13. ročník, úloha III . P ... *šup sem, šup tam* *(5 bodů; průměr ?; řešilo 18 studentů)*

Spočtěte frekvenci kmitů atomů v krystalu NaCl. Můžete si úlohu zjednodušit tak, že budete uvažovat pouze coulombovské působení sousedních atomů. Jako bonus můžete spočítat i amplitudu výchylky.

Jak jste se mohli přesvědčit, tenhle příklad byl těžký (a počet řešitelů tomu napovídá). Způsoby řešení byly obecně různé, téměř každý se pokusil řešit problém svým způsobem.

Představme si, že máme atom (zatím je nám jedno, jestli Na nebo Cl), který kmitá mezi dvěma jinými, o kterých předpokládejme, že se nepohybují. Představme si, že systém našich atomů je v rovnováze[1] a my teď vychýlíme prostřední z nich o Δ směrem k sousednímu atomu. Platí

$$F = F_B - F_A = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{(d-\Delta)^2} - \frac{1}{(d+\Delta)^2}\right) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4\Delta d}{(d^2-\Delta^2)^2}\,.$$

V čitateli jsme položili efektivní náboj Na i Cl roven e, protože jeden elektron z elektronového obalu Na přejde do valenční vrstvy atomu Cl, tedy Na se změní v iont Na^+ a Cl v Cl^-. Ve jmenovateli můžeme Δ^2 zanedbat vůči d^2 a dostaneme

$$F = \frac{-e^2}{\pi\varepsilon_0 d^3}\cdot\Delta = -\varkappa\cdot\Delta\,.$$

Vidíme, že síla je přímo úměrná výchylce. Formálně (co do zápisu) je tato síla totožná se silou pružnosti při harmonických kmitech pružiny. Jestliže na soustavu působí síla úměrná výchylce (a samozřejmě proti pohybu), potom soustava kmitá s úhlovou frekvencí $\omega = \sqrt{\varkappa/m}$. Můžeme tedy říct, že atom bude kmitat s úhlovou frekvencí

$$\omega = \sqrt{\frac{e^2}{\pi\varepsilon_0 d^3 m_{\mathrm{at}}}} \quad\Rightarrow\quad f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{e^2}{\pi\varepsilon_0 d^3 N m_p}}\,, \tag{1}$$

kde $2\pi f = \omega$, a hmotnost atomu jsme položili rovnu nukleonovému číslu N násobenému hmotností protonu m_p. Jediné, co ještě ve vztahu (1) neznáme, je vzdálenost dvou atomů v NaCl. Spočteme ji následovně

$$\varrho = \frac{m}{V} = \frac{\frac{1}{2}\left(m_{\mathrm{Na}} + m_{\mathrm{Cl}}\right)}{d^3} = \frac{m_{\mathrm{Na}} + m_{\mathrm{Cl}}}{2d^3} = \frac{\left(N_{\mathrm{Na}} + N_{\mathrm{Cl}}\right) m_p}{2d^3} \quad\Rightarrow$$

$$d = \sqrt[3]{\frac{\left(N_{\mathrm{Na}} + N_{\mathrm{Cl}}\right) m_p}{2\varrho}} = 0{,}3\,\mathrm{nm}\,, \tag{2}$$

protože krystal je složen napůl z Na a napůl z Cl. $\varrho = 2200\,\mathrm{kg\cdot m^{-3}}$ je hustota kuchyňské soli.

Jestliže rovnici (2) dosadíme do (1), dostáváme konečný výsledek

$$f = \sqrt{\frac{e^2\varrho}{2\pi^3\varepsilon_0\left(N_{\mathrm{Na}} + N_{\mathrm{Cl}}\right) N_{\mathrm{Na(Cl)}} m_p^2}} \approx 5\cdot 10^{12}\,\mathrm{Hz}\,. \tag{3}$$

[1] Systém, který popisujeme, by byl nestabilní, kdybychom uvažovali jenom coulombické síly. Důvod, proč jsou atomy v krystalech v takové vzdálenosti jak jsou, tkví v kvantové mechanice a nebudeme ho rozebírat. Nám bude stačit skutečnost, že existuje poloha, ve které jsou atomy v krystalu v rovnováze.

Podobný výsledek se dá získat i jinými způsoby, např. pomocí Hookova zákona. Jiný, zajímavější způsob navrhl Peter Čendula. Povrch krystalu si představil jako povrch černého tělesa (ve skutečnosti to však černé těleso není). Vyzařování fotonů je vázáno kmity mřížky krystalu, to znamená, že vyzářené fotony budou mít frekvenci blízkou frekvenci vlastních kmitů mřížky (alespoň řádově). Platí

$$\lambda_m = \frac{b}{T} = \frac{c}{\nu_m} \approx \frac{c}{f} \quad \Rightarrow \quad f \approx \frac{cT}{b} = 3 \cdot 10^{13}\,\mathrm{Hz}\,.$$

Vzhledem k tomu, že jsme dělali jenom řádový odhad, tak jsme nerozlišovali mezi frekvencí kmitů Na a Cl. Podle vztahu (3) budou tyto obecně různé, ale protože $N_{\mathrm{Na}} \approx N_{\mathrm{Cl}}$, nebudou se příliš lišit. Ještě si spočteme poměr těchto frekvencí, podle vztahu platí

$$\frac{f_{\mathrm{Na}}}{f_{\mathrm{Cl}}} = \sqrt{\frac{N_{\mathrm{Cl}}}{N_{\mathrm{Na}}}} = 1{,}25\,.$$

Amplitudu kmitů odhadneme postupem, který mnozí z vás znají. Jmenuje se *ekvipartiční teorém* a říká, že na každý stupeň volnosti částice připadá energie $E = kT/2$, kde $k = 1{,}38 \cdot 10^{-23}\,\mathrm{J{\cdot}K^{-1}}$ je Boltzmannova konstanta. Stupněm volnosti se rozumí, kolik různých pohybů může částice vykonávat. Např. atom He v plynném stavu má tři stupně volnosti, může se pohybovat ve směru os x, y, z. Molekula plynného vodíku H_2 má stupňů volnosti 5. Tři posuvné jako hélium, a dva rotační. Třetí rotační stupeň volnosti je degenerován, osa rotace je rovnoběžná s vazbou. Kdyby se točila kolem této osy, tak vidíme stejný stav, jako by se netočila.

Podle ekvipartičního teorému a zákona zachování energie tedy platí pro jeden atom uvnitř krystalu (v krystalu připadá na jeden atom šest stupňů volnosti, neboť harmonický oscilátor má dva stupně volnosti a atom může kmitat ve všech třech osách)

$$E_{\mathrm{kin}} = 3kT = \frac{1}{2}\varkappa\Delta^2_{\mathrm{celk}}\,.$$

Výchylky v osách x, y, z se sčítají, a jsou samozřejmě stejné (jinak by existoval v krystalu význačný směr), platí tedy

$$\Delta^2_{\mathrm{celk}} = \Delta^2_x + \Delta^2_y + \Delta^2_z = 3\Delta^2\,.$$

Tedy celková amplituda bude

$$\Delta_{\mathrm{celk}} = \sqrt{\frac{6kT}{\varkappa}} = \sqrt{\frac{6kT\pi\varepsilon_0 d^3}{e^2}} \approx 10^{-11}\,\mathrm{m}\,.$$

Amplituda mezi dvěma atomy bude zhruba poloviční $(1/\sqrt{3})$. Vidíme, že skutečně $\Delta \ll d$.

Pavol Habuda

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty UK MFF. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci UK MFF a podporován Ústavem teoretické fyziky UK MFF, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.