

Drgania harmoniczne i kryształ doskonały

Ruch drgający harmoniczny stanowi rzut na prostą X ruchu jednostajnego po okręgu. W związku z tym konieczne jest wprowadzenie kilku kluczowych pojęć.

Miara łukowa kąta α - stosunek długości łuku l , na którym oparty jest kąt α do promienia okręgu R (łac. *radius*: promień).

$$\alpha = \frac{l}{R}$$

Prędkość kątowna ω (gr. minuskula *omega*) - stosunek kąta α do czasu t , w którym kąt ten został zakreślony.

$$\omega = \frac{\alpha}{t} = \alpha \frac{1}{t} = \frac{l}{Rt}$$

Okres drgań T - czas jaki potrzebuje punkt aby zakreślić kąt pełny ($\alpha = 2\pi$), przebyć drogę $l = 2\pi R$ (obwód okręgu) i powrócić do położenia początkowego.

$$\omega = \frac{l}{Rt} = \frac{(l = 2\pi R)}{R(t = T)} = \frac{2\pi}{T}$$

Często(tliwo)ść drgań ν (gr. litera *ni*) - odwrotność okresu drgań T .

$$\nu = \frac{1}{T}$$

A więc

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi \frac{1}{T} = 2\pi\nu$$

Kwantowy oscylator harmoniczny - układ o rozmiarach atomowych, który wykonuje drgania (oscylacje) pod wpływem siły F (ang. *Force*: siła) proporcjonalnej do jego wychylenia x z położenia równowagi. Energia i -tego poziomu energetycznego ($i = 0, 1, 2, 3, \dots$) kwantowego oscylatora harmonicznego przyjmuje wartości dyskretne (gdzie h to stała Plancka):

$$\varepsilon_i = h\nu \left(i + \frac{1}{2} \right) = h\nu \left(\frac{2i + 1}{2} \right)$$

Ponieważ indeks i odpowiada liczbie naturalnej to w nawiasie okrągłym występuje zawsze połowa liczby nieparzystej $2i + 1$. Gdy zastosujemy pusty iloczyn pojawia się kolejna stała zwana zredukowaną stałą Plancka \hbar .

$$\varepsilon_i = h\nu \left(i + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{2\pi}{2\pi} = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu \left(i + \frac{1}{2} \right) = \hbar \frac{2\pi}{T} \left(i + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(i + \frac{1}{2} \right)$$

Ile wynosi energia drgań oscylatora kwantowego dla $i = 0$?

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} h\nu$$

Jest to **energia drgań zerowych** $\varepsilon_0 \neq 0$: najniższa i niezbywalna energia, jaką może posiadać harmoniczny oscylator kwantowy (drgania w mikroświecie nigdy nie ustają!). W przypadku kwantowego oscylatora harmonicznego sąsiadujące ze sobą **poziomy energetyczne są równoodległe** z odstępem, który jest równy iloczynowi stałej Plancka i często(tliwo)ści drgań.

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_i - \varepsilon_{i-1} = h\nu \left(i + \frac{1}{2} \right) - h\nu \left(i - 1 + \frac{1}{2} \right) = ih\nu + \frac{1}{2}h\nu - (ih\nu - h\nu + \frac{1}{2}h\nu)$$

$$\Delta\varepsilon = h\nu$$

Model teoretyczny opisujący pojemność cieplną kryształu doskonałego został sformułowany przez A. Einsteina już w 1906 roku. Model ten zakłada, że krystaliczne ciało stałe ma stałą objętość V (ang. *Volume*) oraz stanowi regularną sieć złożoną z N identycznych atomów, z których każdy wykonuje harmoniczne oscylacje wokół pozycji równowagi z identyczną często(tliwo)ścią ν . Cechą charakterystyczną kryształu doskonałego (struktura izotropowa) jest brak defektów sieci. Atomy wchodzące w skład kryształu nie mogą opuszczać swoich pozycji węzłowych (brak swobody translacji) oraz nie mogą wykonywać ruchu obrotowego: są zatem rozróżnialne! Pozycję każdego atomu możemy precyzyjnie określić podając jego współrzędne np. w kartezjańskim układzie współrzędnych. Atomy w kryształach wykonują jedynie drgania (harmoniczne) wokół swoich położenia równowagowych.

Literatura uzupełniająca

[1] David Hayward, *Mechanika kwantowa dla chemików*, PWN, Warszawa, 2018.