в зависимости от выбора постоянной в (44), а отношение этих величин для различных веществ. В данной работе, как отмечалось, используется определение (15). Поскольку существует характер-

ное, имеющее ясный физический смысл, значение параметра де Буря Λ_* (43), то можно определить нормированный параметр де Буря соотношением

$$\tilde{\Lambda}_B \equiv \frac{\Lambda_B}{\Lambda_*}, \quad (45)$$

который не зависит от выбора C в (44). Аналогично определяется и нормированный параметр де Буря, зависящий от давления: $\tilde{\Lambda} = \Lambda / \Lambda_*$. Величина нормированного параметра де Буря определяет степень «квантовости» вещества. В соответствии со сказанным выше, вещества с $\tilde{\Lambda}_B < 1$ — это кристаллы при нулевой температуре и нулевом давлении, а вещества с $\tilde{\Lambda}_B > 1$ в таких условиях являются квантовыми жидкостями. У большинства веществ $\tilde{\Lambda}_B \ll 1$, и эффекты, обусловленные нулевыми колебаниями, в них малы. Такие кристаллы можно считать «классическими». Если же $\tilde{\Lambda}_B \leq 1$, то квантовые эффекты играют существенную роль, и такие кристаллы следует считать «квантовыми».

5. Амплитуда нулевых колебаний и расширение кристалла

Как отмечалось выше, в классическом подходе без учета квантовой динамики длина «кристалла» определяется величиной $x_* = 2^{1/6} \sigma z$, где z зависит от величины внешней силы согласно уравнению (4). При внешней силе, равной нулю, $z = 1$. Если кристалл сжат ($\tilde{F} < 0$), то $0 < z < 1$. Если же кристалл растянут ($0 < \tilde{F} < \tilde{F}_m$), то $1 < z < z_m$, где $\tilde{F}_m = (42/169)(7/13)^{1/6}$, $z_m = (13/7)^{1/6}$. При $z > z_m$ кристалл существовать не может. При учете квантовых эффектов длина кристалла, находящегося в основном состоянии, равна $l = \langle 0|x|0 \rangle = x_* + \langle 0|\xi|0 \rangle$ и больше длины, которая была бы в классическом случае. Относительное удлинение кристалла за счет нелинейности квантовых колебаний можно охарактеризовать величиной $M \equiv \langle 0|\xi|0 \rangle / x_*$. Таким образом, в основном состоянии длина кристалла в единицах x_* определяется соотношением $\tilde{l} \equiv l/x_* = 1 + M$. В качестве характеристики амплитуды квантовых колебаний используем величину $D \equiv \sqrt{\langle 0|\xi^2|0 \rangle - \langle 0|\xi|0 \rangle^2} / x_*$, которая определяет среднеквадратичное отклонение в единицах x_* . При фиксированной внешней силе, а следовательно, и фиксированном z имеем

$$M = M_0(z) \frac{\sqrt{5}(1+\sqrt{5})}{4} (1-\varepsilon^2), \quad (46)$$

$$D = D_0(z) \frac{\sqrt{5}}{2} \sqrt{1-\varepsilon^4}, \quad (47)$$

где

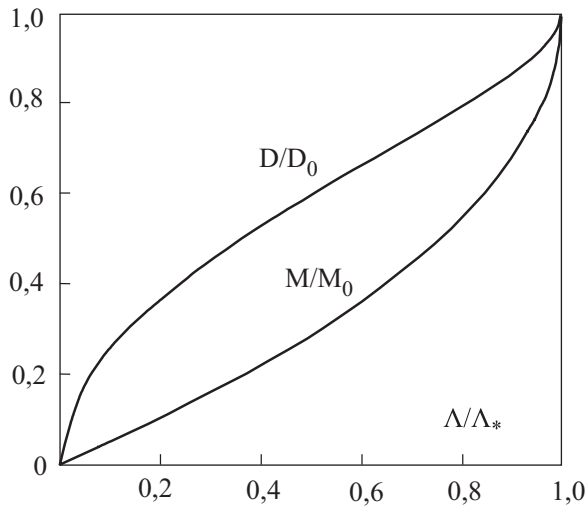


Рис. 6. Зависимости относительного удлинения кристалла M/M_0 и относительной амплитуды колебаний D/D_0 от нормированного параметра де Буря; M_0 — максимальное относительное удлинение, D_0 — максимальное среднеквадратичное отклонение.

$$M_0(z) = \frac{1}{2}(\sqrt{5}-1)D_0(z) = \frac{(5-\sqrt{5})z^{5/2}(1-7z^6/13)}{70(1-4z^6/13)} \quad (48)$$

Величины $M_0(z)$ и $D_0(z)$ равны максимально возможным значениям величин M и D . Соотношения (46) и (47) совместно с (38) определяют зависимость относительного удлинения кристалла и величины амплитуды нулевых колебаний от параметра де Буря (рис. 6). Как видно, относительное удлинение M и относительная амплитуда нулевых колебаний D возрастают с увеличением нормированного параметра де Буря от нуля до единицы. При $\tilde{\Lambda} \ll 1$ параметр M линейно растет с $\tilde{\Lambda}$, а $D \propto \sqrt{\tilde{\Lambda}}$. Вблизи $\tilde{\Lambda} = 1$ имеем $M - M_0(z) \propto \sqrt{1 - \tilde{\Lambda}}$ и аналогично $D - D_0(z) \propto \sqrt{1 - \tilde{\Lambda}}$. Как отмечалось, если $\tilde{\Lambda} > 1$, то кристалл не существует, поскольку при $\tilde{\Lambda} = 1$ он плавится уже при нулевой температуре. Таким образом, в согласии с гипотезой Линдемана, амплитуда колебаний частиц в кристалле не может превосходить некоторого максимального значения. Формула (48) совместно с (4) определяет зависимость максимального значения величин M и D от величины внешней силы. В отсутствие внешней силы ($z = 1$) максимальные значения величин M и D равны $M_0(1) \approx 0,026$ и $D_0(1) \approx 0,043$.

6. Двухатомный кристалл при конечных температурах

Рассмотрим двухатомный кристалл при конечных температурах. Будем предполагать, что кристалл находится в термодинамическом равновесии с термостатом с температурой T . Этой же температурой, есте-

венно, характеризуется и кристалл. Таким образом, под температурой системы, состоящей из малого числа частиц, понимаем температуру термостата, в равновесии с которым находится рассматриваемая система. Усреднение при конечных температурах осуществляется с матрицей плотности $\rho_0 = \exp[\beta(\Omega - H_S)]$, где $\beta = 1/T$, а Ω — нормировочная постоянная, имеющая смысл свободной энергии кристалла. При конечных температурах параметры гамильтониана основного приближения (19) A, B, C находятся из условий (32), (35), причем в (32) усреднение по основному состоянию следует заменить усреднением с матрицей плотности ρ_0 . В результате оказывается, что остаются справедливыми формулы (39), однако параметр ε , вместо уравнения (38), определяется уравнением

$$\varepsilon(1 - \varepsilon^4) = \frac{4}{5^{5/4}} \tilde{\Lambda}(2f + 1) = \frac{4}{5^{5/4}} \tilde{\Lambda} \operatorname{cth} \left(\frac{\beta \hbar \omega \varepsilon}{2} \right), \quad (49)$$

где $f = 1/(e^{\beta \hbar \omega \varepsilon} - 1)$. Как и в случае нулевой температуры, удобно исследовать это уравнение графически.

Правая часть уравнения (49) $\varphi(\varepsilon) = \frac{4}{5^{5/4}} \tilde{\Lambda} \operatorname{cth} \left(\frac{\beta \hbar \omega \varepsilon}{2} \right)$

имеет вид, близкий к гиперболе, которая в зависимости от значения величины $\tau = T/\hbar\omega$ сдвигается по оси ординат. При больших τ уравнение (49) не имеет решения, т.е. кристалл не существует. Такое состояние естественно интерпретировать как жидкое. С уменьшением τ при некотором τ_m появляется решение уравнения (49). Как видно на рис. 7, τ_m и соответствующее ему значение ε_m могут быть найдены из условия равенства производных левой и правой частей уравнения (49). Появление решения уравнения (49) при понижении температуры естественно рассматривать как кристаллизацию системы, а параметр τ_m — как температуру (в единицах $\hbar\omega$) плавления кристалла. Таким образом, температура плавления кристалла в двухатомной модели определяется системой алгебраических уравнений:

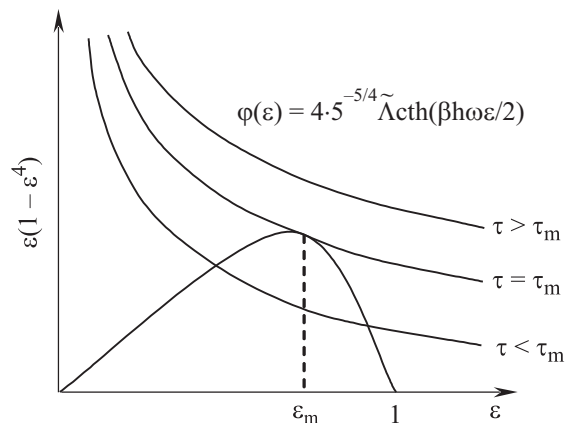


Рис. 7. Графическое решение уравнения (49).

$$\begin{aligned} \varepsilon_m(1-\varepsilon_m^4) &= \frac{4}{5^{5/4}} \tilde{\Lambda} \operatorname{cth} \left(\frac{\varepsilon_m}{2\tau_m} \right), \\ 1-5\varepsilon_m^4 &= -\frac{2}{5^{5/4}} \frac{\tilde{\Lambda}}{\tau_m} \operatorname{sh}^{-2} \left(\frac{\varepsilon_m}{2\tau_m} \right). \end{aligned} \quad (50)$$

Как видим, температура плавления τ_m определяется единственным безразмерным параметром, характеризующим кристалл, — нормированным параметром де Бура $\tilde{\Lambda}$. При $\tau < \tau_m$ уравнение (49) имеет два корня, из которых следует, как и в случае $T = 0$, выбрать больший корень.

6.1. Температура плавления в классическом пределе.
Критерий Линдемана

В случае высоких температур, когда выполнено условие $\tau_m \gg 1$, система уравнений (50) имеет решение $\varepsilon_m = 1/3^{1/4}$ и

$$\tau_m = \frac{5^{5/4}}{4 \cdot 3^{3/2} \tilde{\Lambda}}. \quad (51)$$

Как видим, условие $\tau_m \gg 1$ эквивалентно условию $\tilde{\Lambda} \ll 1$, которое определяет классические кристаллы. Обратим внимание, что постоянная Планка выпадает из соотношения (51), так что мы действительно имеем дело с классическим пределом.

Как известно [18], согласно гипотезе Линдемана, плавление твердого тела наступает тогда, когда среднеквадратичное отклонение атома из его положения равновесия составит некоторую долю x_m среднего радиуса элементарной ячейки r_s . Из этого допущения следует формула

$$\frac{T_m}{\Theta} = \frac{M\Theta}{9\hbar^2} x_m^2 r_s^2, \quad (52)$$

где Θ — температура Дебая, M — масса атома. Формула Линдемана (52) неплохо согласуется с наблюдаемыми данными, но считается недостаточно обоснованной теоретически [19]. Нетрудно убедиться, что полученная выше формула (51) может быть представлена в виде, аналогичном формуле Линдемана:

$$\frac{T_m}{\hbar\omega} = \frac{m_a\omega}{9\hbar} \left(\frac{9D_*^2}{2\sqrt{3}} \right) x_m^2. \quad (53)$$

Здесь $D_* \equiv \sqrt{\xi^2 - \bar{\xi}^2} / x_*$, где усреднение осуществляется с матрицей плотности при температуре плавления. Из сравнения формул (52) и (53) следует, что если принять в качестве r_s величину x_* , а в качестве частоты Дебая частоту ω , то в нашей модели параметр Линдемана $x_m = (9/2\sqrt{3})^{1/2} D_*$. Величина D_* зависит от внешней силы. При нулевой силе $D_* = 2/21 \cdot \sqrt{6} \approx 0,04$. Таким образом, в рамках рассмотренной модели в классическом пределе получена формула для темпера-

туры плавления (53), которая совпадает с формулой Линдемана (52), а также выражение для параметра Линдемана.

6.2. Температура плавления в квантовом пределе

Условие низких температур плавления $\tau_m \ll 1$ выполнено, если нормированный параметр Линдемана близок к единице ($\tilde{\Lambda} \leq 1$). В этом пределе из системы уравнений (50) следует формула для температуры плавления

$$\tau_m = -\frac{1}{5^{1/4} \ln \frac{1}{2} (\tilde{\Lambda}^{-1} - 1)}. \quad (54)$$

При стремлении $\tilde{\Lambda}$ к единице температура плавления резко понижается, обращаясь при $\tilde{\Lambda} = 1$ в нуль. В формулу (54) входит постоянная Планка, так что плавление при рассматриваемых значениях параметра де Бура носит существенно квантовый характер.

6.3. Зависимость температуры плавления от параметра де Бура

Зависимость температуры плавления от нормированного параметра де Бура, определяемая системой алгебраических уравнений (50), представлена на рис. 8. Здесь же показана экспериментальная зависимость от-

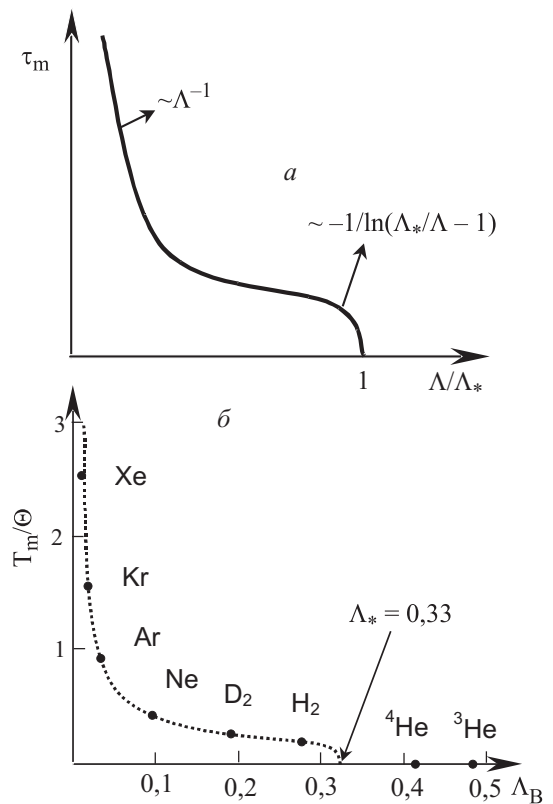


Рис. 8. Зависимости температуры плавления от параметра де Бура: теоретическая (формула (50)) (а); и экспериментальная (б).

ношения температуры плавления к температуре Дебая от величины параметра де Бура. Проводя с помощью стандартной программы кривую через экспериментальные точки, находим, что параметр де Бура для реальных систем имеет критическое значение $\Lambda_* \approx 0,33$.

7. Заключение

Из квантовомеханического анализа двухатомной модели твердого тела можно сделать следующие заключения, которые, по-видимому, остаются качественно справедливыми и для реальных кристаллов.

Существует критическое значение параметра де Бура Λ_* (в двухатомной модели $\Lambda_* \approx 0,016$, для реальных сред $\Lambda_* \approx 0,33$). Конденсированные среды с $\Lambda > \Lambda_*$ (^3He и ^4He) остаются жидкими при нулевой температуре и нулевом давлении. Среды с $\Lambda < \Lambda_*$ находятся при нулевой температуре и нулевом давлении в кристаллическом состоянии. Температура плавления (точнее, отношение температуры плавления к температуре Дебая) убывает с увеличением параметра де Бура и обращается в нуль при $\Lambda = \Lambda_*$.

Как в классическом, так и в квантовом случаях оказывается справедливым критерий Линдемана: амплитуда колебаний атомов в кристаллах не может превышать некоторого предельного значения, составляющего относительно малую долю межатомного расстояния (в двухатомной модели $\approx 4\%$, в реальных объектах $< 20\text{--}25\%$).

Степень «квантовости» конденсированных сред существенно зависит от давления. При увеличении давления среда становится менее «квантовой» (уменьшается амплитуда нулевых колебаний и параметр де Бура). Квантовая жидкость кристаллизуется, когда амплитуда нулевых колебаний становится меньше критического значения.

Существует предельное значение параметра де Бура Λ_m (в двухатомной модели ($\Lambda_m \approx 3,3\Lambda_*$), при котором еще возможна кристаллизация квантовой жидкости. При $\Lambda > \Lambda_m$ квантовая жидкость не может быть переведена в кристаллическое состояние ни при каком давлении.

Растяжение кристалла усиливает ангармонизм нулевых колебаний и увеличивает параметр де Бура и, следовательно, делает кристалл «более квантовым». Растягивая кристаллы H_2 , D_2 , Ne и др., можно сделать их существенно «более квантовыми» объектами.

1. J. De Boer, *Physica* **14**, 139 (1948).
2. L.H. Nosanow, *J. Low Temp. Phys.* **26**, 613 (1977).
3. *Квантовые жидкости и кристаллы*, Сб. статей, А.С. Боровик-Романов (ред.), Мир, Москва (1979).
4. *Квантовые кристаллы*, Сб. статей, С.В. Вонсовский (ред.), Мир, Москва (1975).
5. N. Prokof'ev, *ArXiv:cond-mat/0612499* v.1 (2006).

6. А.Ф. Андреев, И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **56**, 2057 (1969).
7. E. Kim and M.H.W. Chan, *Nature* **427**, 225 (2004); *Science* **305**, 1941 (2004); *Phys. Rev. Lett.* **97**, 115302 (2006).
8. A.C. Clark and M.H.W. Chan, *J. Low Temp. Phys.* **138**, 853 (2005).
9. A.S.C. Rittner and J.D. Reppy, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 165301 (2006).
10. A. Penzev, Y. Yasuta, and M. Kubota, *J. Low Temp. Phys.* **148**, 677 (2007).
11. M. Kondo, S. Takada, Y. Shibayama, and K. Shirahata, *J. Low Temp. Phys.* **148**, 695 (2007).
12. Н.М. Лавриненко, С.В. Пелетминский, *Теор. и матем. физ.* **66**, 314 (1986).
13. М.Ю. Ковалевский, С.В. Пелетминский, *Статистическая механика квантовых жидкостей и кристаллов*, Физматлит, Москва (2006).
14. В.А. Fraass, P.R. Granfors, and R.O. Simmons, *Phys. Rev.* **B39**, 124 (1989).
15. M.W. Meisel, *Physica* **B178**, 121 (1992).
16. А.С. Пелетминский, С.В. Пелетминский, Ю.В. Слюсаренко, *Теор. и матем. физ.* **125**, 152 (2000).
17. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1966).
18. Дж. Рейсленд, *Физика фононов*, Мир, Москва (1975).
19. Я.И. Френкель, *Кинетическая теория жидкостей*, Наука, Ленинград (1975).
20. Ю.М. Полуэктов, *Изв. вузов., Физика* **47**, 74 (2004).
21. Ю.М. Полуэктов, *ФНТ* **28**, 604 (2002).

The biatomic model of a quantum crystal

Yu.M. Poluektov

The anharmonic zero oscillations of a crystal are considered within the framework of the diatomic model. It is shown that the amplitude of such oscillations cannot be in excess of the limiting value which is a part of the interatomic distance. The compression of a crystal decreases the amplitude of zero oscillations, while the tension increases it. It is found that the melting point of a crystal is dependent on the De Boer parameter. This dependence is qualitatively close to the observed one. It is shown that the Lindemann formula for the melting point is correct in the classic limit. There is a critical value of the De Boer parameter at which the melting point vanishes. For the De Boer parameters lower than the critical parameter, but close to it, the melting is mostly of quantum nature.

PACS: 63.20.Ry Anharmonic lattice modes;
64.70.D- Solid-liquid transitions;
67.80.-s Quantum solids.

Keywords: quantum crystal, De Boer parameter, zero anharmonic oscillations, Lindemann criterion, melting point.