

## ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ОТДЕЛЬНОГО АТОМА – ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СВОЙСТВ ТВЕРДОГО ТЕЛА

© 2021 г. К. М. Ерохин<sup>1,\*</sup>, Н. П. Калашников<sup>2,\*\*</sup>

<sup>1</sup> Московский политехнический университет, Москва, 107023, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, 115409, Россия

\*e-mail: kmekm@yandex.ru

\*\*e-mail: kalash@mephi.ru

Поступила в редакцию 05.02.2021 г.

После доработки 02.03.2021 г.

Принята к публикации 09.03.2021 г.

В работе рассматривается связь между макроскопическими параметрами, такими как модуль Юнга в законе Гука, скорость звука и температура Дебая, и энергией связи отдельного атома. Предложена формула для расчета модуля упругой деформации. Скорость звука в изотропных твердых телах определяется упругими свойствами вещества. Получено соотношение между скоростью звука и энергией связи отдельного атома в твердом теле. Установлена простая формула для расчета скорости звука в металлическом стержне. Предлагается связь характеристической температуры Дебая с энергией связи иона в решетке твердого тела. Показано, что модуль Юнга в законе Гука, скорость звука и температура Дебая не являются независимыми, а определяются величиной энергии связи иона в кристаллической решетке.

*Ключевые слова:* упругая деформация, модуль Юнга, коэффициент, скорость звука, характеристическая температура Дебая, энергия связи атома, концентрация атомов

DOI: 10.1134/S2304487X21010077

### ВВЕДЕНИЕ

В. Вайскопф в серии работ "Просто о сложном" [1] описал возможность микроскопической интерпретации некоторых макроскопических характеристик веществ. Мы предлагаем рассмотреть процесс упругой деформации вещества и связать макроскопическую характеристику, модуль Юнга, с энергией связи отдельного атома и концентрацией атомов в единице объема вещества. В настоящей работе продолжена серия оценок, позволяющих связать макроскопические характеристики такие как, модуль упругой деформации, скорость звука и характеристическая температура Дебая, с энергией связи отдельного атома и концентрацией атомов в единице объема вещества.

### ПРОЦЕСС УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ ВЕЩЕСТВА

Закон Гука предполагает, что упругая сила деформации пропорциональна относительному изменению длины стержня [2]:

$$\frac{F}{S} = \sigma = E \frac{\Delta x}{x}, \quad (1)$$

где  $\sigma$  – напряжение в стержне,  $E$  – модуль Юнга,  $\frac{\Delta x}{x}$  – относительное удлинение стержня.

Упругая деформация стержня приводит к увеличению потенциальной энергии единицы объема стержня [2, 3]:

$$\Delta U / \Delta V = \frac{\sigma^2}{2E} = \frac{E}{2} \left( \frac{\Delta x}{x} \right)^2. \quad (2)$$

Допустим, что мы сообщаем стержню такую потенциальную энергию, что на каждый атом вещества приходится энергия, равная энергии связи атома  $\epsilon_{\text{св}}$  ( $\epsilon_{\text{св}}$  – энергия, необходимая для отделения атома от вещества [3]). Если бы мы проделали такую операцию, то весь материал разделится бы на атомы, т.е. разрушился. Примем качественно, что такое разрушение происходит, когда меж-атомные расстояния увеличиваются в два раза, т.е. длина стержня удваивается:  $\frac{\Delta x}{x} = 1!$

### СВЯЗЬ МОДУЛЯ ЮНГА С ЭНЕРГИЕЙ СВЯЗИ АТОМА В РЕШЕТКЕ

Рассмотрим поведение двух соседних атомов стержня, материал которого характеризуется концентрацией  $n$  ( $10^{28} \text{ м}^{-3}$ ). При относительной

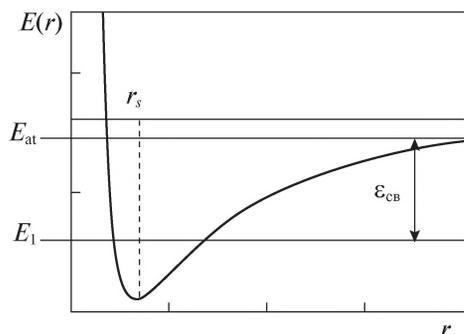


Рис. 1. Качественная зависимость полной энергии электрона проводимости от расстояния до центра ячейки.

деформации  $\frac{\Delta x}{x}$  потенциальная энергия одного атома  $(\Delta U)_1$  увеличивается на величину:

$$(\Delta U)_1 = \frac{E}{2} \left( \frac{\Delta x}{x} \right)^2 \frac{1}{n}. \quad (3)$$

С другой стороны, увеличение потенциальной энергии для “максимально” возможной деформации  $\frac{\Delta x}{x} = 1$  равняется  $\epsilon_{св}$ .

Таким образом, мы получаем оценку для модуля Юнга:

$$E = 2n\epsilon_{св} \quad (4)$$

На рис. 2 приведены результаты расчетов модуля Юнга для ряда металлов на основе форму-

лы (4). Для сравнения приведены его экспериментальные значения в длинном стержне [4, 5].

Как видно из рис. 2, большинство простых твердых тел обладают модулем Юнга порядка сотни ГПа [6]. Как показывают результаты вычислений, коэффициент корреляции между расчетными и экспериментальными данными составляет 0.95. Таким образом, макроскопический параметр как степень жесткости материала определяется микроскопическим параметром, таким как удельная энергия связи иона в кристаллической решетке.

Для подтверждения этого предположения, на рис. 3 приведена связь между теоретическими (4) и экспериментальными значениями модуля Юнга. Как следует из рис. 3, связь между ними хорошо описывается линейной регрессией [6]. Полученные различия определяются тем фактом, что не было принято во внимание различия симметрией кристаллических решеток элементов.

#### СВЯЗЬ СКОРОСТИ ЗВУКА С ЭНЕРГИЕЙ СВЯЗИ ОТДЕЛЬНОГО АТОМА В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Одним из важных макроскопических параметров металла является скорость распространения в нем звука. Упругие колебания, возбужденные в какой-либо точке среды, распространяются в ней с конечной скоростью, зависящей от свойств этой среды. Скорость звука в изотропных твердых телах определяется упругими свойствами вещества. Так, для стержня тела, длина которого значительно превышает его поперечные размеры, но

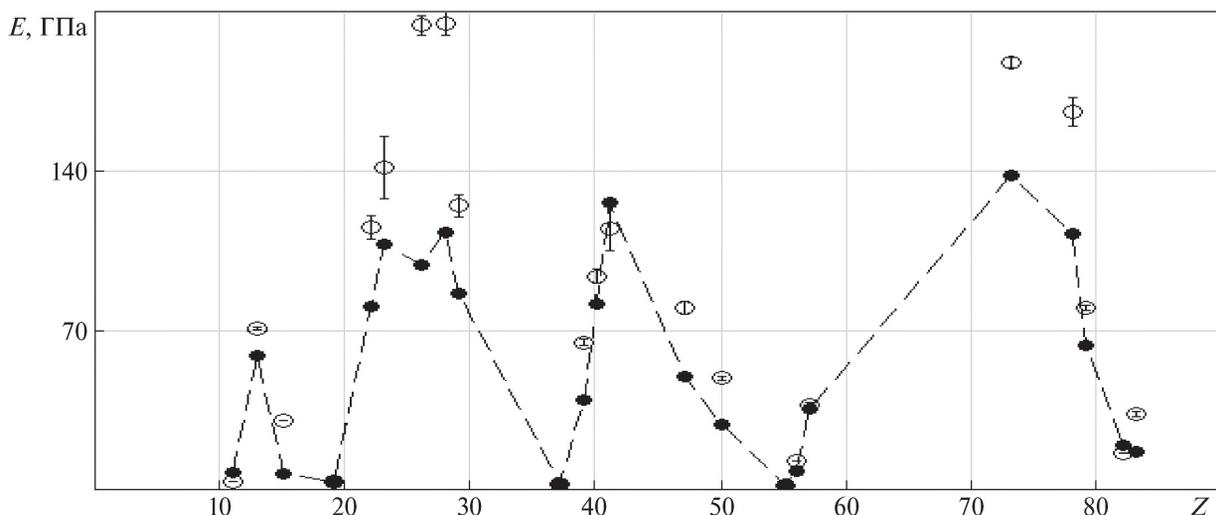


Рис. 2 Экспериментальные  $\circ$  [4, 5] и расчетные  $\bullet$  значения (4) модуля Юнга.

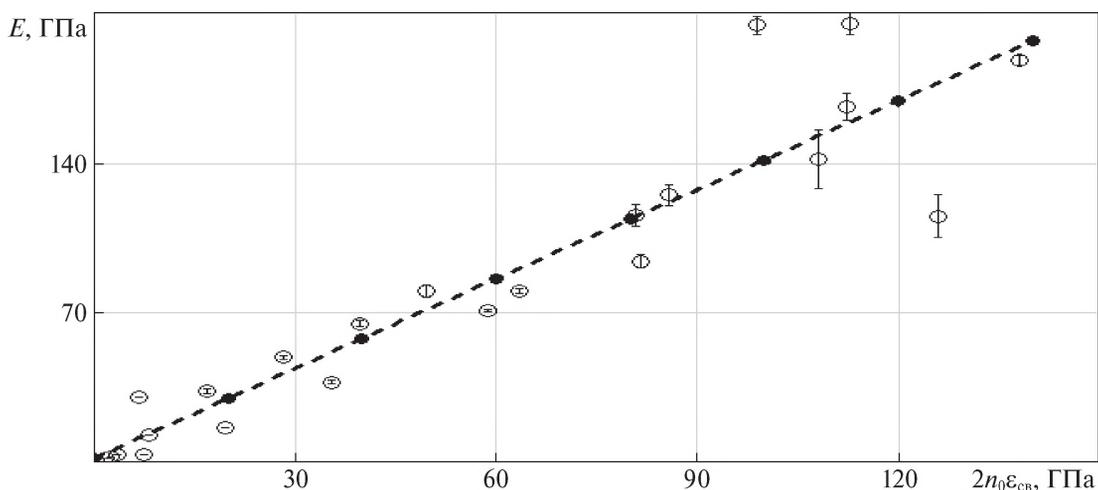


Рис. 3. Экспериментальные значения • модуля Юнга в зависимости от энергии связи иона в решетке.

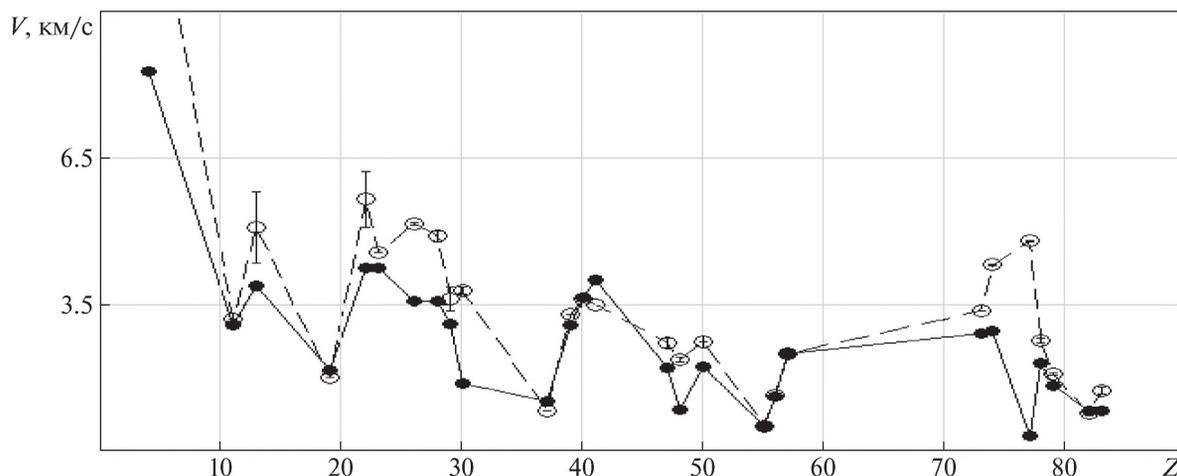


Рис. 4. Экспериментальные о [4, 5] и расчетные • значения скорости звука (6).

(по порядку) не меньше длины волны упругих колебаний, скорость звука [2, 3]:

$$V_s = \sqrt{\frac{E}{\rho}}, \tag{5}$$

где  $E$  – модуль Юнга,  $\rho$  – плотность вещества.

Подстановка (4) в формулу (5) определяет соотношение между скоростью звука в стержне, состоящим из элемента с атомной массой иона решетки  $A$ , и энергией связи  $\epsilon_{св}$  [8]:

$$V_s = \sqrt{2\epsilon_{св} \frac{N_A}{A}}, \tag{6}$$

где  $N_A$  – число Авогадро,  $A$  – атомная масса.

На рис. 4 представлены результаты расчетов скорости звука по формуле (6) и справочные данные [4, 5] для ряда элементов периодической системы зависимости от атомного номера  $Z$ .

Как видно из рис. 4 имеет место достаточно хорошее соответствие между расчетными и соответствующими справочными данными. Следует еще раз отметить, что в расчетах не учитывались индивидуальные симметрии кристаллических решеток металлов.

На рис. 5 представлена зависимость расчетных (6) [8] и экспериментальных данных [4, 5] для скорости звука в зависимости от энергии связи и атомной массы ионов в металлическом стержне.

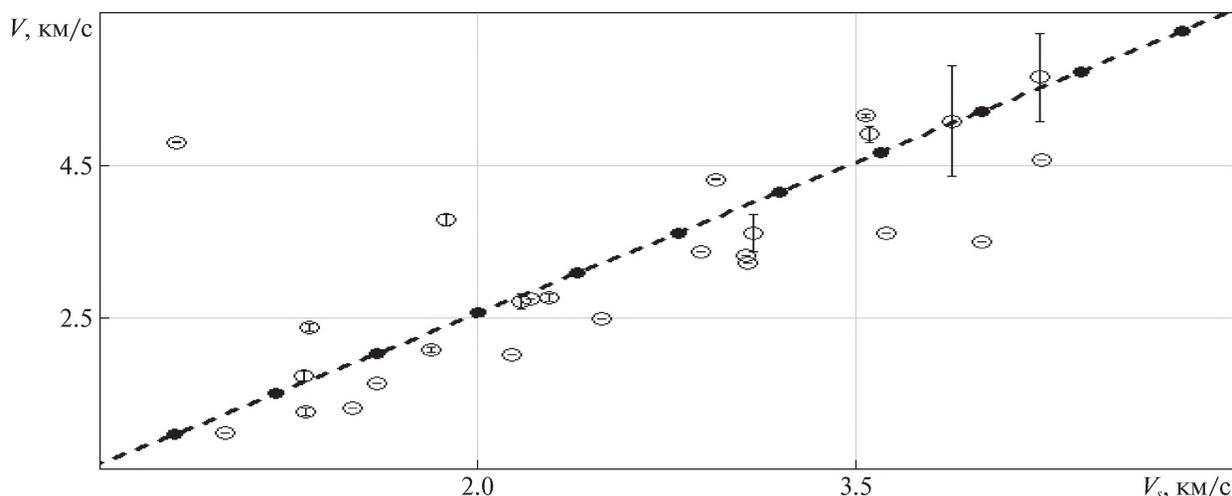


Рис. 5. Зависимость скорости звука в стержне от энергии связи иона металла.

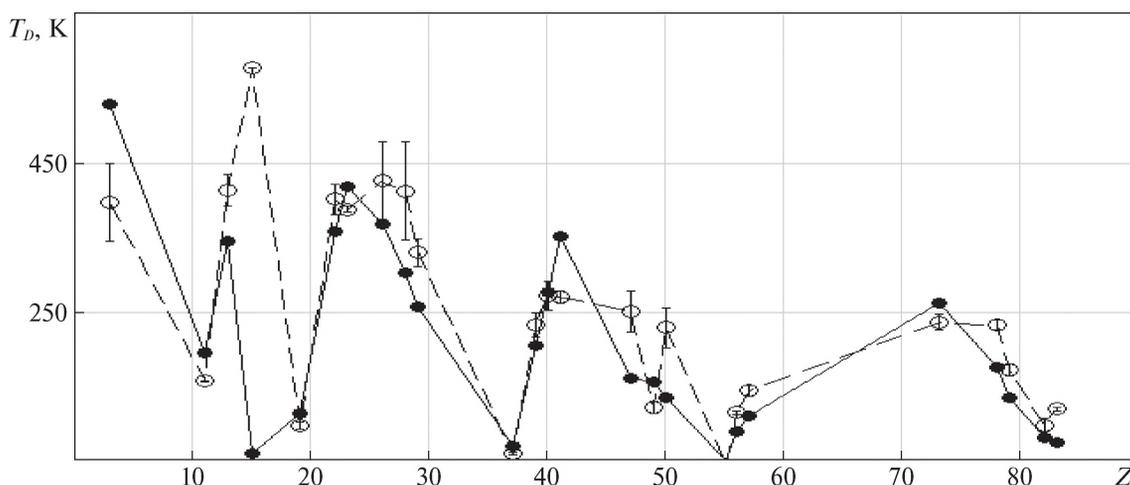


Рис. 6. Экспериментальные  $\circ$  и расчетные значения (9)  $\bullet$  температуры Дебая.

Следует отметить, что в статье [9] предпринималась попытка связать скорость звука в твердом теле с фундаментальными физическими константами.

#### СВЯЗЬ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРА ДЕБАЯ С ЭНЕРГИЕЙ СВЯЗИ ОТДЕЛЬНОГО АТОМА В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Значение температуры, определяемое максимальными частотами акустических колебаний кристаллической решетки,

$$T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k}, \quad (7)$$

где  $\omega_D$  – максимальная частота упругих колебаний кристаллической решетки;  $\hbar$  – постоянная

Планка;  $k$  – постоянная Больцмана, температура Дебая  $T_D$  разграничивает область низких и высоких температур по отношению к решеточным свойствам кристалла [3, 7]. При температурах, меньших температуры Дебая ( $T < T_D$ ), проявляются квантовые эффекты и необходима квантовая статистика. При температуре, большей температуры Дебая ( $T > T_D$ ), справедлива классическая статистическая механика. Величина  $kT_D$  представляет собой максимальный квант энергии, способный возбудить колебания решетки. Если температура выше, чем температура Дебая ( $T > T_D$ ), то возбуждены все возможные колебания. Если температура ниже, чем температура Дебая ( $T < T_D$ ), то некоторые колебания уже не воз-

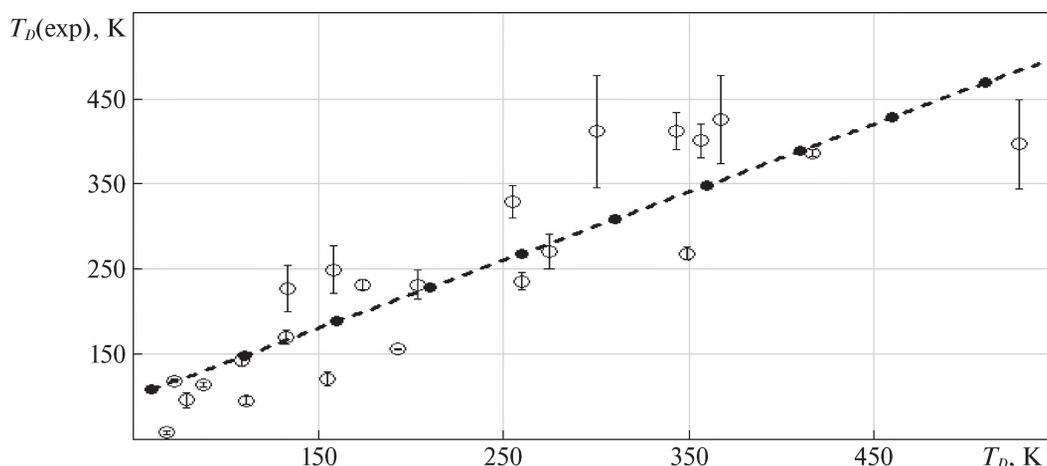


Рис. 7. Результаты сравнения вычисленных по формуле (9) значений температур Дебая  $T_D$  с табличными значениями [4, 9]  $T_D(\text{exp})$ .

буждаются, т.е. некоторые моды начинают “вымерзать”. Температура Дебая характеризует многие свойства металлов – от микроскопических характеристик – энергии активации металлов до макроскопических характеристик теплоемкости, электропроводности и др.

Согласно [7] максимальная частота нормальных колебаний

$$\omega_D = (6\pi^2)^{\frac{1}{3}} \frac{V_s}{a}, \quad (8)$$

где  $V_s$  – скорость звука, параметр  $a$  – постоянная решетки. Скорость звука в изотропных твердых телах определяется модулями упругости вещества, т.е. для стержня скорость звука определяется выражением (6). В предыдущем разделе также была установлена связь макроскопического параметра скорости звука в металлах, определяющего способность материалов сопротивляться растяжению или сжатию при упругой деформации, с энергией связи иона в решетке (8).

Подставляя (6) в (8), получаем связь характеристической температуры Дебая с микроскопическими характеристиками твердого тела [10]:

$$T_D = (6\pi^2)^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar}{a} \sqrt{2 \frac{N_A}{A} \epsilon_b}. \quad (9)$$

Результаты сравнения теоретического соотношения (9) с экспериментальными данными работ [4, 5] приведены на рис. 6.

Результаты расчета сравнения вычисленных по формуле (9) значения температур Дебая и

сравнение их с табличными значениями представлены на рис. 7. Пунктирная линия регрессии показывает существование прямой зависимости между этими величинами.

В настоящей работе на основе единого микроскопического подхода, предложенного в работах В. Вайскопфа [1], был сделан анализ макроскопических параметров, таких как модуль Юнга, характеризующий свойство материалов сопротивляться растяжению и сжатию при упругой деформации, скорости звуковой волны, которая определяет макроскопические характеристики среды распространения, температуры Дебая, определяющей область применения классических приближений. Показано, что все эти параметры не являются независимыми, а определяются величиной энергии связи иона в кристаллической решетке.

#### БЛАГОДАРНОСТИ

Калашников Н.П. благодарен Программе конкурентоспособности НИЯУ МИФИ за поддержку исследований.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Weisskopf V.F., Bernstein H.* Amer. Journ. Phys. December 1985. V. 53. № 12. P. 1140–1142.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука, 1965. Т. VII. 203 с.
3. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.

4. Физические величины. Справочник. Под ред. И.С. Григорьева, У.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
5. *Forsythe W.E.* Physical Tables Ninth Revised Edition. Norwich, New York, 2003. P. 785.
6. *Ерохин К.М., Калашников Е.С., Калашников Н.П.* Микроскопическая интерпретация модуля Юнга в законе Гука. Высшая школа. *Новые технологии науки, техники, педагогики.* Материалы Всероссийской научно-практической конференции “Наука-Общество-Технологии-2018” МПУ, 2018. С. 45–47.
7. *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974. 472 с.
8. *Ерохин К.М., Калашников Е.С., Калашников Н.П.* Микроскопическая интерпретация скорости звука в металлах. Высшая школа. *Новые технологии науки, техники, педагогики.* Материалы Всероссийской научно-практической конференции “Наука-Общество-Технологии-2019” МПУ. 2019. С. 46–51.
9. *Trachenko K., Monserrat B., Pickard C.J., Brazhkin V.V.* Science Advances. 2020. V. 6. № 41. P. 1–5.
10. *Ерохин К.М., Калашников Е.С., Калашников Н.П.* Связь температуры Дебая с энергией связи иона в кристаллической решетке металла. Высшая школа. *Новые технологии науки, техники, педагогики.* Материалы Всероссийской научно-практической конференции “Наука-Общество-Технологии-2020” МПУ. 2020. С. 5–9.

---

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta “MIFI”, 2021, vol. 10, no. 1, pp. 5–11

---

## Binding Energy of an Individual Atom as a Fundamental Characteristic of the Solid Body Properties

K. M. Erokhin<sup>a,#</sup> and N. P. Kalashnikov<sup>b,##</sup>

<sup>a</sup> *Moscow Polytechnic University, Moscow, 107023, Russia*

<sup>b</sup> *National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*

<sup>#</sup>*e-mail: kmekm@yandex.ru*

<sup>##</sup>*e-mail: kalash@mephi.ru*

Received February 5, 2021; revised March 2, 2021; accepted March 9, 2021

**Abstract**—A relationship between macroscopic parameters, such as the Young’s modulus in Hooke’s law, the speed of sound, and the Debye temperature, and the binding energy of an individual atom has been analyzed. A formula for the elastic deformation modulus is proposed. The speed of sound in isotropic solids is determined by the elastic properties of the substance. A relation between the speed of sound and the binding energy of an individual atom in a solid is obtained. A simple formula for the speed of sound in a metal rod is established. The relationship between the characteristic Debye temperature and the binding energy of an ion in the lattice of the solid is proposed. It is shown that the Young’s modulus in Hooke’s law, the speed of sound, and the Debye temperature are not independent, but are determined by the ion binding energy in the crystal lattice.

*Keywords:* elastic deformation, Young’s modulus, Hooke’s law, speed of sound, Debye characteristic temperature, binding energy of an atom, atomic concentration

DOI: 10.1134/S2304487X21010077

### REFERENCES

1. Weisskopf V.F., Bernstein H. *Amer. Journ. Phys.* December 1985, vol. 53, no. 12, pp. 1140–1142.
2. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Theory of Elasticity.* Moscow, Nauka, 1965, vol. VII, 203 p.
3. Kittel Charles. *Introduction to Solid State Physics.* John Wiley and Sons, Inc. New York, London, 1978, 791 p.
4. *Physical Quantities. Handbook.* Ed. I.S. Grigoriev, U.Z. Mejlilova. Energoatomizdat, 1991, 1232 p.

5. *Physical Tables Ninth Revised Edition*. Prepared by William Elmer Forsythe. Norwich, New York, 2003, 785 p.
6. Erokhin K.M., Kalachnikov E.S., Kalashnikov N.P. *Microscopic interpretation of the Young module in the Hooke law*. Higher education. New technologies of science, engineering, pedagogics. Proceedings of the All-Russian scientific-practical conference “Science – Society – Technology – 2018”, pp. 45–47.
7. Ziman J.M. *Principles of the Theory of Solids*. Moscow, Mir Publ., 1972. 472 p.
8. Erokhin K.M., Kalachnikov E.S., Kalashnikov N.P. *Microscopic interpretation of the speed of sound in metals*. Higher education. New technologies of science, engineering, pedagogics. Proceedings of the All-Russian scientific-practical conference “Science – Society – Technology – 2019” Russia, Moscow. pp. 46–51
9. Trachenko K., Monserrat B., Pickard C.J., Brazhkin V.V. *Science Advances*, 2020, vol. 6, no. 41, pp. 1–5.
10. Erokhin K.M., Kalashnikov E.S., Kalashnikov N.P. *Connection the Debye temperature with the binding energy of the ion in the crystal lattice of metals*. Science, engineering, pedagogics. New technologies of higher education. Proceedings of the All-Russian scientific-practical conference “Science – Society – Technology – 2020”, Russia, Moscow, pp. 5–9.