

# Re-Know the Laws of Thermal Motion of Solids

Zishan Yu

Agriculture Committee of Xuzhou, Xuzhou  
Email: yuzs1963@sina.com

Received: Jun. 7<sup>th</sup>, 2013; revised: Jun. 30<sup>th</sup>, 2013; accepted: Jul. 9<sup>th</sup>, 2013

Copyright © 2013 Zishan Yu. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

**Abstract:** The limitations of the Debye internal energy function have been deeply analyzed, and the result indicates that “the Debye  $T^3$  law agrees with experiments in low temperatures” is an illusion. The analyzation reveals the general law of internal energy of solids and sketches its curve. It reaches some breakthrough viewpoints about the zero point energy and the characteristic temperature and provides practical means to determine both of them. It proposes that the vibration resilience of an atom comes not from interaction with its neighbor atoms but from inner itself, which means radius of atomic thermal-motion is getting bigger with temperature decreasing while it is getting smaller with temperature increasing. With temperature decreasing to absolute zero point, the harmonious vibration form of atomic thermal-motion changes into free particle in trap. Based on the fresh viewpoints, a new micro-structure model of solids is founded. These original viewpoints have important significances for both to know micro-structure and micro-motions of solids, and to change some existing notions; further more, these will serve as guidance for both to research the laws micro-motion of solids (especially in low temperatures) and to yield some original theories to expand foundation theories of solid state physics.

**Keywords:** Thermal Motion; Internal Energy; Thermal Capacity; Harmonious Vibration; Free Particle; Solid Model

## 重新认识固体热运动规律

余子山

徐州市农委, 徐州  
Email: yuzs1963@sina.com

收稿日期: 2013年6月7日; 修回日期: 2013年6月30日; 录用日期: 2013年7月9日

**摘要:** 本文深入分析德拜内能函数的局限性, 证明德拜内能严重偏离固体内能规律, 认为“低温条件下德拜  $T^3$  与实验符合很好”是假象而非科学。论文进一步揭示固体内能的一般规律, 描绘固体内能曲线, 对固体 0 点能和特征温度的认识有新突破, 并提出确定 0 点能和特征温度的实用方法。论文认为: 原子振动恢复力来源于原子内部, 而不是原子间相互作用; 原子热运动平均幅度随温度升高而减小, 随温度降低而增大; 原子热运动形式高温呈简谐振动, 而低温呈陷阱中自由粒子等新观点, 并建构了新的固体微观结构模型。本文提出了若干原创性的新观点, 这些新的认识改变了一些现有观念, 对深化认识固体微观结构和微观运动具有重要意义, 为进一步研究固体热运动规律, 特别是低温领域研究, 催生原创性的新理论, 促进固体物理学基础理论的发展起到了方向性的指导作用。

**关键词:** 热运动; 内能; 热容量; 简谐振动; 自由粒子; 固体模型

### 1. 引言

物理学有多种理论研究固体微观热运动, 如线性

谐振动理论、爱因斯坦振动理论、德拜声子理论等。

在高温条件下, 各种理论观点与Dulong-Petit Law一

致，和实验符合很好。但是，在低温条件下，固体热容量随温度趋近绝对 0 度衰减为 0，各种理论呈现不同程度的局限性。线性谐振动理论不再适应；爱因斯坦振动理论虽能圆满地解释固体热容量随温度趋于 0 的客观事实，但是数值误差较大且振动频率单一，局限性明显；德拜  $T^3$  规律与实验吻合很好，被认为低温条件下是精确的。

但是，本文研究发现，德拜理论是美丽的错误，温度越低德拜内能与固体内能的偏差越大，绝对 0 度偏差最大，低温条件下德拜  $T^3$  规律与实验符合较好是误会而非科学。

## 2. 德拜内能商榷

### 2.1. 德拜内能曲线

玻尔兹曼常数  $k$ ，固体原子数  $N$ ，德拜温度  $T_D$ <sup>[1]</sup>。则德拜内能  $U_D(T)$  与温度  $T$  的关系：

$$U_D(T) = 9NkT \left( \frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{\frac{T_D}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (1)^{[2]}$$

低温条件下，德拜内能  $U_D(T)$  和德拜热容量  $C_D(T)$  分别为：

$$U_D(T) = 3Nk \cdot \frac{\pi^4}{5} \cdot \frac{T^4}{T_D^3} \ll 3NkT \quad (2)^{[3]}$$

$$C_D(T) = U'_D(T) = \frac{12\pi^4 Nk}{5T_D^3} T^3 \ll 3Nk \quad (3)$$

(3)式称为德拜  $T^3$  定律。

高温条件下，德拜内能：

$$U_D(T) = 3NkT \quad (4)^{[3]}$$

$$C_D(T) = U'_D(T) = 3Nk \quad (5)$$

根据(2)、(3)、(4)、(5)式，以及德拜内能连续、单调递增的性质，勾画德拜内能曲线如图 1(a)所示。下面严格证明德拜内能与固体内能规律存在严重偏差。

### 2.2. 德拜内能导函数严重偏离固体热容量规律

#### 2.2.1. 固体热容量规律

图 2(a)<sup>[3]</sup>是几种固体的热容量实验曲线，抽象出图 2(b)<sup>[1]</sup>所示的一般规律，表明固体热容量：

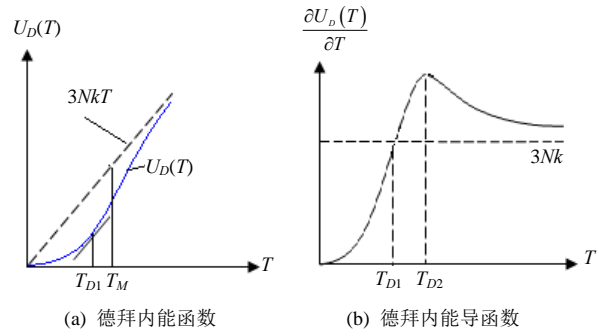


Figure 1. The Debye internal energy and its first derivative function

图 1. 德拜内能函数及其导函数

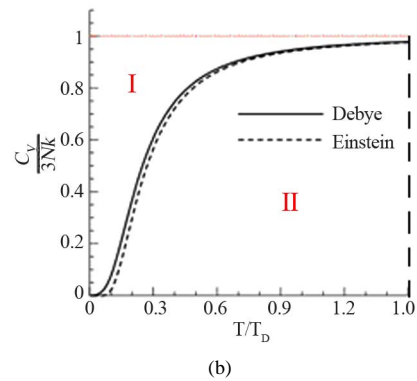
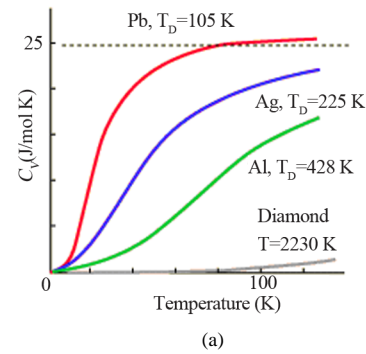


Figure 2. The thermal capacity curve of solids

图 2. 固体热容量曲线

$$0 < C_V(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T} < 3Nk \quad (6)$$

下面证明，德拜热容量(即德拜内能导函数)，严重偏离(6)式固体热容量规律。德拜内能导函数表达式复杂，直接分析难度较大，本文运用数学的基本定理分析论证。

#### 2.2.2. 德拜内能导函数 $U'_D(T)$ 规律与固体热容量规律严重不符

德拜内能函数： $U_D(0) = 0$ ， $U_D(T_\infty) = 3NkT_\infty$ 。

根据拉格朗日(Lagerange)中值定理<sup>[4]</sup>, 至少存在一个  $T_{D1} \in (0, \infty)$  使:

$$U'_D(T_{D1}) = 3Nk \quad (7)$$

(7)式的几何意义: 德拜内能曲线在  $T_{D1}$  温度点的切线, 与渐近线  $3NkT$  平行。

德拜内能曲线以  $3NkT$  为渐近线, 因此有

$U'_D(T)|_{T \rightarrow \infty} = 3Nk = U'_D(T_{D1})$ 。根据洛尔(Rolle)定理<sup>[4]</sup>, 至少存在一个  $T_{D2} \in (T_{D1}, \infty)$  使:

$$U''_D(T_{D2}) = 0 \quad (8)$$

(8)式的几何意义是德拜内能曲线的拐点, 是德拜热容量由递增变为递减的临界温度。

根据(7)式、(8)式, 结合图 1(a)德拜内能曲线, 可以推知德拜内能导函数(德拜热容量) $U'_D(T)$  规律是: 从 0 递增到  $3Nk$ , 继续递增至最大值( $>3Nk$ ), 转为递减并逐步趋近  $3Nk^+$ 。即:

$$0 \rightarrow -3Nk \rightarrow -\text{MAX} \rightarrow -3Nk^+ \quad (9)$$

(9)式德拜热容量  $U'_D(T)$  规律如图 1(b)所示, 显然与(6)式或图 2(b)所示的固体热容量实验规律严重不符。

### 2.2.3. 存在使德拜内能导函数大于 $3Nk$ 的温度区

(9)式德拜内能导函数规律, 严重偏离固体热容量规律。下面进一步严格证明, 存在无穷多温度点, 使德拜热容量  $U'_D(T) > 3Nk$ 。

任意有限温度  $T_M \in (0, T_\infty)$ , 德拜内能函数  $U_D(T)$ 、直线  $3NkT$  在  $[T_M, T_\infty]$  连续, 在  $(T_M, T_\infty)$  可导, 且  $3Nk \neq 0$ 。根据哥西(Cauchy)中值定理<sup>[4]</sup>, 至少存在一个温度点  $T_\xi \in (T_M, T_\infty)$  使:

$$\frac{U_D(T_\infty) - U_D(T_M)}{3NkT_\infty - 3NkT_M} = \frac{U'_D(T_\xi)}{3Nk} \quad (10)$$

如图 1(a)所示, 德拜内能曲线  $U_D(T)$  与渐近线  $3NkT$  的关系: 在高温极限重合  $U_D(T_\infty) = 3NkT_\infty$ , 在有限温度  $U_D(T_M) < 3NkT_M$ 。因此, (10)式结论:

$$\begin{aligned} U'_D(T_\xi) &= 3Nk \cdot \frac{U_D(T_\infty) - U_D(T_M)}{3NkT_\infty - 3NkT_M} \\ &= 3Nk \cdot \frac{3NkT_\infty - U_D(T_M)}{3NkT_\infty - 3NkT_M} > 3Nk \end{aligned} \quad (11)$$

$T_M$  是任意有限温度, 即存在无穷多个温度点  $T_\xi$  (某个温度区, 如  $T \in (T_{D1}, \infty)$ ), 使德拜内能导函数

$U'_D(T) > 3Nk$ 。这证明了: 德拜内能导函数, 与(6)式或图 2 固体热容量实验规律  $0 < C_V(T) < 3Nk$  严重矛盾。

事实上, 固体热容量规律  $C_V < 3Nk$ , 由于递增速度不同, 内能曲线与直线  $3NkT$  最多只能有一个交点。若绝对 0 度内能曲线与直线  $3NkT$  相交, 温度从 0 升高, 内能曲线逐步偏离直线  $3NkT$ , 温度越高, 内能曲线偏离直线  $3NkT$  越大, 不可能高温极限再与直线  $3NkT$  重合。

德拜内能曲线, 在绝对 0 度与直线  $3NkT$  相交, 又在高温极限与直线  $3NkT$  重合, 必然存在某个快速递增的温度区, 如  $T \in (T_{D1}, T_\infty)$ , 使  $U'_D(T) > 3Nk$ , 不符合固体热容量规律。由德拜内能函数, 只能推出图 1(b)德拜热容量规律, 而不可能推出图 2(b)热容量曲线。德拜内能函数的科学性或正确性值得商榷。

### 2.3. 德拜特征温度的认识误差

德拜理论中, 有一个重要的物理量德拜温度  $T_D$ , 它与“声子最大振动模式(associated with the highest allowed mode of vibration)”相对应。但是, 从图 1 中无法找到“声子最大振动模式”的特征温度点, 表明“声子最大振动模式”的存在假设缺乏科学合理性。本文认为, 固体热运动不存在最大振动模式, 故无法找到与其对应的特征温度点。

然而, 德拜内能曲线(至少)存在两个特征温度点, 如图 1(b)所示  $T_{D1}$ 、 $T_{D2}$  温度点。 $T_{D1}$  点的切线与渐近线  $3NkT$  平行, 即  $U'_D(T_{D1}) = 3Nk$ , 它是德拜内能曲线斜率大于或小于  $3Nk$  的临界温度。另一个特征温度点  $T_{D2}$ , 该温度点的二阶导数为 0, 即  $U''_D(T_{D2}) = 0$ , 它是德拜内能导函数由递增转变为递减的临界温度。这两个特征温度的物理意义, 都与德拜温度的物理意义不相符合。

### 2.4. 德拜零点内能的局限性

固体具有 0 点运动能, 即 0 点内能或 0 点能(下同), 德拜理论认为固体 0 点内能为:

$$U_0 = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\hbar\omega_i}{2} \quad (12)^{[5]}$$

从德拜理论的推导过程考察, (12)式不是由德拜内能函数(定积分)给出, 而是与德拜内能函数没有关

系的常数，更符合“积分常数”的特征。因此本文认为，(12)式是“德拜内能的0参考点”，而不是德拜0点内能。

综上对德拜内能分析本文认为，低温德拜 $T^3$ 定律与实验符合很好，并不说明德拜内能函数科学地揭示固体低温热运动规律。

### 3. 低温条件下固体热运动内能

#### 3.1. 固体内能一般规律

本文根据图2热容量规律，揭示固体内能的一般规律。设高温极限固体内能曲线与直线 $3NkT$ 重合，由于 $C_v < 3Nk$ ，温度从高温极限逐步降低，内能曲线将逐步偏离 $3NkT$ 直线。任意温度 $T$ ，固体内能 $U(T)$ 与 $3NkT$ 的偏差量 $\Delta E(T)$ 为：

$$\Delta E(T) = \int_T^\infty (3Nk - C_v) dT \quad (13)$$

由于 $C_v < 3Nk$ ，温度下降过程直线 $3NkT$ 比内能曲线 $U(T)$ 衰减更快，任意温度 $T$ ， $U(T) > 3NkT$ 恒成立，内能 $U(T)$ 与 $3NkT$ 的偏差为正偏差。固体内能 $U(T)$ 为 $3NkT$ 加偏差量 $\Delta E(T)$ 。即：

$$\begin{aligned} U(T) &= 3NkT + \Delta E(T) \\ &= 3NkT + \int_T^\infty (3Nk - C_v) dT > 3NkT \end{aligned} \quad (14)$$

(14)式是表明，固体内能曲线必在直线 $3NkT$ 的上方，如图3(a)所示。(14)式内能导函数规律如图3(b)所示，数值从0到 $3Nk$ 单调递增，与固体热容量的规律相符合。

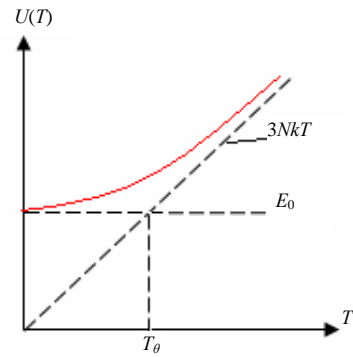
#### 3.2. 固体0点内能与特征温度

**固体0点内能。**固体0点运动客观存在，具有0点运动内能，大小由(14)式确定。令 $T=0$ ，函数值 $U(0)$ 即为0点内能，用 $E_0$ 标识。固体0点能为：

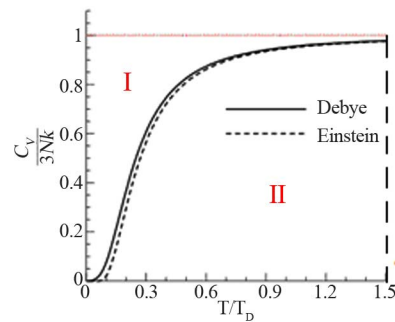
$$E_0 = U(0) = \int_0^\infty (3Nk - C_v) dT \quad (15)$$

$E_0$ 是一个有限的常量。内能0参考点 $U_0$ 可以任意选择，取值不同内能曲线整体上下移动，不改变内能曲线的规律与 $E_0$ 的值。

由于认识的有限性，目前物理学还未精确认识固体热容量 $C_v$ 的规律，因此不能通过解析的方法确定 $E_0$ 值。然而，我们可以相当准确地估算 $E_0$ 值，本文



(a) 固体内能



(b) 固体内能导函数

Figure 3. The internal energy of solids and its first derivative function

图3. 固体内能及其导函数

给出两种实用方法。一是渐近线法。根据内能实验数据，在坐标纸上描绘内能 $U(T)$ 曲线如图3(a)，根据图形的几何关系可以确定0点能 $E_0$ 。二是质量比法。在面密度均匀的板上描绘“温度-热容量曲线”如图3(b)，沿热容量曲线剪开。在高温条件下，(I+II)面积为 $3NkT$ 内能，相应薄板质量 $W_U$ 表示；I区面积“ $\int_0^\infty (3Nk - C_v) dT$ ”为0点能 $E_0$ ，相应薄板质量为 $W_{E_0}$ 。则：

$$E_0 = \frac{W_{E_0}}{W_U} \cdot U = \frac{W_{E_0}}{W_U} \cdot 3NkT \quad (16)$$

理论上，只有在高温极限(16)式严格精确。但是，在热容量接近 $3Nk$ 的温度条件下，

$\Delta E(T) = \int_T^\infty (3Nk - C_v) dT$ 很小，(16)式确定的0点能误差不会太大。温度越高，满足 $T \rightarrow \infty$ 条件越好，精确度越高。

我们以金刚石热容量实验曲线<sup>[6]</sup>为例，估算金刚石原子的0点能。图4蓝色线条是根据金刚石热容量实验数据描绘的曲线(与爱因斯坦热容量曲线比较，更

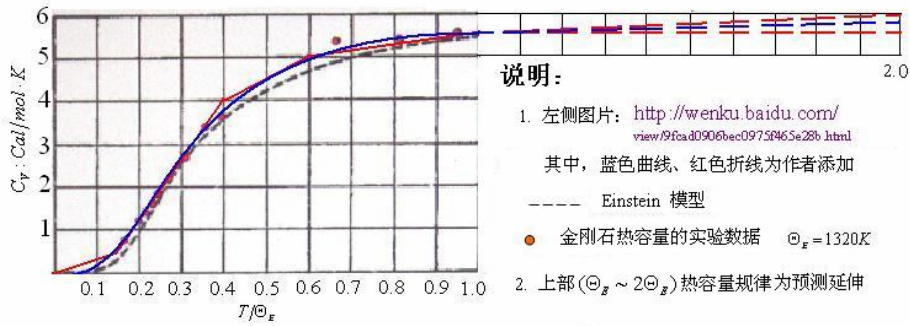


Figure 4. Approximate calculating zero point energy of solids  
 图 4. 固体 0 点能估算

好地符合实验数据)。在 1320 K，金刚石的热容量还较小于  $3Nk$ ，为了获得更准确的 0 点能，根据热容量一般规律对图 4 进行两点合理推测：1320 ~ 2640 K 的热容量曲线在两红色虚线范围内；在 2640 K 金刚石的热容量与  $3Nk$  误差很小，该点温度确定的 0 点能与实际值误差不会太大。为便于计算，我们以红色折线代替蓝色曲线，根据(16)式近似计算金刚石原子的 0 点能：

$$\frac{24 + 2.5}{120} \times 3 \times 2640k < E_{0\text{金刚石}} < \frac{24 + 5}{120} \times 3 \times 2640k$$

因此，根据图 4 金刚石热容量实验数据，可以粗略判断金刚石原子的 0 点能：

$$2413 \times 10^{-23} \text{ J} < E_{0\text{金刚石}} < 2641 \times 10^{-23} \text{ J}$$

零点能  $E_0$  的存在，是固体热容量随温度趋于 0 的决定因素。温度趋于绝对 0 度，固体内能趋于  $E_0$ ，而不是趋于 0。在低温条件下，温度变化  $\Delta T$ ，固体内能变化  $\Delta U \ll 3Nk \cdot \Delta T$ ，这是固体热容量随温度降低逐步减小，并随温度趋于 0 的秘密。

**特征温度。**图 3(a)固体内能曲线，有一个具有显著特征的温度点，即特征温度。特征温度的几何特征：0 点内能  $E_0$  与渐近线  $3NkT$  的交点。特征温度的物理意义：固体最小内能(0 点内能)  $E_0$  所对应的温度值。即特征温度  $T_\theta$ ：

$$T_\theta = \frac{E_0}{3Nk} \quad (17)$$

不同固体的 0 点能大小不同，故特征温度高低不等。

本文特征温度的物理意义，与德拜温度、爱因斯坦特征温度的物理意义比较差别显著。爱因斯坦特征温度、德拜温度，固体热容量接近  $3Nk$ ，而(17)式特征温度  $T_\theta$  对应固体的 0 点内能。因此(17)式确定的特

征温度  $T_\theta$ ，将远比爱因斯坦特征温度、德拜温度低。以金刚石为例，德拜温度为 2230 K，爱因斯坦特征温度为 1320 K。而根据 2640 K 的  $E_{0\text{金刚石}}$  值，确定的特征温度：

$$583 \text{ K} < T_{\theta\text{金刚石}} < 638 \text{ K}$$

特别指出，在内能曲线或热容量曲线上，德拜温度、爱因斯坦温度没有绝对的特征，而  $C_V \rightarrow 3Nk$  是一个渐近的过程，即使热容量实验数据严格精确，也很难合理确定德拜温度、爱因斯坦温度。但是，(17)式特征温度具有绝对特征，理论上是唯一确定的值，如果实验数据严格精确，那么特征温度也严格精确。

### 3.3. 德拜内能与(14)式内能比较

根据以上分析，比较德拜内能和固体内能如图 5 所示。图 5(a)中，红色线条为(14)式定义的固体内能，蓝色线条为德拜内能。高温条件下，各种内能都以直线  $3NkT$  为渐近线，符合Dulong Petit定律。必须指出，(14)式内能曲线从  $3NkT$  上方趋近，故  $U'(T) \rightarrow 3Nk^-$ ；而德拜内能(爱因斯坦内能)从  $3NkT$  下方趋近， $U'_D(T) \rightarrow 3Nk^+$ 。

低温条件下， $3NkT$ 、德拜内能(包括爱因斯坦内能)都严重偏离固体的内能曲线。 $3NkT$  直线的斜率为常数  $3Nk$ ，与固体热容量随温度趋于 0 的客观事实严重不符而陷入困境；德拜内能曲线虽然严重偏离内能曲线，但低温领域德拜内能曲线的斜率，与固体内能曲线的斜率相近，这是低温德拜  $T^3$  定律与实验符合很好的原因，也是误会产生的根源。

图 5 表明，德拜理论(包括爱因斯坦振动理论)等现有固体内能理论，试图从直线  $3NkT$  的下方接近渐近线，都犯了“方向性”错误，不可能真正揭示固体



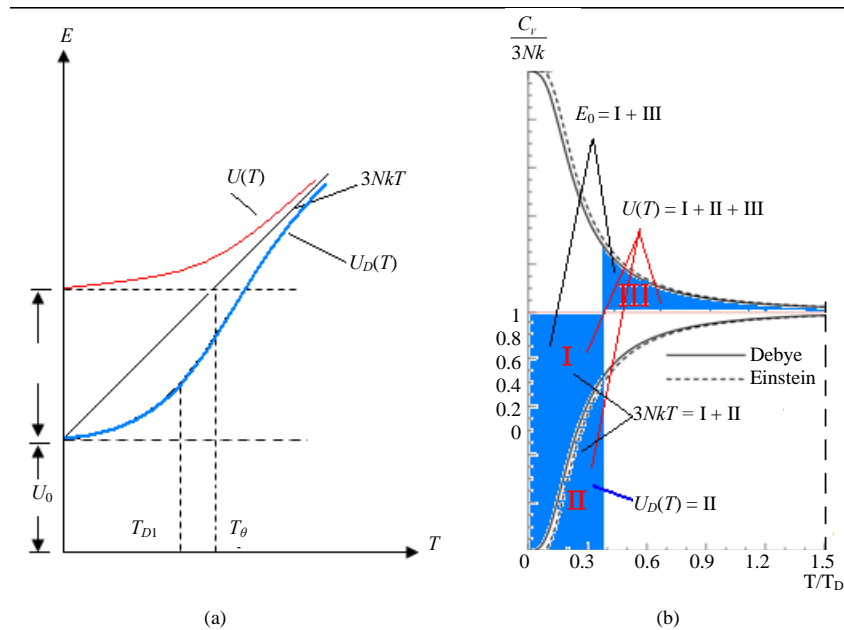


Figure 5. Internal energy of solid vs. Debye internal energy  
图 5. 固体内能与德拜内能比较

内能的规律。温度越低德拜内能偏离固体内能越大，绝对 0 度偏差达到最大，所谓“低温极限德拜理论是精确的”的观点是错误的。

图 5(b)直观、形象地反映各种内能理论的区别与联系。其中：

$$\begin{cases} U(T) : I + II + III \\ 3NkT : I + II \\ E_0 : I + III \\ U_D(T) : II \end{cases}$$

在图 5(b)没有体现内能 0 参考点  $U_0$ ，原因是固体内能 0 参考点，与固体内能或热容量的规律无关，可以任意选择， $U_0$  不同取值对固体的内能规律没有影响。

德拜内能和(14)式内能认识差别，比较归纳如表 1 所示。

#### 4. 固体微观结构模型

##### 4.1. 振动恢复力源自原子内部，而不是原子间的相互作用

假设固体中原子的质量为  $m$ ，在高温条件下原子的热运动形式呈简谐振动，振动系数为  $A$ ，振动圆频率为  $\omega$ ，普朗克常数为  $h$ ， $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ，振动能量为  $E$ 。

原子振动能量  $E$  可表为：

$$E = \hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{A}{m}} \quad (18)$$

根据前面研究结论，高温条件下原子的平均热运动能量  $E$ ：

$$E \approx 3kT \quad (19)$$

根据(18)式、(19)式可知，在高温条件下可得振动系数：

$$A = \frac{9mk^2T^2}{\hbar^2} \quad (20)$$

(20)式表明，原子振动弹性系数  $A$  是温度  $T$  的函数，温度越高  $A$  越大，温度越低  $A$  越小。但是，固体杨氏模量、切变模量等宏观物理量随温度升高而减小，随温度降低而增大。因此本文认为，固体中原子振动恢复力来自原子的内部，而不是原子间的相互作用，且振动弹性系数  $A$  是温度的函数。与现有理论“振动恢复力来源于原子间的相互作用”的观点商榷。

##### 4.2. 原子热运动半径随温度降低增大随温度升高减小

根据振动理论，若振子的质量为  $m$ ，动量为  $p$ ，质心偏离平衡位置的位移为  $q$ ，振动系数为  $A$ ，振幅

**Table 1. Debye internal energy vs. internal energy (Equation (14))**  
**表 1. 德拜内能和固体内能比较(公式(4))**

序号	比较项目	德拜内能 $U_D(T)$	(14)式内能 $U(T)$
1	与 $3NkT$ 关系	$U_D(T) \leq 3NkT$ 绝对 0 度相交, 高温重合	$U(T) \geq 3NkT$ 高温重合
2	$T$ 从 0 到 $\infty$ , 能量增量	$\Delta U_D = \lim_{T \rightarrow \infty} (3NkT - 0) = 3NkT$	$\Delta U = \lim_{T \rightarrow \infty} (3NkT - E_0) < 3NkT$
3	热容量规律	$C_D = \frac{\partial U_D(T)}{\partial T} \begin{cases} < 3Nk & T < T_D \\ > 3Nk & T > T_D \\ \rightarrow 3Nk^+ & T \rightarrow \infty \end{cases}$	$C_V = \frac{\partial U(T)}{\partial T} \begin{cases} < 3Nk & T \in (0, \infty) \\ \rightarrow 3Nk^- & T \rightarrow \infty \end{cases}$
4	热容量平均值	$\overline{C_D(T)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{3NkT - 0}{T} = 3Nk$	$\overline{C_V(T)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{3NkT - E_0}{T} < 3Nk$
5	0 点内能	$\sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2} \hbar \omega_i$	$E_0 = \int_0^\infty (3Nk - C_V) dT$
6	特征温度及其物理意义	$T_D = \frac{\hbar v_s}{2k} \sqrt{\frac{6}{\pi} \cdot \frac{N}{V}} = \frac{\hbar \omega_{\max}}{k}$ 对应声子最大振动模式, 合理选择	$T_0 = \frac{E_0}{3Nk}$ 对应固体 0 点内能, 唯一确定

为  $q_{\max}$ 。则振动能量  $E$  表为:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{A}{2} q^2 = \frac{A}{2} q_{\max}^2 \quad (21)$$

本文认为, (18)式和(21)式都是原子热运动的能量表达式, 表达形式虽然不同, 但只要科学就是统一的, 即(18)式与(21)式一致。可得:

$$q_{\max}^2 = 2\hbar \sqrt{\frac{1}{Am}} \quad (22)$$

把(20)式关系代入(22)式得:

$$q_{\max} = \frac{\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{mkT}} \quad (23)$$

(23)式表明, 固体中原子平均振幅随温度升高而减小, 随温度下降而增大。现有理论认为, 温度越高, 原子微观热运动半径越大; 温度越低, 原子热运动半径越小。关于原子热运动幅度与温度的关系, 本文的看法也与现有理论观点显著不同。

原子振动幅度的温度特性, 似乎与固体体积热胀冷缩的温度特性矛盾。本文认为, 固体体积大小由原子间的距离决定: 温度降低, 原子热运动幅度增大, 但原子间的距离缩小, 固体体积缩小。温度升高, 原子热运动幅度减小, 但原子间的距离增大, 固体体积增大。因此, 本文关于原子热运动幅度的温度特性的观点, 与固体体积热胀冷缩的温度特性并不矛盾。

### 4.3. 原子热运动形式: 高温呈简谐振动 低温呈陷阱中自由粒子

固体原子间存在强烈的相互作用, 质心运动幅度局限在很小范围内。若原子间距为  $2D$ , 原子半径为  $R$ , 质心偏离平衡位置的位移  $q$ , 运动最大幅度为  $r_0$ 。则有如下关系:

$$q \leq r_0 \ll R < D \quad (24)$$

现有物理学理论认为, 无论高温还是低温, 固体中原子的热运动形式都是微振动形式。本文认为固体中原子热运动形式: 高温条件下呈简谐振动, 低温条件下退化为陷阱中自由粒子。下面根据(20)、(23)、(24)式, 分析固体微观热运动形式变化的辩证过程。

**简谐振动。**根据(20)式, 高温条件下原子振动系数  $A$  较大; 且根据(23)式, 原子热运动幅度满足:

$$q_{\max} = \frac{\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{mkT}} < r_0 \quad (25)$$

原子在小弹簧  $A$  的作用下, 热运动形式呈简谐振动。图 6(a)反映原子热运动位移、动能、势能、总能量等与时间的关系。原子热运动平均动能  $E_K$  与平均势能  $E_P$  相等。即:

$$\overline{E_K} = \overline{E_P} \quad (26)$$

**失谐振动。**温度降低, 根据(20)式、(23)式, 原子

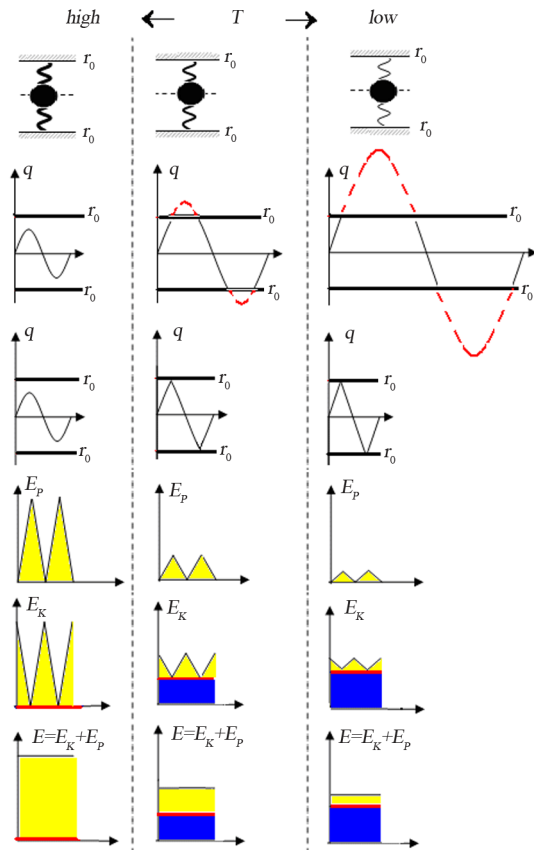


Figure 6. Thermal motion form of an atom varies with temperatures  
图 6. 原子热运动形式随温度变化而改变

振动系数  $A$  以  $T^2$  的速度递减, 振动幅度将以  $\sqrt{1/T}$  速度递增。温度较低时:

$$q_{\max} = \frac{\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{mkT}} > r_0 \quad (27)$$

但是, 根据(24)式, 质心运动空间严格限制在  $q \leq r_0$  范围内,  $q > r_0$  的运动因不可能实现而被压缩, 振动周期不完整。在限定空间中, 原子热运动平均动能  $E_K$  大于平均势能  $E_P$ 。

$$\bar{E}_K > \bar{E}_P \quad (28)$$

原子振动失谐, 热运动形式呈现向自由粒子运动形式转化的趋势。图 6(b)反映原子振动失谐条件下的位移、动能、势能、总能量等与时间的关系。

**自由粒子形式。**在  $T \rightarrow 0$  的极端低温条件下, 根据(20)、(23)式, 原子振动弹性系数  $A \rightarrow 0$ , 振动幅度  $q_{\max} \rightarrow \infty$ , 受(24)式限制,  $q > r_0$  的运动因不可能实现而被压缩。在限定空间中, 原子热运动平均动能  $E_K$  远大于平均势能  $E_P$ , 原子热运动能量退化为仅含动能

项。即:

$$\begin{aligned} \bar{E}_K &\gg \bar{E}_P \\ E = E_K + E_P &\approx \frac{P^2}{2m} \end{aligned} \quad (29)$$

因此, 在温度很低的条件下, 原子热运动形式呈现阱中自由粒子。图 6(c)反映极低温度情况下, 原子热运动位移、动能、势能、总能量等与时间的关系。

上述分析表明, 固体中原子热运动形式不是一成不变的, 由高温降低至绝对 0 度, 固体中原子运动热运动形式由简谐振动逐步退化为阱中自由粒子。现有固体热运动理论, 对原子振动恢复力的来源, 以及运动幅度与温度关系等认识存在偏差, 没有看到原子热运动形式随温度变化而变化的辩证过程。

#### 4.4. 固体剩余动能与 0 点能产生机理

现有物理学理论认为, 无论高温还是低温条件下, 固体中原子的热运动形式都是振动形式, 振动能量量子化。若振动的圆频率为  $\omega$ , 其可能的能量状态为:

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (30)^{[7,8]}$$

其中,  $n = 0$ ,  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$  为最小能量, 叫势能陷阱<sup>[9]</sup>, 即 0 点能。

关于低温原子的热运动形式以及 0 点能, 本文的看法与现有理论观点差别显著, 认为高温条件下, 固体原子热运动形式呈简谐振动, 温度降低固体原子热运动形式逐步向阱中自由粒子转化, 0 点能为动能, 而不是势能。固体 0 点能的产生机理如下。

根据 4.3 节的认识结论: 在低温条件下, 固体中原子振动失谐, 热运动的平均动能大于平均势能。在质心运动与“边界碰撞”为弹性碰撞的条件下, 大于平均势能的部分动能不会对外释放, 我们把不能对外释放的这部分动能称为剩余动能。温度越低, 剩余动能越大, 图 6 中蓝色标识区域的能量, 为不能对外释放的剩余动能。图 6 中黄色标识区域的能量, 随质心偏离平衡位置大小变化, 能量形式在动能与势能之间互相转化, 温度降低这部分能量可以转化为势能对外释放。

温度不同原子振动失谐程度不同, 温度变化剩余动能的数量不同。根据(14)式, 温度由  $T_2$  降为  $T_1$ , 内



能减少量为  $\Delta U(T_2, T_1)$  :

$$\begin{aligned} \Delta U(T_2, T_1) &= U(T_2) - U(T_1) \\ &= 3Nk(T_2 - T_1) - \int_{T_1}^{T_2} (3Nk - C_V) dT \quad (31) \\ &< 3Nk(T_2 - T_1) \end{aligned}$$

其中, 温度由  $T_2$  降为  $T_1$ , 产生的剩余动能  $\Delta E_K(T_1, T_2)$  为:

$$\Delta E_K(T_1, T_2) = \int_{T_1}^{T_2} (3Nk - C_V) dT \quad (32)$$

固体热容量  $C_V$  :

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = 3Nk - \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} (3Nk - C_V) dT < 3Nk \quad (33)$$

(33)式表明, 原子运动空间受限, 温度降低振动失谐, 剩余动能不能对外释放, 这是热容量随温度降低而减小, 并随温度趋于绝对 0 度衰减为 0 的内在原因。

温度为  $T$ , 累积的剩余动能总量  $\Delta E_K(T)$  :

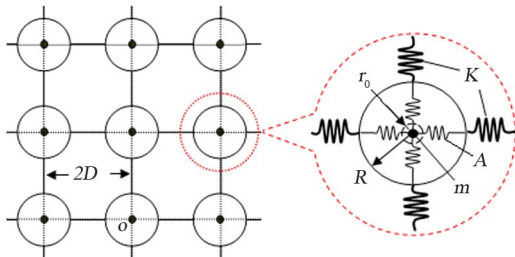
$$\begin{aligned} \Delta E_K(T) &= \Delta E_K(T, \infty) = \int_T^{\infty} (3Nk - C_V) dT \\ &= \Delta E(T) \end{aligned} \quad (34)$$

(34)式表明, 温度为  $T$ , 剩余动能  $\Delta E_K(T)$  的数量等于固体内能曲线与渐近线  $3NkT$  的偏差量  $\Delta E(T)$ 。

温度降低过程, 原子不能对外释放的剩余动能不断积累增大, 绝对 0 度时达到最大值, 即(15)式 0 点运动能  $E_0$ 。可见, 0 点能是动能而非势能。图 5 中 III 区域和图 6 绿色区域大小随温度变化, 直观地反映了剩余动能和 0 点能的产生机理。

#### 4.5. 固体微观结构模型

根据以上分析, 本文重构固体微观结构模型如图 7 所示, 图中各个原子的热运动近似独立。



$K$  原子间相互作用;  $r_0$  质心最大运动半径;  $A$  原子振动恢复力  $O$  质心平衡位置;  $R$  原子半径;  $2D$  原子间距;  $m$  原子质心。

Figure 7. Micro-structure model of solids  
图 7. 固体微观结构

$A$  是原子核与核外电子的相互作用, 它是原子质心振动恢复力的来源, 温度升高弹性系数  $A$  增大, 温度降低弹性系数  $A$  减小, 并随温度趋于绝对 0 度而衰减为 0。

$K$  是原子间的相互作用, 杨氏模量、切变模量、热胀冷缩、热能传递等固体宏观物理量的决定因素。温度升高  $K$  值变小, 温度降低  $K$  值增大。

$2D$  是原子间的间距。温度升高原子间距增大, 固体体积增大, 温度降低原子间距缩小, 固体体积缩小。 $R$  是原子半径,  $r_0$  是原子质心运动最大半径。

$D$ 、 $R$ 、 $r_0$  三者数量关系:  $r_0 \ll R < D$ 。

原子质心热运动机理: 高温条件下, 质心受弹簧  $A$  的作用, 在平衡位置附近振动, 振幅  $q_{\max} < r_0$ 。低温条件下, 弹性系数  $A$  随温度降低而变小, 质心振幅随温度降低而增大但限制在  $r_0$  内, 振动失谐, 质心在限定空间中运动, 平均动能大于平均势能, 质心热运动形式由简谐振动逐步转化为陷阱中自由粒子。绝对 0 度时弹性系数  $A=0$ , 原子运动形式为陷阱中自由粒子, 陷阱半径为  $r_0$ 。

与机械波在固体中的传播速度相比, 即使是金属等热的良导体, 传热速度也十分微小, 说明固体微观运动的波机制存在严重缺陷。图 7 固体微观热运动机理, 有效地克服了“波速很大, 传热速度很小”的矛盾。

#### 5. 小结

本文研究得出了若干原创性的认识结论, 这些创新认识改变了现有观念, 并对今后研究固体热运动规律提供方向性指导, 具有重要的理论意义和实践意义。

1) 任意温度, 固体的内能大于  $3NkT$ , 即  $U(T) > 3NkT$  恒成立, 内能曲线从渐近线  $3NkT$  的上方趋近渐近线。这一认识改变: 现有固体内能理论  $U \leq 3NkT$  的认识观点。

2) 固体原子振动恢复力来自原子内部, 而不是原子间的相互作用。原子热运动半径随着温度降低而增大, 随着温度升高而减小。原子热运动形式, 高温条件下呈简谐振动, 低温条件下呈陷阱中自由粒子。这些认识改变: 原子热运动形式是微振动, 振动恢复力来源于原子间相互作用, 温度越高原子热运动半径越大等现有理论观点。

3) 固体 0 点运动能量  $E_0 = \int_0^{\infty} (3Nk - C_v) dT$ 。特征温度与固体 0 点能相对应。改变：德拜温度对应振动最大圆频率的观点等。

对固体微观热运动的认识，本文的认识较现有理论观点有质的升华，具有原创性，有效克服了现有理论诸多局限性。但是本文给出的还是定性的描述，精确表达还有待学界的进一步深入研究。

## 6. 致谢

感谢我的硕士生导师空军后勤学院高全仁教授，博士生导师后勤指挥学院林孝诚教授、王宗喜教授等，他们赋予我智慧的双眼，辩证的思维方法和自主创新的能力。感谢后勤指挥学院 02 级全体博士生，在共同的学习生活中，鼓励和鞭策我不断自主创新，并给予诸多有益的启迪。感谢我的孩子、中南林业科技大学硕士研究生余泽华同学，质疑被学术界普遍接受的名家理论绝非易事，每次心生彷徨时，他总是赞美我的学术观点“充满智慧的光芒”，给我以继续努力的信心和力量。感谢我的妻子吴锦伟女士对我学术

研究的一贯支持。感谢《现代物理》等学术期刊的编辑，他们为我学术观点的传播提供机会和平台。感谢徐州市农业委员会市场与经济信息处处长葛光明、主任科员鹿林，他们良好的品德修养、孜孜不倦的学习精神、一丝不苟的工作态度是我学习的榜样。感谢网络平台，它是我不断获取新知识的主要途径。

## 参考文献 (References)

- [1] Debye model. [http://en.wikipedia.org/wiki/Debye\\_model](http://en.wikipedia.org/wiki/Debye_model)
- [2] Debye specific heat. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/Solids/phonon.html>
- [3] High and low temperature limits Debye specific heat. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/Solids/phonon.html>
- [4] 四川大学数学系高等数学教研室：高等数学[M]. 北京：人民教育出版社，1978：119-122.
- [5] 汪志诚. 热力学·统计物理[M]. 北京：人民教育出版社，1980：261.
- [6] 图片来源. <http://wenku.baidu.com/view/9fcad0906bec0975f465e28b.html>
- [7] Zero-point energy. [http://en.wikipedia.org/wiki/Zero-point\\_energy](http://en.wikipedia.org/wiki/Zero-point_energy)
- [8] Quantum harmonic oscillator. [http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum\\_harmonic\\_oscillator](http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_harmonic_oscillator)
- [9] Potential well. [http://en.wikipedia.org/wiki/Potential\\_well](http://en.wikipedia.org/wiki/Potential_well)