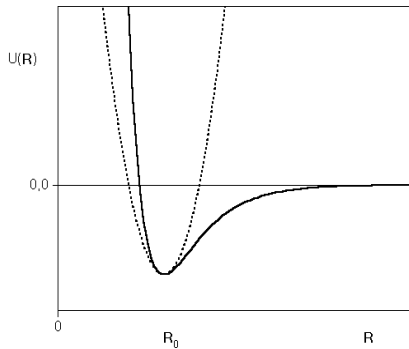


Harmoninis artėjimas

Nagrinėkime du atomus nutolusius vienas nuo kito atstumu R . Kokios jėgos juos veikia? Prisiminkime, kad kietuosius kūnus galima skirstyti (gan sąlyginai) pagal atomų sąveikos



tipą į kelias grupes. Tai joniniai, kovalentiniai, inertinių dujų (arba molekuliniai) ir metaliniai kristalai. Kartais dar išskiriami į atskirą klasę junginiai surišti vandeniliniiais ryšiais. Nežiūrint medžiagų įvairovės, atomų tarpusavio sąveiką galima išskirti į dvi dalis. Kai atstumas tarp atomų $R > R_0$, vyrauja traukos jėgos. Priešingu atveju – stūmos. Taške R_0 traukos ir stūmos jėgos išsibalansuoja, todėl jis vadinamas pusiausvyros tašku. Piešinyje ištisine linija

pavaizduotas tipinis molekulių tarpusavio sąveikos potencialas $U(R)$. Skleiskime jį Teiloro (Taylor) eilute taško R_0 aplinkoje

$$U(R) = U(R_0) + \left(\frac{dU}{dR} \right)_{R_0} (R - R_0) + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R_0} (R - R_0)^2 + \dots \quad (4.1)$$

Iš karto galima pastebėti, kad antras skleidinio (1) narys lygus nuliui, nes skleidžiame pusiausvyros (minimumo) taško aplinkoje. Jėga apibūdinama kaip pirmoji potencialo išvestinė pagal koordinatę (su priešingu ženklu)

$$F = -\frac{dU}{dR} = -\left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R_0} (R - R_0) + \dots = -C(R - R_0) + \dots \quad (4.2)$$

čia dydis $C = \left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R_0}$ vadinamas jėgos konstanta.

Jei skleidime apsiribosime tik šiuo vieninteliu nariu, turėsime Huko (Hooke) dėsnį gerai žinomą klasikinėje mechanikoje. Nagrinėjant kristalo gardelės svyravimus, dažniausiai apsiribojama tik šiuo nariu. Toks artutinus vadinamas harmoniniu. Šiame artėjime potencinė energija pakeičiama kvadratine priklausomybe, t.y. parabole (žiūr. paveikslėlyje brūkšniuotą liniją). Akivaizdu, kad toks artutinus gerai tinka tik tada kai R nedaug skiriasi nuo R_0 , arba kitais žodžiais sakant tada kai svyravimų amplitudė yra maža. Deje toks artutinus, nors ir labai dažnai naudojamas, galioja ne visuomet. Tada tenka įskaityti ir aukštesnius, taip vadinamus anharmoninius, narius. Toks artėjimas vadinamas anharmoniniu. Anharmoniniai nariai (arba

anharmonizmai) dažnai būna labai svarbūs aiškinant kai kuriuos fizikinius reiškinius, pvz., šiluminių kietų kūnų plėtimą, sužadinto kieto kūno grįžimą į pusiausvyrą (relaksaciją) ir t.t. Bet jų įskaitymas daro teoriją sudėtingą, tad jei tik galima stengiamasi apsiriboti harmoniniu nariu. Šiame kurse mes naudosimės tik harmoniniu artutiniu.