FIZYCZNE NOWINKI

Redaguje dr hab. Andrzej HENNEL

ILE ATOMÓW TWORZY KRYSZTAŁ ?

Ile właściwie atomów trzeba zgrupować razem, aby powstały twór miał już własności ciała stałego, czyli był kryształem ? Milion ? Miliard ? Bilion ? A może jeszcze więcej ? Na przykład w jednym centymetrze sześciennym kryształu dobrze znanej wszystkim soli kuchennej znajduje się około $4{,}5 \times 10^{22}$ atomów sodu i chloru. Wiadomo jednak od dawna, że maleńkie "okruszki" o wymiarach mikrometrów badane za pomocą promieni X, wykazują doskonałe własności krystaliczne. Przy jakim więc rozmiarze "okruszka" przestaje on być kryształem ? Odpowiedź na tak sformułowane pytanie może zależeć, oczywiście, od wyboru badanych własności kryształu. Ostatnio przeprowadzono szereg badań gazowych "okruszków" (zwanych klastrami*) zawierających od 10 do 1000 atomów różnych pierwiastków. W jednym z eksperymentów prowadzono pomiary energii jonizacji elektronów z klastrów rtęci. Atomy rtęci mają zamkniętą powłokę elektronową $6s^2$ i pustą $6p^0$. Obydwie te powłoki tworzą w kryształach rtęci pasmo przewodnictwa. Energia jonizacji elektronu z powłoki $6s^2$ atomu rtęci do próżni wynosi 10,4 eV; natomiast energia jonizacji elektronu z poziomu Fermiego pasma przewodnictwa do próżni dla metalicznej rtęci wynosi 4.5 eV. W przeprowadzonych eksperymentach okazało się, że już przy około **70 atomach** rtęci tworzących klaster energia jonizacji elektronów dwukrotnie maleje w porównaniu z pojedynczym atomem, czyli powstaje pasmo przewodnictwa. Z kolei w innych eksperymentach badano odległość pomiędzy atomami w klastrach miedzi. W cząsteczce Cu_2 wynosi ona około 2,2 Å, natomiast w krysztale miedzi około 2,55 Å. Stwierdzono, że w klastrach o średnicy około 10 Å, zawierających **50—100 atomów**, osiągana już jest "krystaliczna" odległość między atomami. O ile miedź buduje "od początku" sieć kubiczną, to nieco inaczej zachowują się atomy argonu. Zarówno rachunki teoretyczne, jak i pomiary dyfrakcji elektronów wykazują, że niewielkie klastry argonu, zawierające 20—50 atomów, mają symetrię dwudziestościanu (odpowiadającą "zakazanej" w kryształach osi pięciokrotnej). Dopiero przy około 100 atomach klaster ulega reorganizacji i tworzy się sieć kubiczna. Powyższe rezultaty dość jednoznacznie przekonują, że po przekroczeniu liczby około **100 atomów** w "okruszku" zaczynamy mieć już do czynienia z ciałem stałym. Istnieją, oczywiście, w ciałach stałych zjawiska, takie jak na przykład drgania sieci krystalicznej, które wymagają udziału wielu tysięcy atomów. Jednakże zarówno pojawienie się pasm energetycznych, jak i struktury krystalicznej w klastrach stuatomowych jest faktem godnym uwagi.

---

*od ang. *cluster* — grono, gromadka, zlepek, grudka.

Przyspieszenie (sumowania)

Przypuśćmy, że chcemy obliczyć z dużą dokładnością sumę S szeregu $\sum\limits_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2}$. Można, oczywiście, dodawać kolejne wyrazy, ale sumy częściowe są zbieżne do S bardzo wolno. Mamy bowiem dla każdego $N > m$

$$S - \sum_{k=1}^{m} \frac{1}{k^2} = \sum_{k=m+1}^{\infty} \frac{1}{k^2} > \sum_{k=m+1}^{N} \frac{1}{k^2} > \sum_{k=m+1}^{N} \frac{1}{k(k+1)} =$$

$$= \sum_{k=m+1}^{N} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+1} \right) = \frac{1}{m+1} - \frac{1}{N+1}.$$

Z dowolności N wynika , że $S - \sum\limits_{k=1}^{m} \frac{1}{k^2} \geq \frac{1}{m+1}$.

Aby obliczyć S z dokładnością do 10^{-10}, trzeba zsumować co najmniej 10 miliardów wyrazów. Taką samą dokładność można uzyskać znacznie zmniejszając liczbę sumowanych wyrazow. Podobnie jak powyżej mamy

$$S - \sum_{k=1}^{m} \frac{1}{k^2} \leq \sum_{k=m+1}^{\infty} \frac{1}{(k-1)k} = \sum_{k=m+1}^{\infty} \left(\frac{1}{k-1} - \frac{1}{k} \right) = \frac{1}{m}.$$

Tak więc

$$S - \sum_{k=1}^{m} \frac{1}{k^2} + \frac{1}{m+1} \leq \frac{1}{m} - \frac{1}{m+1} \leq \frac{1}{m^2}.$$

Wystarczy więc do sumy pierwszych 100 tysięcy wyrazów dodać $\frac{1}{100\,001}$.

Spróbujmy jeszcze inaczej. Zapiszemy w tym celu wyrazy naszego szeregu w bardziej skomplikowany sposób. Zastępując $\frac{1}{k^2}$ przez $\frac{1}{k(k+1)}$ popełniamy błąd

$$\frac{1}{k^2} - \frac{1}{k(k+1)} = \frac{1}{k}\left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+1}\right) = \frac{1}{k^2(k+1)}.$$

Ten błąd zastępujemy liczbą $\frac{1}{k(k+1)(k+2)}$ i otrzymujemy nowy błąd

$$\frac{1}{k^2(k+1)} - \frac{1}{k(k+1)(k+2)} = \frac{1}{k(k+1)} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+2} \right) = \frac{1}{k^2(k+1)(k+2)}.$$

Kontynuując to postępowanie dostajemy wzory

$$\begin{aligned}
1 &= 1, \\
\frac{1}{2^2} &= \frac{1}{2 \cdot 3} + \frac{1}{2^2 \cdot 3}, \\
\frac{1}{3^2} &= \frac{1}{3 \cdot 4} + \frac{1}{3 \cdot 4 \cdot 5} + \frac{1}{3^2 \cdot 4 \cdot 5}, \\
&\vdots \\
\frac{1}{k^2} &= \frac{1}{k(k+1)} + \frac{1}{k(k+1)(k+2)} + \cdots \\
&\qquad \cdots + \frac{(k-2)!}{k(k+1)\ldots(2k-1)} + \frac{(k-1)!}{k^2(k+1)\ldots(2k-1)}, \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Zamiast obliczać sumę szeregu $\sum\limits_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2}$ obliczmy sumę wyrazów w każdej kolumnie i następnie dodajmy te sumy. Takie postępowanie jest dozwolone, gdyż wszystkie liczby występujące po prawej stronie są dodatnie. Suma n-tej kolumny S_n jest równa

$$\frac{(n-1)!}{n^2(n+1)\ldots(2n-1)} + \sum_{i=n+1}^{\infty} \frac{(n-1)!}{i(i+1)\ldots(i+n)}.$$

Ale

$$\frac{1}{i(i+1)\ldots(i+n)} = \frac{1}{n} \left(\frac{1}{i(i+1)\ldots(i+n-1)} - \frac{1}{(i+1)\ldots(i+n)} \right),$$

więc

$$\sum_{i=n+1}^{N} \frac{1}{i(i+1)\ldots(i+n)} = \frac{1}{n} \left(\frac{1}{(n+1)\ldots(2n)} - \frac{1}{(N+1)\ldots(N+n)} \right)$$

i
$$\sum_{i=n+1}^{\infty} \frac{1}{i(i+1)\dots(i+n)} = \frac{1}{n(n+1)\dots(2n)} .$$

A zatem

$$S_n = (n-1)! \left(\frac{1}{n^2(n+1)\dots(2n)} + \frac{1}{n(n+1)\dots(2n)} \right) =$$
$$= \frac{3(n-1)!}{n(n+1)\dots(2n)} = \frac{3((n-1)!)^2}{(2n)!} .$$

Mamy więc wzór
$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} = 3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{((n-1)!)^2}{(2n)!} .$$

Szereg po prawej stronie jest zbieżny bardzo szybko. Zachodzi bowiem nierówność
$$\frac{((n-1)!)^2}{(2n)!} \le \frac{1}{n4^n}, \quad \text{dla} \quad n \ge 4 ,$$
którą można udowodnić przez indukcję. Wystarczy w tym celu zauważyć, że jest ona prawdziwa dla $n = 4$, gdyż $\frac{1}{1120} \le \frac{1}{1024}$, i pokazać, że dla każdego n mamy
$$\frac{(2n+1)(2n+2)}{n^2} \ge 4\frac{n+1}{n} ,$$
co jest oczywiste.

Sumując pierwsze $m-1$ wyrazów szeregu, gdzie $m \ge 4$, popełniamy błąd mniejszy niż
$$3 \sum_{n=m}^{\infty} \frac{1}{n4^n} \le \frac{3}{m4^m} \sum_{n=m}^{\infty} \frac{1}{4^n} = \frac{1}{m4^{m-1}} .$$

Aby obliczyć S z dokładnością do 10^{-10}, wystarczy więc zsumować pierwsze 16 wyrazów.

Oto zadanie dla dociekliwych Czytelników.

Czy suma szeregu $\sum_{n=a}^{\infty} \frac{1}{n \ln n \ln \ln n (\ln \ln \ln n)^2}$ jest większa, czy mniejsza niż 1?

Liczba a, od której zaczynamy sumowanie, jest najmniejszą liczbą k, dla której $\ln \ln \ln k > 1$ (tzn. $a = \left[\mathrm{e}^{\mathrm{e}^{\mathrm{e}}}\right] + 1$). Tym razem szereg jest jeszcze wolniej zbieżny niż poprzednio: suma wyrazów o numerach większych od $\mathrm{e}^{\mathrm{e}^{\mathrm{e}^k}}$ jest rzędu $\frac{1}{k}$, w dodatku suma całego szeregu różni się od 1 o mniej niż 10^{-8}.

Opracował dr Jerzy RYLL

Zadania

Redaguje dr Rafał SZTENCEL

M 517. Niech $f(x,y,z) = xy + xz + yz - 2xyz$. Udowodnić, że jeśli $x, y, z \ge 0$, $x + y + z = 1$, to $f(x,y,z) \le 7/27$. (MOM 1984)
Rozwiązanie na str. 1

M 518. Rzucamy trzema symetrycznymi monetami. Te, na których wypadł orzeł, rzucamy jeszcze raz, itd. aż do chwili, gdy będą same reszki. Ile średnio rzutów potrzeba do zakończenia doświadczenia ?
Rozwiązanie na str. 1

M 519. Czy można z 18 kamieni domina 2×1 złożyć taki kwadrat, że każdy odcinek (różny od boku) łączący przeciwległe brzegi kwadratu przechodzi przez wnętrze któregoś kamienia ?
Rozwiązanie na str. 2

Redaguje dr Rafał STAROŃSKI

F 252. Do jakiej wysokości można napełnić szklany zbiornik mający mały otworek w dnie tak, aby ciecz nie zwilżająca szkła nie wylała się ?
Rozwiązanie na str. 15

F 253. W cieczy zwilżającej szkło zanurzono szklaną kapilarę tak, że jej wystający ponad powierzchnię odcinek jest krótszy niż wysokość, na jaką podniósłby się słupek cieczy w dłuższej kapilarze. Jak będzie skierowana wypukłość menisku i jaki będzie jej promień ?
Rozwiązanie na str. 16