

A cím senkit se tévesszen meg! Ez csak reklámfogás a figyelem felcsigázására. Mert itt egyáltalán nem beszélhetünk a közönséges értelemben vett atomokról. De hogy mégis mikor és milyen értelemben lehet szó a hővel kapcsolatban részecskékről, amelyeket éppen a jelenség bonyolultsága miatt csak kvázi-részecskéknak (majdnem-részecskéknak, alig-részecskéknak) fogunk nevezni, ezt próbáljuk a következőkben megvilágítani.

Közismertek a mechanikai, elektromos stb. energiafajták hőenergiává való átalakulásának különböző folyamatai: sűrűlódás, rugalmatlan ütközés, Joule-hő keletkezése stb. Ezek közül ragadjunk ki egyet kissé részletesebb vizsgálat céljából, és egyelőre a hőtanra való minden utalás nélkül vizsgáljuk meg a rugalmatlan ütközésnek egy modelljét.

A számítások egyszerűsítése érdekében ideális feltételeket teremtünk a kísérlet számára, legalábbis gondolatban. Kísérleti eszközünk két, rugóval összekötött  $m$  tömegű golyó. Mivel ez a továbbiakban igen gyakran fog szerepelni, ezért külön nevet is adunk neki, lineáris harmonikus oszcillátornak fogjuk nevezni. Lineáris azért, mert a golyók csak egy egyenes, az  $x$ -tengely mentén mozoghatnak. Harmonikus azért, mert a súlytalannak tekinthető rugó pontosan a megnyúlásával arányos erővel hat a végein levő tömegekre, és ezért ha más erő nem hat, a tömegek legáltalánosabb mozgása egy egyenes vonalú egyenletes sebességű haladó mozgásból és egy harmonikus rezgőmozgásból tevődik össze. (Bizonyítását lásd a 650. feladatban.) Vagyis a tömegek koordinátája az idő függvényében:

$$\begin{aligned}x_1 &= x_{1,0} + v_0 t + A \sin(\omega t + \delta), \\x_2 &= x_{2,0} + v_0 t - A \sin(\omega t + \delta),\end{aligned}$$

A sebességük pedig:

$$\begin{aligned}v_1 &= v_0 + A \omega \cos(\omega t + \delta), \\v_2 &= v_0 - A \omega \cos(\omega t + \delta),\end{aligned}$$

$A$  a rezgés amplitúdója,  $\delta$  a kezdő fázisa,  $D$  a rugó direkciós ereje és

$$\omega = \sqrt{\frac{2D}{m}}.$$

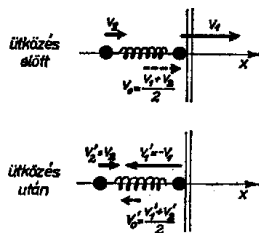
Az oszcillátor energiája két részből tevődik össze, a két tömeg mozgási energiájából és a rugó megnyújtásába, ill. összenyomásába befektetett energiából:

$$E = \frac{1}{2}(mv_1^2 + mv_2^2) + \frac{1}{2}D(\Delta l)^2.$$

Mivel  $\Delta l = 2A \sin(\omega t + \delta)$ , ezért a behelyettesítés és rendezés után:

$$E = \frac{1}{2}(2m)v_0^2 + \frac{1}{2}(2m)A^2\omega^2.$$

Az energia ismét két szemléletes részre bontható. Az első tag a  $2m v_0$  sebességgel haladó oszcillátornak, mint egésznek a mozgási energiáját adja, a másik pedig a rezgési energiának felel meg, ennyi lenne az oszcillátor összenergiája, ha nem végezne haladó mozgást.



1. ábra

Most kövessünk el egy merényletet az eddig békésen rezgő oszcillátor ellen. Tegyük az útjába egy végtelen nagy tömegű falat, amelybe a közelebb levő golyó abszolút rugalmasan ütközik (1.ábra). Az ütközés részleteinek leírását és a számolás menetét ugyancsak lásd a 650. feladatban. Mi most csak az energiaviszonyokat vizsgáljuk. Tegyük fel, hogy az ütközés  $\tau$  időpillanatban következett be, így közvetlenül az ütközés után az egyes tömegek sebessége:

$$\begin{aligned}v_1' &= -v_0 - A \omega \cos(\omega \tau + \delta), \\v_2' &= v_0 - A \omega \cos(\omega \tau + \delta).\end{aligned}$$

Az összenergia változatlan, de az oszcillátor haladó mozgásának sebessége, ami egyenlő a tömegközéppont sebességével, a következő lesz:

$$v_0' = \frac{v_1' + v_2'}{2} = A \omega \cos(\omega \tau + \delta).$$

Tehát az oszcillátor haladó mozgásának energiája:

$$E'_m = \frac{1}{2}(2m)v_0'^2 = mA^2\omega^2 \cos^2(\omega\tau + \delta).$$

Az energiamegmaradás alapján kapjuk a rezgési energiát:

$$E'_r = E - E'_m = mv_0^2 + mA^2\omega^2[1 - \cos^2(\omega\tau + \delta)] = mv_0^2 + mA^2\omega^2 \sin^2(\omega\tau + \delta).$$

Tehát az ütközés során a konkrét adatoktól függően a mozgási és a rezgési energia átalakulhat egymásba. Például ha megfelelő fázisban történik az ütközés, amikor  $\sin^2(\omega\tau + \delta) = 1$ , akkor az oszcillátor haladó mozgása teljesen leáll. Érdekes viszont, hogy ha  $v_0 \neq 0$ , akkor a rezgési energia nem tud teljes egészében mozgási energiává alakulni.

Ezek után bonyolítsuk kissé a helyzetet. Tegyük fel, hogy nagyon sok, mondjuk  $N$  számú ilyen oszcillátorunk van, és rendezzük őket csatornákba úgy, hogy mindegyik  $v_0$  sebességű haladó mozgást és  $A$  amplitúdójú rezgést végezzen, de a  $\delta$  fázisszög teljesen véletlenszerűen legyen más és más. Ekkor mint egészet tekintve azt mondhatjuk, hogy a rendszer  $v_0$  sebességgel halad, a rugók középpontját akár mereven össze is köthetnénk, mivel az nem vesz részt a rezgésben.

Képzeljük el, hogy  $\tau$  időpillanatban az oszcillátorok egyszerre egy végtelen tömegű falba ütköznek. Kérdés az, hogy az ütközés után a rendszernek mint egésznek mi lesz a sebessége. Ezen a sebességen természetesen a tömegközéppont sebességét értjük. Az előbbieket szerint az  $i$ -edik oszcillátor sebessége az ütközés után:  $v_i = A\omega \cos(\omega\tau + \delta_i)$ . A tömegközéppont sebességét pedig pontosan a

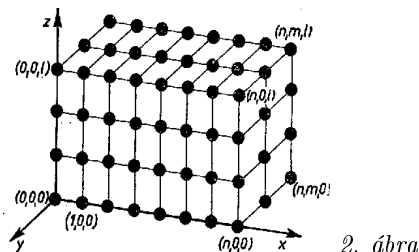
$$V_0 = \frac{\sum_{t=1}^N A\omega \cos(\omega\tau + \delta_t)}{N}$$

kifejezés adná, de az szemléletesen is látszik, hogy a véletlen eloszlás miatt minden  $i$ -edik oszcillátorhoz található egy vele ellentétes vagy legalábbis közel ellentétes fázisban levő  $k$ -edik oszcillátor, vagyis  $\delta_i + \pi \approx \delta_k$  ( $180^\circ = \pi$  radián). Így ezek a tagok páronként 0-t adnak. Tehát  $V_0 = 0$ , vagyis a rendszer mint egész leáll. Gondoljunk csak meg, pontosan ez történik a tökéletesen rugalmatlan ütközésnél, ha egy test végtelen tömegű falba ütközik. Ezt az esetet általában röviden úgy szokták elintézni, hogy a test mozgási energiája hővé alakult át. Modellünk, ez a fázis szerint rendezetlen oszcillátor-halmaz az ütközés után szintén megállt, de itt a mozgási energia nem hővé, hanem rugók (oszcillátorok) rezgési energiájává alakult át.<sup>1</sup> Ez sugallja azt az ötletet, hogy a hőenergia szilárd testekben valamilyen oszcillátorok energiájából tevődik össze.

Az oszcillátor gondolata más szempontból is önként adódik. Vizsgáljunk csak meg egy szilárd halmazállapotú testet. Miért szilárd egy test? Mert az atomjai helyhez kötöttek, legfőljebb valamilyen nyugalmi helyzet körüli vibrációra jut az energiájukból. Tehát az egyes atomokat tekintsük az elemi harmonikus oszcillátoroknak? Bár a gondolat tetszetős, de több érv szól ellene. Gondoljunk csak meg, hogy mennyire lehet harmonikus, azaz szinuszos egy olyan atom rezgése, amelyre ható erő a szomszédos, szintén rendezetlen mozgást végző atomoktól ered. Ilyen körülmények között nyugodtan mondhatjuk, hogy egy-egy atom az anharmonikus oszcillátor kiváló példánya. Szilárd test esetén éppen az a probléma, hogy az egyes atomokat nem lehet a többitől elkülönítve tárgyalni, mert az egyes atomok között olyan erős a kölcsönhatás, hogy egyetlen atom megbolygatása még a viszonylag távol levő atomokra is nagy hatással van. A szilárd testek ezen tulajdonságából következik, hogy az elmélet megalkotásánál bizonyos kollektív, több atomot kölcsönösen jellemző sajátságokat kell megragadni.

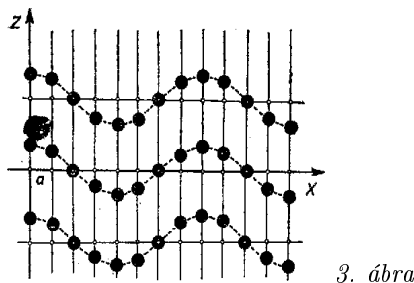
Mielőtt azonban erre rátérnénk, említést kell tennünk a szilárd testek egyik legjellegzetesebb tulajdonságáról, a kristályos szerkezetről. A kristályos szerkezet azt jelenti, hogy az atomok (ill. a nekik megfelelő egyensúlyi helyzetek, amelyek körül ide-oda rezegnek) a térben periodikusan helyezkednek el. A periodicitás nyilvánvalóan matematikai könnyebbséget jelent, másrészt azonban mélyreható elvi követelményekkel is jár. A közhiedelemmel ellentétesnek látszik az az állítás, hogy a szilárd halmazállapottal mindig együtt jár a kristályos szerkezet, de ezt a legtöbb esetben (pl. fémeknél) szemmel azért nem vesszük észre, mert az egyes darabok sok-sok apró kristályszemcséből tevődnek össze. Vannak a természetben amorf szilárd testek is, amelyekben az atomok kaotikusan elosztott egyensúlyi helyzetek körül rezegnek. Ezek azonban termodinamikai szempontból nincsenek egyensúlyban, úgynevezett metastabil állapotok, és idővel átkristályosodnak, csak ez az átkristályosodási idő olyan nagy lehet, hogy gyakorlatilag korlátlan ideig megtartják amorf jellegüket.

<sup>1</sup>Még ez az átalakulás sem volt teljes, hisz a legtöbb oszcillátornál maradt még mozgási energia is, mert  $\cos(\omega\tau + \delta_t) = 0$  csak kevés esetre teljesült. Ezen úgy segíthetünk, hogy az ellentétes fázisban rezgő oszcillátorokat a középpontjukban egy rugóval kötjük össze, ennek az ütközés előtt nincs semmi hatása, de az ütközés után megakadályozza az oszcillátorok szétszaladását.



A 2. ábra mutat egy egyszerű kristályszerkezetet, ahol csak az egyensúlyi helyzeteket jelző fekete pontokat tüntettük fel. Egy origónak tekintett pontból kiindulva sorban meg is számozhatjuk a rácspontokat és ezzel mintegy elnevezzük az adott rácspont körül rezgő atomot.

Ezek után ismerkedjünk meg az atomok kollektív mozgásának egy speciális esetével, amely talán az első pillanatra kissé bonyolultnak tűnik. E mozgás során a kollektív jelleg abban nyilvánul meg, hogy bár minden atom külön-külön a  $z$ -tengellyel párhuzamos lineáris harmonikus mozgást végez, de ezen harmonikus rezgések fázisa a leghangosabb módon össze van hangolva. Mégpedig úgy, hogy a  $(z, y)$  síkkal párhuzamos síkokban levő atomok (a 3. ábrán az atomokat körök jelzik) azonos fázisban vannak, vagyis olyan, mintha az egész sík egyszerre mozdult volna el egy adott irányban. Viszont az egymás melletti síkok rezgésének fázisai között  $K$  fáziskülönbség van. Így az egész szilárd test olyan, mintha egy hullám szaladna rajta végig.



A mozgást tömören matematikai alakban írhatjuk le. Az  $(n, m, l)$  számokkal jelzett atom

$x$ -irányú elmozdulása:  $u_{n, m, l} = 0$ ,

$y$ -irányú elmozdulása:  $v_{n, m, l} = 0$ ,

$z$ -irányú elmozdulása:  $w_{n, m, l} = q \sin \left( \omega t - K n \right) = q \sin \left( \omega t - \frac{K}{a} x \right)$ .

Itt  $\frac{x}{n} = a$  a ráczállandó, az  $x$ -tengelymenti szomszédos atomok távolsága.

A matematikai alak már jól jellemzi ezt a mozgásformát, tudniillik, hogy ez kétszeresen harmonikus valami: az időbeli harmonicitáshoz egy térbeli ( $x$ -tengelymenti) is járul. Valóban, ha rögzített  $t$  időpillanatban végignézünk egy az  $x$ -tengellyel párhuzamos egyenesen, akkor az atomok kitérése a szinuszcsoportot követi. A szilárd test ilyen adott irányhoz és  $\omega$ -hoz tartozó hullámszerű mozgását *normálmódusnak* nevezzük. Hogy egy normálmódus mennyire van gerjesztve, azt a  $q$  amplitúdó mutatja. Nyilvánvaló, hogy egy ilyen rezgésállapot létrehozásakor energiát kell befektetni, mégpedig annál több energiát, minél nagyobb amplitúdóval történik a mozgás. Ez az a pont, ameddig több-kevesebb szemléletességgel eljuthatunk. A következő lépések olyan komoly matematikai apparátust igényelnek, hogy itt csak a végeredményekre szorítkozhatunk.

1. Az atomok egyensúlyi helyzetből való kitérései mindig felbonthatók a megfelelő amplitúdóval vett normálmódusok összegére. Vagyis ahelyett, hogy az egyes atomok mozgását tanulmányoznánk, áttérhetünk a normálmódusok vizsgálatára.

2. Az egyes normálmódusok matematikailag úgy írhatók le, mint különálló lineáris harmonikus oszcillátorok.

Így az egymásra erős kölcsönhatást gyakorló atomokból álló szilárd testet sikerült oszcillátorok halmazára bontani. Az oszcillátorok rezgési frekvenciájának meghatározása igen érdekes, de talán éppen ezért nagyon nehéz feladat. Annyit azonban mondhatunk, hogy kell lennie valami maximális frekvenciának, mert a szilárd test ugyan nagyon sok, de azért mégis véges számú atomból áll. És nyilvánvaló, hogy a szilárd testhez rendelt oszcillátorok száma nem haladhatja meg a szilárd testben levő atomok elmozdulásait leíró szabadsági fokok számát.

3. A kvantummechanika szerint egy  $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$  frekvenciájú lineáris harmonikus oszcillátor energiája csak  $E = h\nu$  egész számú többszöröse lehet (ahol  $h$  a Planck-állandó).

Ezt az energiaadagot nevezzük *fononnak*, a fotonnak a mintájára, amelyet matematikailag szintén a normálmódusok segítségével foghatunk meg, csak ekkor a szilárd test helyett az elektromágneses teret kell ezzel a matematikai trükkkel oszcillátorok halmazára bontani.

A bevezetésben a modell-kísérletben láttuk, hogyan alakulhat át egy rendszer mozgási energiája mechanikai oszcillátorok rezgési energiájává. A fonon fogalmának ismeretében valami ilyesmit lehet gondolnia valóságos testek rugalmatlan ütközésénél, csak valahogy az a helyzet, mint annál a közismert viccnél, amely szerint a Budapest–Debrecen közti távirót úgy kell elképzelni, mint egy kutyát, amelynek Budapesten huzigálják a farkát, és akkor Debrecenben ugat, a drótnélküli távirót pedig ugyanígy, csak kutya nélkül. Vagyis az ütközésnél is a mozgási energiának hőenergiává való átalakulását úgy kell elképzelni, mint az energiának harmonikus oszcillátorok rezgési energiájává való átalakulását „kutya”, azaz mechanikai oszcillátor nélkül. A fonon elképzelés segítségével azonban, ha meg nem is foghatjuk, de azért valahogy mégis megszemélyesíthetjük ezen matematikai konstrukcióként létező oszcillátorok egyik energiáról a másikra való gerjesztését. Lássuk tehát fonon-kép alapján, hogyan megy végbe egy rugalmatlan ütközés. A test kezdetben is valamilyen  $T$  hőmérsékleten volt, ezért már ekkor is gerjesztve voltak benne bizonyos normálmódusok, vagyis a testben volt bizonyos számú fonon. Az ütközéskor pedig a mozgási energia „rezgési energiává” való átalakulásakor vagy új módusok gerjesztődtek, vagy a már gerjesztett módusokra újabb  $h\nu$  energia-adagok kerültek, vagyis a hőmérséklet növekedésének új fononok keletkezése felelt meg.

Az egyes módusok szabályos rezgését ismerve felvetődik az a kérdés, hogy hová tűnik ez a szabályosság az egyes atomok mozgása esetén. Hogy ezt megérthessük, itt kell felhívni a figyelmet arra, hogy akárcsak a gázok esetén, ahol a molekulák gyakorlatilag egymástól függetlenül mozognak, azért például az ütközés révén mégis hatnak egymásra, ugyanígy az egyes normálmódusok sem teljesen függetlenek egymástól. A hasonlatnál maradva, ha a gázba belővünk egy nagy sebességű molekulát, akkor ez az ütközések miatt gyorsan elveszti az energiáját, és csak annyi energiája marad, amennyi a többinek is átlagban van, és ugyanolyan rendszertelen mozgást fog végezni, mint a többi. A kölcsönhatás révén a normálmódusok között is kialakul valamilyen rendszertelen statisztikai egyensúly, hol innen tűnik el egy fonon, hol ott jelenik meg egy másik.

Ezen kölcsönhatás figyelembevételével például könnyen megmagyarázhatjuk, hogyan hal el a rezgés a megpengetett húrban. A húrt vákuumban pengessük meg, hogy ne kelljen figyelembe venni a levegőben hangkeltésre fordított energiát. A húr megszólaltatásával lényegében egy normálmódust gerjesztettünk, mégpedig  $h\nu$ -höz képest igen nagy energiával, ezért nem lehet észrevenni a rezgési energia kvantumos jellegét. Mivel az egyes módusok kölcsönhatásban vannak, ezért ahogy a belőtt molekula az ütközések során, úgy adja le a megpendített módus is véletlenszerűen az energiáját a többi módusra, és így hal el lassan a húr makroszkopikusan is látható rezgése.

Összefoglalásként próbáljunk választ adni a címben felvetett problémára. Láttuk, hogy a kristályos szilárd testek tényleg olyan fizikai objektumok, ahol a hővel kapcsolatban bizonyos kvantumos jellegről beszélhetünk. Ugyanis ezek belső energiájának és így hőmérsékletének változtatása fononok keletkezésével, ill. eltűnésével megy végbe, vagyis az energia csak  $h\nu$  adagokban változhat, ilyen, vagyis energiakvantum értelemben beszélhetünk tehát úgy a fononokról mint a „hőenergia atomjairól”.

A fononok használhatóságának egyik legszebb példája a szilárd testek mólhőjének a meghatározása. A mólhő csak annyiban különbözik a fajhőtől, hogy ezt nem 1 gramm, hanem molekulasúlynyi mennyiségű anyagra kell vonatkoztatni. Ha különböző anyagokat akarunk összehasonlítani, akkor nyilván ez a mérvadó, hiszen így mindig azt kapjuk meg, hogy mennyi energia szükséges ahhoz, hogy Avogadro-számnnyi molekulát tartalmazó anyagminta hőmérsékletét 1 fokkal növeljük. A klasszikus elmélet az ún. Dulong-Petit törvény szerint a mólhő hőmérséklettől független és minden anyagra  $C = 3R \approx 6 \text{ cal/fok}$ . Ez a szobahőmérsékleten általában elég jó közelítéssel teljesül, de teljesen ellentmondásban van a kísérleti tényekkel az alacsony hőmérsékleten, ahol a mérések szerint  $0^\circ\text{K}$ -hoz közeledve  $C$  nullához tart. Viszont ha a számításokat a fononok figyelembevételével végezzük, akkor alacsony hőmérsékleten  $C = A \cdot T^3$  adódik, ahol  $A$  anyagi minőségtől függő állandó, magas hőmérsékleten pedig visszakapjuk a  $C = 3R$  értéket, a kísérleti eredményekkel összhangban.

A fononok létezése azonban nemcsak ilyen közvetett úton látható be, hanem ma már közvetlen kísérletekkel igazolt tény. A mérés úgy történt, hogy neutronokkal bombázták a vizsgált anyagmintát, majd a kristályon való szóródás után a neutron energiáját és impulzusát megmérve az energia és impulzus megmaradásának törvénye alapján meghatározták a keltett vagy eltüntetett fonon energiáját és impulzusát. A mérést azért kellett neutronokkal végezni, mert ezek töltés nélküli részecskék, és így csak gyengén lépnek kölcsönhatásba a test atomjaival, így a szórás kiértékelésénél elég azt figyelembe venni, hogy egy neutron csak egy fononnal „ütközött”.

**Vesztergombi György**