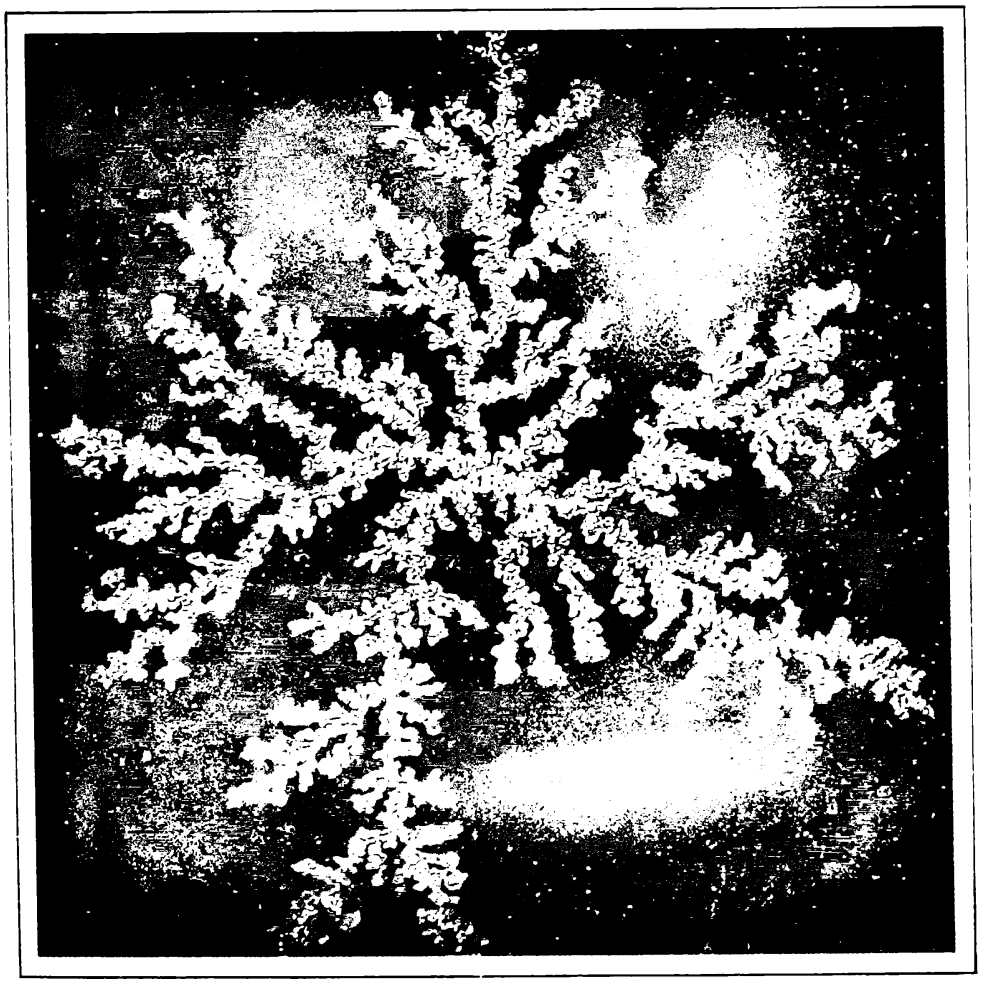
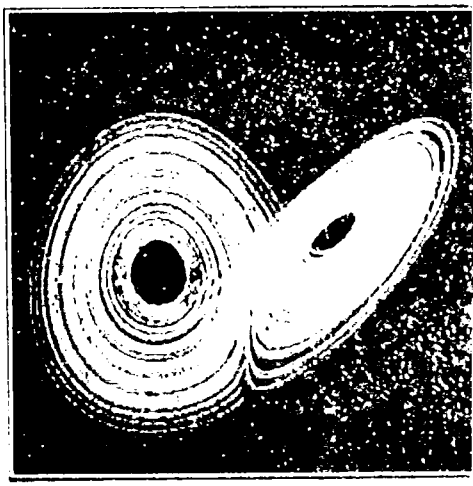
ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

ΤΟΜΟΣ ΙΙ







ΣΠΥΡΟΣ Ν. ΕΥΑΓΓΕΛΟΥ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
1994

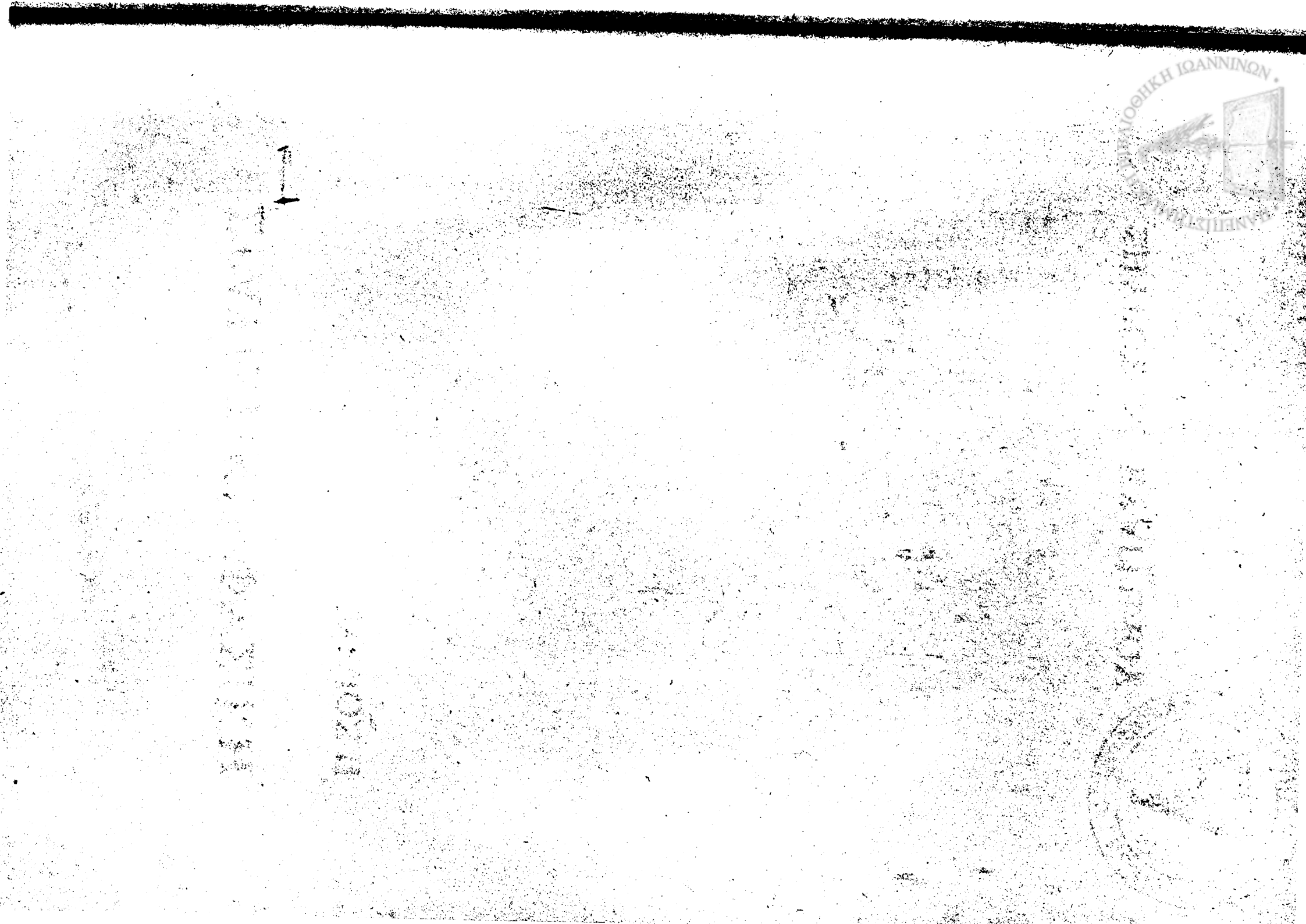
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

ΤΟΜΟΣ ΙΙ

ΣΠΥΡΟΣ Ν. ΕΥΑΓΓΕΛΟΥ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ



Αφιερώνεται στην Ιφιγένεια και τον Νίκο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ ΙΙ

Σ.Ν. ΕΥΑΓΓΕΛΟΥ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

2. Η ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ BOLTZMANN ΤΟΥ ΕΝΟΣ ΣΩΜΑΤΙΟΥ

3. ΤΟ ΙΔΑΝΙΚΟ ΑΕΡΙΟ Ν-ΣΩΜΑΤΙΩΝ

4. ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ BOLTZMANN

5. Η ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ

6. ΤΟ ΑΕΡΙΟ FERMI

7. ΤΟ ΑΕΡΙΟ BOSE

"Γιατί οι βροχές, ακόμη και οι καταιγίδες,
πέφτουν με τυχαίο τρόπο ώστε πολλοί άνθρωποι το
θεωρούν φυσιολογικό να προσεύχονται γιά βροχή
ή καλοκαιρία, ενώ θα θεωρούσαν γελοίο κάτι τέτοιο
γιά μιά έκλειψη ηλίου ;"
J.C. Maxwell

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ:

ΣΕΛ

1. **ΕΙΣΑΓΩΓΗ** 23
1.1. Περί τυχαιότητας και πιθανοτήτων 25
1.2. Πληροφορία και εντροπία 28
1.3. Τα βασικά στατιστικά ensembles 30

2. **Η ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ BOLTZMANN ΤΟΥ ΕΝΟΣ ΣΩΜΑΤΙΟΥ** 37
2.1. Η μέθοδος της στατιστικής φυσικής 39
2.2. Καταμέτρηση των κβαντικών καταστάσεων 42
2.3. Πυκνότητα καταστάσεων ρ(ε) 48
2.4. Συνάρτηση επιμερισμού z - κβαντικός όγκος V_Q 50
2.5 Ακριβής επίλυση του προβλήματος ελεύθερου σωματίου σε "κουτί" 54
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

3. **ΤΟ ΙΔΑΝΙΚΟ ΑΕΡΙΟ Ν-ΣΩΜΑΤΙΩΝ** 71
3.1. Καταστάσεις πολλών - σωματίων 73
3.2. Διακρίσιμα σωμάτια-κλασσική στατιστική 76
3.3. Υπολογισμός της εντροπίας S και το παράδοξο του Gibbs 79
3.4. Μη διακρίσιμα σωμάτια 82
3.5. Οιονεί-κλασσική στατιστική καιη εξίσωση Sackur-Tetrode 86
3.6. Κριτήρια ισχύος της οιονεί-κλασσικής στατιστικής 89
3.7. Αριθμός καταστάσεων Ν-σωματίων με ολική ενέργεια μέχρι Ε 93
3.8. Υπολογισμός του μέσου αριθμού κατάληψης $\langle n_r \rangle$ 96
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

4. **ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ BOLTZMANN** 109
4.1. Η κλασσική δυναμική περιγραφή 111
4.2. Κλασσική συνάρτηση επιμερισμού Z 118
4.3. Τα πολυατομικά ιδανικά αέρια και το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας 122

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

4.4. Κατανομή μοριακών ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann (MB) 126
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

5. Η ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ 145
5.1. Η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού Z 147
5.2. Φερμιόνια 155
5.3. Μποζόνια 155
5.4. Στατιστικές Fermi, Bose και Boltzmann 156
5.5. Θερμοδυναμικές συναρτήσεις στο μεγαλοκανονικό ensemble 158
5.6. Το κλασσικό αέριο. Μιά ακόμη (τελευταία) επίσκεψη 162
5.7. Κβαντικές διορθώσεις στην καταστατική εξίσωση $PV = N k_B T$ 170
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

6. ΤΟ ΑΕΡΙΟ FERMI 183
6.1. Ένα παράδειγμα αερίου Fermi 185
6.2. Το αέριο Fermi σε θερμοκρασία T = 0 186
6.3. Το εκφυλισμένο αέριο Fermi ($k_B T << \varepsilon_F$, $\beta\mu \to +\infty$) 196
6.4. Η Θερμοχωρητικότητα του ηλεκτρονικού αερίου 198
6.5. Αναπτύγματα Sommerfeld (μικρής-T) 206
6.6 Ιδιότητες του ηλεκτρονικού αερίου 212
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

7. ΤΟ ΑΕΡΙΟ BOSE 231
7.1. Συμπύκνωση Bose-Einstein ($\beta\mu \to 0$) 233
7.2. Θερμοδυναμικές ποσότητες 241
7.3 Φωτόνια και φωνόνια 243
7.4. Ακτινοβολία μέλανος σώματος (φωτονικό αέριο) 246
7.5. Μια πολύ μικρή επίσκεψη στο φωνονικό αέριο 251
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

Α. ΤΑ ΑΠΑΡΑΙΤΗΤΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ 261
Α.1. Εισαγωγή 263
Α.2. Ολοκληρώματα σφάλματος 265

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

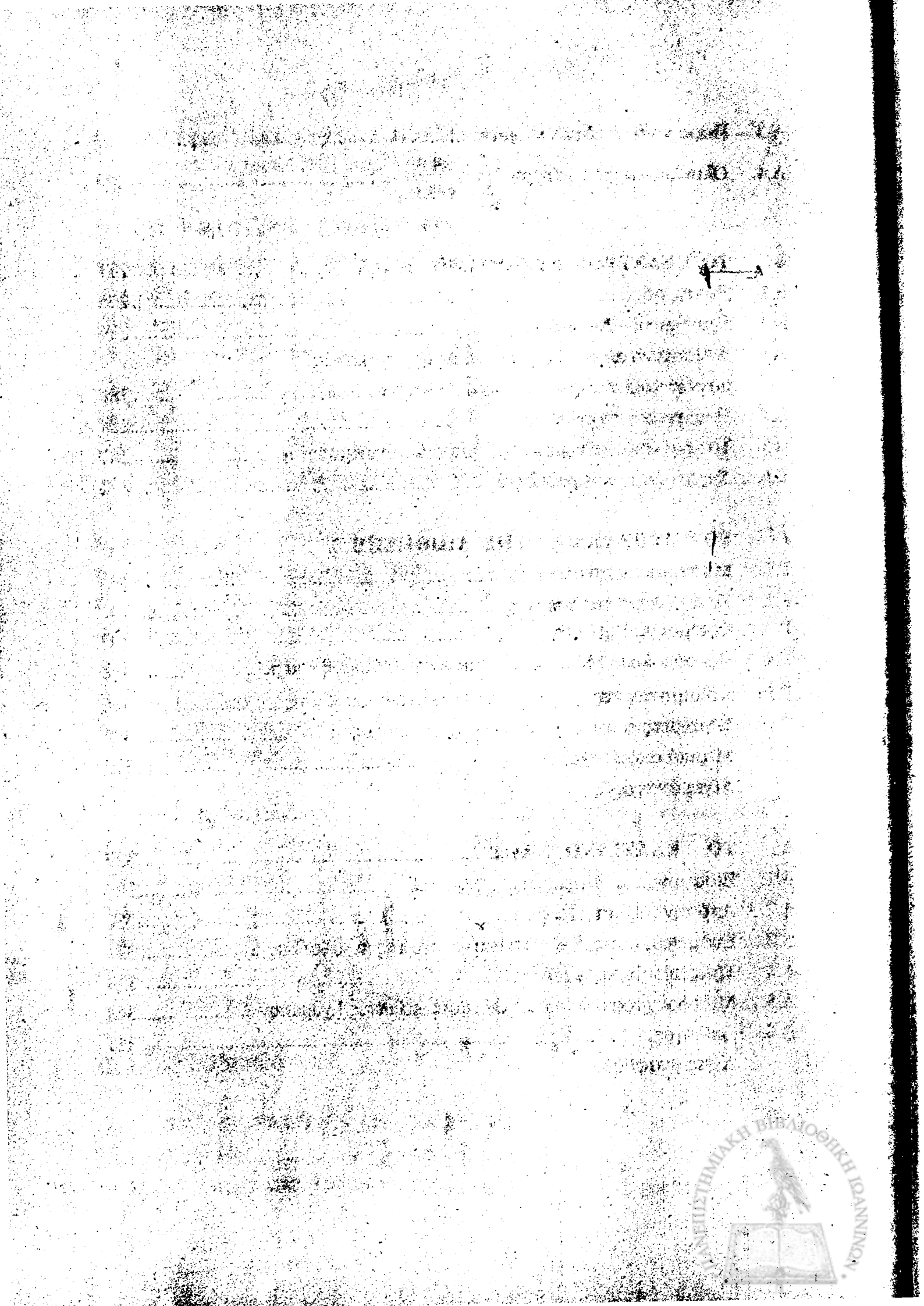
Α.3. Παραγοντικά ολοκληρώματα 267
Α.4. Ολοκληρώματα Riemann $\int_0^\infty dx \frac{x^{n-1}}{e^x \pm 1}$ 267

Β. ΤΟ ΚΒΑΝΤΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ HALL 271
Β.1. Εισαγωγή 273
Β.2. Ημιαγωγοί - Διατάξεις 276
Β.3. Διδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο (το κλασσικό φαινόμενο Hall) 280
Β.4. Η κβαντική περιγραφή 284
Β.5. Το κβαντικό φαινόμενο Hall παρουσία τυχαιότητας 287
Β.6. Συμπεράσματα-εφαρμογές 292

Γ. ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΔΙΗΘΗΣΗΣ 295
Γ.1. Μή περιοδικά συστήματα 297
Γ.2. Το πρόβλημα της διήθησης 304
Γ.3. Ορισμοί p_c, $P(p)$, $\sigma(p)$ 309
Γ.4. Προσομοίωση Monte-Carlo και ο υπολογισμός του p_c 312
Γ.5. Κρίσιμη συμπεριφορά-ομάδα ανακανονικοποίησης 316
Γ.6. Η γεωμετρία του άπειρου συσσωματώματος 322
Γ.7. Μερικά ακόμη σχόλια 325
Λίγες αναφορές

Δ. ΤΟ ΚΛΑΣΣΙΚΟ ΧΑΟΣ 327
Δ.1. Εισαγωγή 329
Δ.2. Από την τάξη στο χάος 330
Δ.3. Ευαισθησία στις Α.Σ. - Το φαινόμενο της πεταλούδας 331
Δ.4 Τρεις περιπτώσεις χάους 334
Δ.5. Μέθοδοι χαρακτηρισμού του χάους - εκθέτες Lyapunov 348
Δ.6. Επίλογος 351
Λίγες αναφορές

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ:

1 Mandl F. : "Στατιστική Φυσική" (1988)

2 Landau L.D. and Lifshitz E.M. : "Statistical Physics" (Pergamon Press,1978)

3 Reif F. : "Fundamentals of Statistical and Thermal Physics" (Mc Graw-Hill, 1965)

4 Kittel C. : "Thermal Physics"(J. Wiley and Sons, 1969)

5 Stauffer D. and Stanley H.E. :"From Newton to Mandelbrot"(Springer-Verlag, 1990)

6 Kubo R. : "Statistical Mechanics" (North-Holland, 1967)

7 Turner R.E. and Betts D.S. : "Introductory Statistical Mechanics"(Sussex University Press, 1974)

8 Γούναρης Γ. : "Στατιστική Φυσική" (1975)

9 Βέργαδος Ι.Δ. και Τριανταφυλλόπουλος Η.Σ. : "Στατιστική Φυσική" (1991)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Το βιβλίο αυτό, συνέχεια της ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι που κυκλοφόρησε πρίν από μερικούς μήνες, έχει ως σκοπό να συμπληρώσει τις διδακτικές ανάγκες στο μάθημα της στατιστικής φυσικής, για το δεύτερο εξάμηνο των τελειοφοίτων φυσικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων. Όταν άρχισα να το γράφω έλπιζα, όπως ακριβώς οι ταξιδευτές μέ άμαξα στην άγρια δύση, σε ένα υπέροχο ταξίδι (γεμάτο περιπέτειες, γεμάτο γνώσεις), μετά όμως από τις ... επιθέσεις των Ινδιάνων και τις άλλες ταλαιπωρίες, απλώς περιορίζομαι να φθάσω στον προορισμό μου! Τελικά το αποτέλεσμα μετράει και το βιβλίο αυτό, που γράφτηκε με πολλές θυσίες στον χρόνο ρεκόρ ενός-δύο μηνών, είναι στα χέρια σου αγαπητέ αναγνώστη. Δεν ήσαν λίγες οι φορές, στην πορεία της συγγραφής, που μετάνοιωσα που το άρχισα αλλά όντας στο χορό... Πιστεύω όμως, πως οι επιδράσεις των δυσκολιών δεν αντανακλούν στην ποιότητα του βιβλίου, που είναι γραμμένο στο γνωστό υψηλό επίπεδο που συναντάει κανείς στα πιό καλά Πανεπιστήμια της Ευρώπης ή της Βόρειας Αμερικής. Βέβαια, θα επιθυμούσα να είχα συμπεριλάβει μερικά ακόμη θέματα στην ύλη του και να συντομεύσω ή να αναφερθώ εκτενέστερα σε κάποια άλλα. Παρηγοριέμαι, όμως, με τη φράση: "ένα βιβλίο ποτέ δεν το τελειώνεις, απλώς το εγκαταλείπεις"!

Η στατιστική φυσική δεν είναι και από τα πιό εύκολα αντικείμενα της φυσικής αφού περιέχει βαθειές έννοιες που για να εξελιχθούν χρειάσθηκαν δεκαετίες ή ακόμη και αιώνες. Διαφέρει, με αυτήν την έννοια, από άλλους κλάδους της φυσικής που παρά το ενδιαφέρον και την ομορφιά, που μπορεί να παρουσιάζουν, δεν κρύβουν πλέον μυστήρια αφού η πλειοψηφία των σημαντικών ερωτημάτων τους έχει ήδη επιλυθεί. Η στατιστική φυσική αποτελεί ένα διαρκώς αναπτυσσόμενο πεδίο έρευνας με πολλά άλυτα ακόμη, φαινομενικά απλά προβλήματα. Διαπραγματεύεται φαινόμενα που συμβαίνουν σε όλες τις κλίμακες μεγέθους, αφού ο εξερευνήσιμος φυσικός κόσμος αφορά, πράγματι, μιά μεγάλη περιοχή κλιμάκων μεγέθους, από τα στοιχειώδη σωμάτια στις μικροσκοπικές κλίμακες (μεγέθους της τάξης του 10^{-15} cm και αντίστοιχους χρόνους 10^{-22} sec) μέχρι τις κοσμολογικές διαστάσεις (μεγέθη της τάξης του 10^{28} cm και χρόνους δισεκατομμυρίων ετών). Η στατιστική φυσική, λοιπόν, καλείται να δαμάσει την πολυπλοκότητα που είναι, αναμφισβήτητα, παρούσα σε όλες αυτές τις κλίμακες μεγέθους.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Παρ' όλο που η κοινή εμπειρία δίνει την εντύπωση πως στον κόσμο που ζούμε ισχύει η κλασσική φυσική του Newton, η συμπεριφορά της ύλης σε υπατομικό επίπεδο ανατρέπει άρδην αυτήν την απλή αιτιοκρατική περιγραφή. Η κλασσική φυσική πρέπει να αντικατασταθεί από την κβαντική μηχανική που λαμβάνει υπ' όψιν της και την συμπαντική σταθερά του Planck $h = 6 \times 10^{-27}$ erg, ενώ για τιμές των ταχυτήτων συγκρίσιμες με την ταχύτητα του φωτός $c = 3 \times 10^{10}$ cm sec^{-1} πρέπει να χρησιμοποιηθεί και η θεωρία της σχετικότητας. Η κβαντική μηχανική είναι μιά πιθανοκρατική θεωρία που με την περίφημη αρχή της αβεβαιότητας (Heisenberg, 1927) εκφράζει την αδυναμία για ταυτόχρονη γνώση της θέσης και της ορμής ενός κβαντικού σωματίου. Όταν ο Boltzmann στις αρχές του αιώνα (και λίγο αργότερα ο Gibbs) δημιούργησαν την στατιστική φυσική, η συνεισφορά τους προς στην επιστήμη δεν ήταν λιγώτερο σημαντική από την ανακάλυψη της κβαντικής μηχανικής ή της θεωρίας της σχετικότητας! Μάλιστα η στατιστική φυσική πού ερμηνεύει τα φαινόμενα του φυσικού κόσμου ανεξαρτήτως κλίμακας μεγέθους, μπορεί να θεωρηθεί ακόμη πιό σπουδαία, αφού έδωσε νέες ιδέες με εφαρμογές όχι μόνο στην φυσική.

Ο Boltzmann βασίσθηκε κυρίως στην ατομική υπόθεση που δεν ήταν ευρύτερα αποδεκτή στην εποχή του. Αυτός ήταν και ο κύριος λόγος κριτικής εναντίον του που τον οδήγησε σε αυτοκτονία το 1906. Στηρίχθηκε επίσης στην κλασσική μηχανική αφού τότε δεν υπήρχε η κβαντική μηχανική! Αυτές όμως οι δυσκολίες δεν τον εμπόδισαν να φέρει μιά πραγματική επανάσταση στην φυσική με την μικροσκοπική περιγραφή των μακροσκοπικών συστημάτων και την εισαγωγή της ιδέας της εντροπίας. Έτσι αποκαταστάθηκε η παλαιότερη εμπειρική επιστήμη της θερμοδυναμικής, μιά περιγραφή που κυριαρχούσε ως εκείνη την εποχή με τις θερμικές μηχανές. Σήμερα, δεν μας είναι ιδαίτερα δύσκολο να εκφράσουμε τις ιδέες του Boltzmann και στην κβαντική γλώσσα. Οι κβαντικές (διακριτές) καταστάσεις, από την αρχή της απροδιοριστίας του Heisenberg, αντιστοιχούν σε ένα συγκεκριμένο όγκο (h^d) του κλασσικού φασικού χώρου, με τον εκθέτη d να μετράει την διάσταση του χώρου των θέσεων. Επομένως, από την καταμέτρηση του αριθμού των κβαντικών καταστάσεων εκτιμάται, κατευθείαν, η εντροπία. Είναι ανάλογη του αριθμού των ψηφίων του πολύ μεγάλου αριθμού των καταστάσεων, μέσω του λογαρίθμου, ενώ αναλόγως μπορεί να ορισθούν η θερμοκρασία και τα υπόλοιπα θερμοδυναμικά μεγέθη.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η ύλη που συμπεριλάβαμε στον δεύτερο τόμο αφορά την ουσία της στατιστικής φυσικής και προϋποθέτει την γνώση υποβάθρου που δόθηκε με τον πρώτο τόμο. Καλύπτει την κλασσική και κβαντική στατιστική των Ν-σωματίων και τα κβαντικά αέρια Fermi και Bose. Αγνοήθηκαν ορισμένα θέματα που ίσως θα έπρεπε να συμπεριλαμβάνονται (π.χ. οφείλουμε στον αναγνώστη ένα παράρτημα για την υπεραγωγιμότητα, για την εξίσωση Schrondinger σε τυχαίο δυναμικό με το φαινόμενο του εντοπισμού και την μελέτη στατιστικών ensembles από τυχαίες μήτρες). Οι λόγοι ήσαν αφ' ενός ο περιορισμένος χρόνος που είχαμε στην διάθεσή μας και αφ' ετέρου οι δυσμενείς συνθήκες που γίνεται η έκδοση. Θα πρέπει, όμως, εδώ να ευχαριστήσω τον Δ. Κατσάνο για την επιμέλεια των σχημάτων του βιβλίου. Οι εικόνες του εξωφύλλου είναι fractals (το συσσωμάτωμα με διάχυση, η πεταλούδα του Lorenz, κ.λ.π.)

Προσωπικά, δεν μπορώ να θεωρηθώ νεόφυτος στο πεδίο αυτό της φυσικής αφού ασχολούμαι ερευνητικά, ως εργάτης έσχατος, με θέματα που άπτονται της στατιστικής φυσικής της συμπυκνωμένης ύλης, κυρίως στην κβαντική ηλεκτρονική δομή των υλικών παρουσία τυχαιότητας, την μη γραμμική φυσική (χάος, fractals, κ.λ.π.), ενώ τα τελευταία χρόνια ένα μεγάλο μέρος των ενδιαφερόντων μου εστιάσθηκε στις θεωρίες στατιστικών ensembles από τυχαίες μήτρες με εφαρμογές σε μεσοσκοπικά συστήματα και σε θέματα κβαντικού χάους. Μερικά τέτοια ελκυστικά θέματα μοντέρνας στατιστικής φυσικής, όπως το διδιάστατο ηλεκτρονικό αέριο παρουσία μαγνητικού πεδίου, το στατιστικό πρόβλημα της διήθησης με μια εισαγωγή στις μεθόδους της προσομοίωσης και το κλασσικό χάος συζητούνται στα παραρτήματα Β, Γ και Δ του τόμου που κρατάτε στα χέρια σας.

Η ύλη κατανέμεται ως εξής: Μετά την εισαγωγή με το 1ο κεφάλαιο, ακολουθεί η στατιστική Boltzmann του ενός σωματίου και η παρουσίαση των αναγκαίων τρόπων καταμέτρησης των κβαντικών καταστάσεων στο 2ο κεφάλαιο. Στο 3ο κεφάλαιο δίνονται οι βασικές μέθοδοι και τα αποτελέσματα της στατιστικής φυσικής στην περίπτωση του ιδανικού αερίου. Η κλασσική στατιστική συνοψίζεται στο 4ο κεφάλαιο ενώ στά κεφάλαια 5, 6 και 7 παρουσιάζονται: η κβαντική στατιστική στο μεγαλοκανονικό ensemble, οι τρόποι εποικισμού των μονοσωματιακών καταστάσεων και οι εφαρμογές στις περιπτώσεις των αερίων Fermi και Bose. Η θεωρία ανακεφαλαιώνεται στο τέλος κάθε κεφαλαίου, ενώ δίνονται ορισμένες βασικές ερωτήσεις καθώς και μια σειρά (και λυμένων αυτή τη φορά!) ασκήσεων για εμπέδωση της θεωρίας.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Τα εκτενή παραρτήματα στο τέλος του βιβλίου περιλαμβάνουν τα βασικά στοιχεία μαθηματικών (π.χ. τα απαραίτητα ολοκληρώματα), την κβαντική θεωρία του διδιάστατου ηλεκτρονικού αερίου παρουσία μαγνητικού πεδίου (το κβαντικό φαινόμενο Hall), μια εισαγωγή στο στατιστικό προβλημα της διήθησης και τέλος, στα πλαίσια ενημέρωσης στις σύγχρονες εξελίξεις της στατιστικής φυσικής, εισάγεται ο αναγνώστης στις έννοιες του κλασσικού χάους.

Προσπάθησα σε όλο το κείμενο, να γενικεύσω την στατιστική περιγραφή σε μιά αυθαίρετη διάσταση του χώρου d. Αυτό έγινε για πολλούς λόγους και όχι, προφανώς, για να κάνω την ζωή του αναγνώστη (και την δική μου) δύσκολη. Πρώτον, είναι γνωστό πως η διάσταση παίζει τον πιό σημαντικό ρόλο σε μιά συμπαντικότητα (ή οικουμενικότητα) που διαπιστώνεται στην φυσική, δηλ. πολλές ιδιότητες εξαρτώνται μόνο από την διάσταση του χώρου και τίποτα άλλο (π.χ. η κβαντική θερμοχωρητικότητα στις χαμηλές θερμοκρασίες Τ λόγω των ηλεκτρονίων είναι γραμμική ως προς Τ ενώ συμπεριφέρεται ως d-οστή δύναμη T^d για τα φωνόνια, που περιγράφουν τις ταλαντώσεις των βαριών ατόμων στις d-διαστάσεις). Το χαρακτηριστικώτερο όμως παράδειγμα αποτελεί η περίπτωση των μεταβάσεων φάσης (π.χ. από υγρό σε στερεό), όπου οι κρίσιμοι εκθέτες που χαρακτηρίζουν τους απειρισμούς θερμοδυναμικών ποσοτήτων κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία εξαρτώνται μόνο από την διάσταση του χώρου και είναι οι ίδιοι για κάθε περίπτωση μετάβασης.

Επιπλέον, έχει διαπιστωθεί πως απλές προσεγγιστικές θεωρίες στον ρεαλιστικό τρισδιάστο κόσμο, όπως η θεωρία μέσου πεδίου του Landau για την μαγνήτιση στους σιδηρομαγνήτες, γίνονται ακριβείς για διαστάσεις πάνω από κάποια κρίσιμη διάσταση (π.χ. για τον σιδηρομαγνητισμό πάνω από 4, ενώ για το πρόβλημα της διήθησης στο ΠΑΡΑΡΤ. Γ πάνω από 6). Επομένως, πολλά δύσκολα προβλήματα απλοποιούνται στις μεγάλες διαστάσεις και επιλύονται ακριβώς. Τα τελευταία χρόνια με τα αγαπημένα προσεγγιστικά αναπτύγματα των φυσικών, που βασίζονται στην θεωρία διαταραχών, επιδιώκεται η προσέγγιση των ρεαλιστικών (d=3, αλλά και 2 και 1) διαστάσεων ξεκινώντας από τις ακριβείς λύσεις στις φανταστικές διαστάσεις. Επίσης έχει αποδειχθεί πως λύσεις με μεθόδους της ομάδας αναχανονικοποίησης, ενώ είναι προσεγγιστικές στις πραγματικές διαστάσεις, είναι ακριβείς μόνο σε χώρους μη ακεραίων μορφοκλασματικών διαστάσεων. Πρέπει να αναφερθεί πως σε κάθε περίπτωση μας ενδιαφέρει ο πραγματικός (τρισδιάστατος) κόσμος, χωρίς όμως

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

να λησμονούμε πως διδιάστατα films και μονοδιάστατα wires κατασκευάζονται σήμερα στο εργαστήριο και χρησιμεύουν στην τεχνολογική εξέλιξη. Ας δούμε λοιπόν αυτό το παιχνίδι των διαστάσεων σαν έναν τρόπο που ο θεωρητικός φυσικός, που συχνά αδυνατεί να λύσει τα προβλήματα στον πραγματικό χώρο, ελπίζει να τα προσεγγίσει με μιά ακριβή λύση, έστω και σε κάποια αφηρημένη διάσταση. Μοιάζει λιγάκι με τον μεθυσμένο που έψαχνε να βρει τα κλειδιά, που είχε χάσει, κάτω από το φανάρι του δρόμου. Στην παρατήρηση φίλου του ότι δεν τα είχε χάσει εκεί απάντησε: "Ναί, πράγματι, αλλά εδώ μόνο υπάρχει φως για να ψάξω"! Είναι, επίσης, κοινός τόπος στους φυσικούς πως σε εξαιρετικά μικρές κλίμακες μεγέθους τα σωμάτια "βλέπουν" παραπάνω διαστάσεις απ' ότι εμείς.

Υπενθυμίζω στον αναγνώστη πως για να κατανοήσει ένα θέμα πρέπει να το αγαπήσει. Από την πλευρά μου ο πρώτος στόχος μου ήταν να τον κάνω να ενδιαφερθεί γι' αυτό επιδιώκοντας την συμμετοχή του(...talk to me and I may listen, show me and I may remember, involve me and I may understand). Μπορεί όμως εδώ να τεθεί ένα γενικώτερο ερώτημα: Γιατί να ασχολούμαστε με την στατιστική φυσική ή ακόμη, γιατί πρέπει να σπουδάσουμε και να μάθουμε φυσική; Η απάντηση είναι δύσκολη και θα μπορούσε να αναχθεί ακόμη και στο ψυχολογικό επίπεδο, π.χ. στην Φροϋδική άποψη ότι η γνώση και η δημιουργική τάση του ανθρώπου προέρχονται από το σεξουαλικό ένστικτο με την φυγή από την πραγματικότητα μέσω της κατασκευής φανταστικών κόσμων. Επομένως η έφεση του ανθρώπου για μάθηση βασίζεται στην έμφυτη περιέργεια για την γνώση του φυσικού κόσμου που μας περιβάλλει. Μόνο η κατανόηση της πολύπλοκης φυσικής πραγματικότητας είναι ικανή να μας οδηγήσει στην υπέρβαση των ορίων του δικού μας προσωπικού μικρόκοσμου. Πρέπει όμως να μην ξεχνάμε πως η δημιουργική αυτή περιέργεια δεν είναι άμοιρη κινδύνων. Όπως ο Οιδίποδας λύνοντας το μυστήριο της σφίγγας οδηγήθηκε σε μια καταστροφική πορεία γεγονότων, ξεκινώντας από την μελέτη του φυσικού κόσμου, οδηγηθήκαμε στα σημερινά καταστροφικά όπλα και την διαρκή υποβάθμιση του περιβάλλοντος που ζούμε.

Όμως εμείς οι φυσικοί είμαστε υποχρεωμένοι (... "καταδικασμένοι" είναι η φράση που θα χρησιμοποιούσε η βαρύγδουπη πολιτική κοινότητα) να συνεχίσουμε αυτό το πνευματικό ταξίδι προς το άγνωστο. Επίσης, παρά το αναμφισβήτητο γεγονός ότι η επιστήμη αποτελεί θεμελιώδη παράγοντα για την ζωή μας, δεν πρέπει σε καμμία περίπτωση να υποδουλωθούμε σε αυτήν.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Ούτε πρέπει να ασπασθούμε με θρησκευτική προσήλωση μια ηθική που στηρίζεται απόλυτα στον επιστημονικό ορθολογισμό και την γνώση, αλλά στα πλαίσια μιας ελεύθερης κοινωνίας πρέπει να δεχθούμε την συνύπαρξη των διαφορετικών πιστεύω και απόψεων. Οδηγός σε αυτήν τη πορεία πρέπει να είναι η διαπίστωση πως, ακόμη κι αν εξαιρέσουμε το εξωτικό βασίλειο της κβαντικής μηχανικής, ο κόσμος μας δεν διέπεται από τάξη και προβλεψιμότητα. Στα πλαίσια της θεωρίας του χάους προκύπτει αβεβαιότητα όχι μόνο από τις άτακτες κινήσεις λόγω μη προβλέψιμων τυχαίων αιτίων, π.χ. η κίνηση ακόμη και λίγων σωματίων σε ένα κουτί, αλλά και σε λίγες πλήρως αιτιοκρατικές εξισώσεις!

Με την θωρία του χάους η κοινή λογική της στατιστικής φυσικής, ότι η πολύπλοκη συμπεριφορά προκύπτει μόνο στις περιπτώσεις που έχουμε να κάνουμε με πολλά σωμάτια, καταρρέει. Η έννοια της μη προβλεψιμότητας αποτελεί πλέον μιά συνηθισμένη και όχι ειδική περίπτωση, με αποτέλεσμα ακόμη και συστήματα που περιγράφονται τέλεια από ορισμένες (λίγες) εξισώσεις να μην οδηγούν σε ανάλογες προβλέψιμες λύσεις. Π.χ. στο στατιστικό σύνολο των σωματίων αερίου σε ένα κουτί θα μπορούσαμε, με βάση την κλασσική μηχανική για δεδομένες αρχικές συνθήκες, να προβλέψουμε (τουλάχιστον υποθετικά ή για μικρό αριθμό σωματίων) την κίνησή τους για πάντα. Είναι όμως αδύνατον να απαλλάξουμε το σύστημα τελείως από την επίδραση εξωτερικών συνθηκών, π.χ. όσο κι αν το απομονώσουμε θα υπάρχει πάντα μιά μικρή βαρυτική επίδραση στα σωμάτια, ακόμη κι αν αυτή οφείλεται σε ένα σωμάτιο που βρίσκεται δισεκατομμύρια έτη φωτός μακριά! Παρά το μικρό μέγεθος αυτής της διαταραχής (δεν μπορούμε ασφαλώς να φαντασθούμε μικρότερη!) μετά από ένα μικρό χρονικό διάστημα (εκατομμυριοστά του δευτερολέπτου) η επίδρασή της ενισχύεται σε τέτοιο βαθμό που χάνεται κάθε δυνατότητα πρόβλεψης και οδηγούμεθα στο χάος. Ο Άγγλος φυσικός Berry υπολόγισε πως στο παιχνίδι του μπιλλιάρδου αρκούν έξι ή εφτά κτυπήματα για να γίνει η κίνηση στις μπάλλες αβέβαιη, λόγω της απειροελάχιστης βαρυτικής επίδρασης που εξασκούν τα σώματα των παικτών σε αυτές! Αυτό δεν πρέπει να είναι άσχετο με το γεγονός πως δεν υπάρχει παίκτης στον κόσμο που να τα καταφέρνει σε πολλά διαδοχικά κτυπήματα!

Το κλασσικό χάος (όπως εκτίθεται στο Παρ. Δ) δεν αναιρεί βέβαια την ακρίβεια της φυσικής επιστήμης, αφού όταν δεν μπορούμε να προβλέψουμε κάτι επακριβώς συνήθως διαπιστώνουμε πως δεν χρειάζεται. Απλώς

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

επαναφέρει την αδήριτη αναγκαιότητα της στατιστικής περιγραφής ακόμη και σε τέτοια πλήρως αιτιοκρατικά συστήματα λίγων βαθμών ελευθερίας. Όταν όμως ο Poincaré έθετε τα θεμέλια του κλασσικού χάους στις αρχές του εικοστού αιώνα (που γνώρισε ανάπτυξη με την χρήση των ηλεκτρονικών υπολογιστών μόνο τα τελευταία χρόνια), ο Planck έκανε μιά άλλη επανάσταση που οδήγησε στην κβαντική μηχανική. Στο ερώτημα αν υπάρχει χάος στον κβαντικό κόσμο (αν και το θέμα αυτό με ενδιαφέρει από ερευνητική άποψη) δεν θα απαντήσω σε αυτό το εγχειρίδιο, αφήνοντας ένα ενδεχόμενο να το κάνω με κάποιο τρόπο στο άμεσο μέλλον.

Κλείνοντας τον πρόλογο πρέπει να προειδοποιήσω τον αναγνώστη πως δεν πρέπει, σε καμμία περίπτωση, να περιμένει την κατανόηση του περιεχομένου αυτού του τόμου χωρίς αυστηρή εξάσκηση και προσωπικές θυσίες. Όπως ακριβώς ο αθλητής για να πετύχει τα ρεκόρ και την καταξίωση πρέπει να καταβάλλει επίπονο προσωπικό έργο, έτσι πρέπει και ο αναγνώστης να αντιμετωπίσει την πρόκληση της στατιστικής φυσικής. Να είναι όμως σίγουρος, αν το τολμήσει, θα ικανοποιηθεί η δίψα του για μάθηση αλλά θα έλθει και σε επαφή με τα επιτεύγματα της σύγχρονης τεχνολογίας. Δυστυχώς, όμως, στην σημερινή Ελλάδα που αναλώνεται σε ανούσιες (αλλά κατά την γνώμη μου πολύ επικίνδυνες) παροξυσμικές εθνικιστικές εξάρσεις (που βοηθούν μερικούς πολιτικούς να αποκτήσουν απρόσμενη δημοτικότητα), σε συνδυασμό με ιδέες περί υπεροχής της ορθοδοξίας (στο πλευρό των Σέρβων σε αντίθεση με όλα τα κράτη της υφηλίου), κ.λ.π., ενώ, ταυτόχρονα, ανταμείβει με υπουργικό θώκο κάποιον που αρνήθηκε να την υπηρετήσει(!) μου είναι, λιγάκι, δύσκολο να προτρέψω τον αναγνώστη να διαβάσει αυτό το βιβλίο. Από μέρους μου προσπάθησα να μεταδώσω το ενθουσιασμό μου και την απόλαυση από το αντικείμενο, αλλά μπορεί ο αναγνώστης να έχει (mutatis mutandis) πολύ καλύτερα πράγματα να κάνει! Μην ξεχνάτε όμως, πως ένα βιβλίο σαν αυτό οι φοιτητές το παίρνουν δωρεάν και μπορεί να χρησιμεύσει απλώς σαν συμπλήρωμα μιας βιβλιοθήκης ή για να σας κάνει να νυστάξετε κάποιο βράδυ ή (άλας!) για να ανάψετε την σόμπα σας τις κρύες νύχτες του χειμώνα...

Σπύρος Ευαγγέλου

Μάιος 1994

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

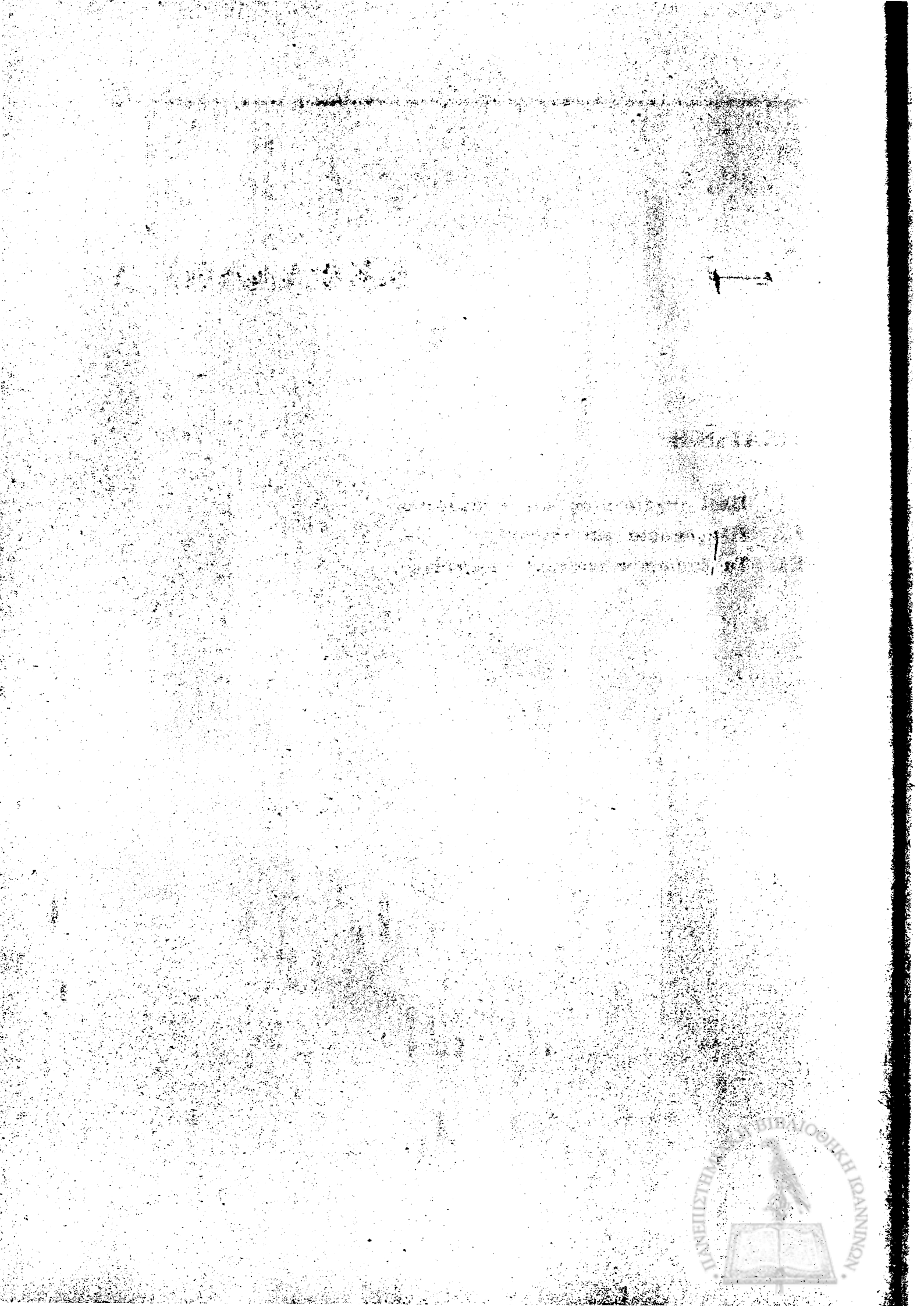
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1. Περί τυχαιότητας και πιθανοτήτων
1.2. Πληροφορία και εντροπία
1.3. Τα βασικά στατιστικά ensembles

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



1.1. Περί τυχαιότητας και πιθανοτήτων

Στη ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι γνωρίσαμε την έννοια της τυχαιότητας, όπως αυτή εκφράζεται με την πιθανότητα να συμβεί ένα τυχαίο γεγονός. Είδαμε πως ένα τίμιο νόμισμα, που ρίχνεται πολλές φορές, αναμένεται να σταθεροποιήσει την συχνότητα εμφάνισης της μιας ή της άλλης πλευράς του (Κορώνα ή Γράμματα) γύρω στο 50%. Τότε λέμε ότι η αντίστοιχη πιθανότητα εμφάνισης είναι $p = 0.5$. Έτσι, παρ' όλο που η ρίψη του νομίσματος είναι αβέβαια (Κ ή Γ), με την επανάληψη των ρίψεων εξασφαλίζουμε ένα σίγουρο αποτέλεσμα για την πιθανότητα να συμβεί το ένα (Κ) ή το άλλο (Γ) γεγονός. Επομένως, μπορεί να ορισθεί η πιθανότητα p να συμβεί κάποιο τυχαίο γεγονός, που είναι ένας αριθμός από το μηδέν μέχρι το ένα. Για ασυμβίβαστα (που δεν συμβαίνουν ταυτόχρονα) γεγονότα Α και Β ισχύει η σχέση

$$p(\text{Α ή Β}) = p(\text{Α}) + p(\text{Β}) . \qquad (1.1)$$

Ένα παράδειγμα ασυμβίβαστων γεγονότων Α και Β για τα οποία ισχύει η εξ. (1.1), είναι: "Α = θα βρέξει σήμερα" και "Β = δεν θα βρέξει σήμερα".

Εκτός από τα ασυμβίβαστα υπάρχουν και τα ανεξάρτητα γεγονότα που είναι αυτά που δεν αλληλοσχετίζονται, π.χ. τα γεγονότα: "Α = θα βρέξει σήμερα" και "Β = θα περάσω το μάθημα της στατιστικής φυσικής". Η πιθανότητα δύο ανεξάρτητων γεγονότων να συμβούν ταυτόχρονα είναι το γινόμενο

$$p(\text{Α και Β}) = p(\text{Α}) \cdot p(\text{Β}) . \qquad (1.2)$$

Έτσι, αν 0.9 (90%) είναι η πιθανότητα να συμβεί το Α και 0.5 (50%) το Β τότε $0.9 \times 0.5 = 0.45$ (45%) είναι η πιθανότητα να συμβούν και τα δύο μαζί (δηλ. μισή περίπου φορά από τις φορές που βρέχει θα περάσω το μάθημα).

Παράδειγμα 1: Αν η πιθανότητα είναι 50% να βρέξει το Σάββατο και 50% να βρέξει την Κυριακή ποιά είναι η πιθανότητα να βρέξει το Σαββατοκύριακο;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(Στο χιουμοριστικό αυτό παράδειγμα μην ξεγελαστείτε να απαντήσετε100% και πάρετε την ομπρέλλα μαζί σας!)

Παράδειγμα 2: Αν η πιθανότητα να υπάρχει μία βόμβα σε ένα αεροπλάνο είναι 1: 1 000 000 = 10^{-6} (ή 10^{-4}%), ποιά είναι η πιθανότητα να υπάρχουν, ανεξάρτητα, δύο βόμβες ταυτόχρονα σε αυτό; (**Απάντηση**: Το γινόμενο των πιθανοτήτων 10^{-12} ή 10^{-10}%). Βέβαια αυτό δεν σημαίνει πως αν κουβαλήσουμε μαζί μας μια βόμβα στο αεροπλάνο μικραίνουμε την πιθανότητα να βρεθεί καί κάποιος άλλος που να κουβαλάει μια δεύτερη(γιατί;)

Η έννοια της πιθανότητας για ένα τυχαίο γεγονός Α εκτιμάται, συνήθως, από την συχνότητα εμφάνισης του γεγονότος σε επανάληψη πολλών πειραμάτων. Συχνά όμως είναι δύσκολη η επανάληψη τέτοιων πειραμάτων (π.χ. στο τυχαίο γεγονός "Α = θα βρέξει σήμερα" δεν υπάρχει αυτή η δυνατότητα). Τότε επιδιώκουμε την προσομοίωση του προβλήματος με χρήση των ηλεκτρονικών υπολογιστών, (π.χ. με την εισαγωγή μετεωρολογικών δεδομένων στην πρόβλεψη του καιρού, κ.λ.π.) Ενδιαφέρον, επίσης παρουσιάζει η πιθανότητα "υπό συνθήκας", δηλ. να συμβεί το Β όταν γνωρίζω ότι έχει συμβεί το γεγονός Α. Αν τα Α και Β είναι ανεξάρτητα δεν μου λέει, προφανώς, τίποτα για το γεγονός Β ότι έχει συμβεί το Α, επομένως

$$p(\text{"Β όταν γνωρίζω πως έχει συμβεί το Α"}) = p(B) \quad , \qquad (1.3)$$

όταν τα Α και Β είναι ανεξάρτητα. Έτσι στην περίπτωση που "Α = το ζώδιο μου είναι δίδυμοι", "Β = θα κερδίσω στο LOTTO σήμερα" η πιθανότητα να συμβεί το Β όταν γνωρίζω ότι έχει συμβεί (ισχύει) το Α, όταν τα Α και Β είναι ανεξάρτητα είναι απλώς ίση με την p(B). Συμπεραίνουμε, λοιπόν, πως το ωροσκόπιο μας είναι άσχετο με την επιτυχία μας ή όχι στο LOTTO, η οποία αναμένεται να είναι η ίδια και για όλα τα ζώδια. Αυτό, βέβαια, με την προϋπόθεση πως το να κερδίσουμε στο LOTTO και το είδος του ζωδίου μας είναι ανεξάρτητα γεγονότα.

Η ανεξαρτησία των παραπάνω γεγονότων μπορεί να ελεγχθεί με επαναλήψεις πειραμάτων σε ένα μεγάλο στατιστικό δείγμα, απ' όπου (πιστεύω) θα φανεί ότι πράγματι η επιρροή των πλανητών και του ήλιου την ημέρα της γέννησής μας μπορεί να αγνοηθεί στο αποτέλεσμα του LOTTO. Η

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

θεωρία του χάους, όπως συζητείται σε άλλα κεφάλαια, ενδυναμώνει αυτή την άποψη, αφού ακόμη και αν παραδεχθούμε την ύπαρξη κάποιων μικρών βαρυτικών επιρροών κατά την γέννησή μας. Τέτοιες επιρροές μπορεί να θεωρηθούν πως επηρεάζουν ανεπαίσθητα τις αρχικές συνθήκες και, αφού το χάος αποτελεί τον κανόνα στην φύση, θα προκύψει πάλι τυχαιότητα (αφού ένα χαοτικό σύστημα δεν θυμάται τις αρχικές του συνθήκες). Υπάρχουν όμως και περιπτώσεις παρέμβασης στο Β όταν είναι γνωστό το Α. Τότε τα Α και Β δεν είναι πλέον ανεξάρτητα, π.χ. όταν το γεγονός Β αφορά την επιτυχία μας στις εξετάσεις οι πληροφορίες για το ζώδιό μας (γεγονός Α) συχνά επηρεάζουν άμεσα το Β, με αναπτέρωση του ηθικού μας από γνώση του Α, που μπορεί τώρα να αυξήσει την πιθανότητα επιτυχίας!

Στο ΠΑΡΑΡ. Γ συζητείται η περίπτωση των τυχαίων αριθμών και οι τρόποι δημιουργίας τους. Αν φαντασθούμε ένα ζάρι με δέκα πλευρές, (τις 0, 1, 2, ...,9) η κάθε ρίψη του θα μας δίνει έναν τυχαίο αριθμό ενώ πολλές επαναλήψεις των ρίψεων μια ακολουθία τυχαίων αριθμών, π.χ.

$$7\,4\,8\,1\,7\,9\,3\,2\,6\,5\,9\,0\,9\,4\,0\,6\,3\,2\ldots \qquad (1.4)$$

Που όμως χρειάζονται οι τυχαίοι αριθμοί; Στο ΠΑΡΑΡ. Γ θα δούμε πως τους κατασκευάζουμε και θα συναντήσουμε την χρήση τους στην προσομοίωση φυσικών διαδικασιών που περιλαμβάνουν την τυχαιότητα. Π.χ. αν θέλουμε να προσομοιώσουμε ένα μη περιοδικό (άτακτο) στερεό σώμα θα απαιτηθεί η χρήση τυχαίων αριθμών για να καθορίσουμε την τυχαία θέση του κάθε σωματίου ή την τιμή του τυχαίου δυναμικού του. Αν σκεφθεί κάποιος το παράδειγμα μιας ομάδας χαρτοπαικτών (π.χ. δύο που έχουν να αντιμετωπίσουν άλλους δύο) είναι προφανές, ότι η συνεργασία μεταξύ συμπαικτών απαιτεί τη δράση τους με προβλέψιμο τρόπο (για τον συμπαίκτη τους, ώστε αὐτός να κατανοεί τι συμβαίνει). Ταυτοχρόνως όμως, η ανταγωνιστικότητα με την αντίπαλη ομάδα των παικτών επιβάλλει την δράση με τυχαίο τρόπο, ώστε να μην είναι προβλέψιμη γι' αυτούς. Επομένως, συχνά επιβάλλεται η τυχαιότητα στη δράση, π.χ. με τη χρήση των τυχαίων αριθμών, αν επιθυμούμε να μην μας παγιδεύουν οι ανταγωνιστές μας (πράγμα που σίγουρα θα συμβεί αν δράσουμε με προβλέψιμο τρόπο).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

1.2. Πληροφορία και εντροπία

Η στατιστική φυσική γεννήθηκε στις αρχές του αιώνα. Μόλις το 1900 οι φυσικοί δεν πίστευαν πως ένα αέριο αποτελείται από (περίπου 10^{24}) μόρια που κινούνται πάνω - κάτω αλληλοσκεδαζόμενα προς όλες τις κατευθύνσεις. Την ίδια εποχή το ευαγγέλιο των φυσικών ήταν η κλασσική μηχανική που, όπως σήμερα γνωρίζουμε, έχει ιδιαίτερα περιορισμένη ισχύ στον μικρόκοσμο τον οποίο ερμηνεύει η κβαντική μηχανική, που ανακαλύφθηκε μερικές δεκαετίες αργότερα. Φαντασθείτε, λοιπόν, πόσο πρωτοποριακή ήταν η συνεισφορά του Αυστριακού φυσικού Boltzmann, που στα πλαίσια της "ατομικής υπόθεσης" μπόρεσε να μετρήσει το ποσό τυχαιότητας σε μια συγκεκριμένη ποσότητα ενός αερίου. Με την συνεισφορά του Boltzmann και αργότερα του Gibbs μπορούμε σήμερα να εκτιμήσουμε το μοριακό στατιστικό χάος που περιέχεται, π.χ. σε 1 λίτρο αερίου θερμοκρασίας Τ. Πώς όμως γίνεται αυτό;

Η τυχαιότητα του συστήματος των πολλών μορίων ενός αερίου μετράται μέσω της φυσικής ποσότητας της εντροπίας. Παρ' όλο που το κάθε επιμέρους σωμάτιο εκτελεί μια τυχαία κίνηση, το σύνολο των σωματίων του αερίου μπορεί να περιγραφεί με ακρίβεια μέσω της εντροπίας. Η εντροπία είναι η έννοια κλειδί της στατιστικής φυσικής που συνδέεται και με την θεωρία πληροφοριών, αφού το ποσό της πληροφορίας που περιέχεται σε ένα μήνυμα είναι ίσο με το ποσό της εντροπίας σε ένα σύνολο (στατιστικό ensemble) από μηνύματα. Είναι ιδιαίτερα εμφανής η δύναμη της πληροφορίας στη σημερινή κοινωνία, όπου υπάρχει ένα πραγματικός κατακλυσμός από χρήσιμες (και πολύ συχνά άχρηστες) πληροφορίες.

Η πληροφορία συνήθως εκφράζεται με μια συγκεκριμένη διευθέτηση από βασικά στοιχεία. Ένα παράδειγμα αποτελεί η κωδικοποίηση της γεννητικής πληροφορίας, π.χ. για κάποιον ιό, με το αντίστοιχο μήνυμα γράφεται σαν μια λέξη με 9749 γράμματα σε ένα αλφάβητο των 4 γραμμάτων A, T, G και C. Με ένα, λοιπόν, τέτοιο σύντομο σχετικά μήνυμα, που μπορεί να γραφεί και σε ένα σχετικά μικρό βιβλίο, μπορεί να περιγραφεί ακόμη και ο καταστροφικός ιός του AIDS, π.χ. με την ακολουθία των λέξεων

$$ATGCAATGGACACC... \qquad (1.5)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Ένα μήνυμα σαν αυτό (η συγκεκριμένη πληροφορία της εξ. (1.5)) θα μπορούσε να πέσει στα χέρια κάποιου εχθρού της ανθρωπότητας με απρόβλεπτες (δραματικές) συνέπειες. Όμως, ποιός είναι ο αριθμός όλων των διαφορετικών μηνυμάτων με 10.000 περίπου γράμματα στο μικρό αλφάβητο των 4 γραμμάτων, που ακολουθείται στην περίπτωση της γεννετικής πληροφορίας; Με άλλα λόγια, πόσα διαφορετικά μηνύματα σαν κι αυτό της εξ. (1.5) υπάρχουν;

Ο αριθμός των διαφορετικών μηνυμάτων του τύπου της εξ. (1.5) υπολογίζεται εύκολα (ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. I) και είναι $4^{10000} \approx 4^{(5/3)6000} \approx 10^{6000}$. Είναι ένας φανταστικά μεγάλος αριθμός με έξι χιλιάδες ψηφία(!) που υπερβαίνει κατά χιλιάδες ψηφία (!) τον αριθμό όλων των ατόμων του σύμπαντος ($\sim 10^{53}$). Επομένως η πιθανότητα να πετύχει κάποιος την συγκεκριμένη ακολουθία γραμμάτων που αντιστοιχεί στον ιό του AIDS είναι $\approx 10^{-6000}$, που εκφράζεται με έναν αριθμό που έχει περίπου 6 000 ψηφία μετά την υποδιαστολή! Είναι προφανές λοιπόν, ότι μια τόσο μικρή πιθανότητα (βέβαια δεν είναι μηδέν) μπορεί να μας εξασφαλίζει από το ενδεχόμενο της πρόβλεψης του συγκεκριμένου ιού με τυχαίο τρόπο.

Βλέπουμε λοιπόν, πως την δυσκολία του να προβλέπουμε ένα μήνυμα την εκφράζει το ποσό πληροφορίας που περιέχεται στο μήνυμα ή, ισοδύναμα, το ποσό της εντροπίας του. Η πληροφορία είναι ανάλογη του

"αριθμού των ψηφίων που περιγράφει τον αριθμό όλων των δυνατών μηνυμάτων" .

Ο ορισμός αυτός είναι ταυτόσημος και με τον ορισμό της εντροπίας, αφού η εντροπία μπορεί να γραφεί ως ο λογάριθμος (ln ή log) του αριθμού όλων των δυνατών μηνυμάτων, λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι ο λογάριθμος μετράει τον αριθμό των ψηφίων ενός αριθμού. Η ποσότητα είναι η γνωστή ως εντροπία πληροφορίας που συναντήσαμε στην ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. I, που όταν πολλαπλασιαστεί με τη σταθερά του Boltzmann k_B μας δίνει την γνωστή θερμοδυναμική εντροπία S.

Η τυχαιότητα όμως υπεισέρχεται και με άλλο τρόπο στο γεννετικό υλικό. Συχνά παρουσιάζονται λάθη στην αλυσίδα των 10.000 περίπου γραμμάτων στο αλφάβητο των A,T, G και C. Αυτά τα λάθη μεταφέρονται με το DNA στα χρωμοσώματα και στις γεννετικές πληροφορίες, με αποτέλεσμα την κληρονομικότητα. Ο ρόλος των λαθών στην γεννετική πληροφορία είναι ιδιαίτερα σημαντικός, π.χ. στην επιβίωση των απογόνων, αφού οι πιο δυνατοί

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

συνδυασμοί (ή οι πιο τυχεροί) είναι αυτοί που τελικά θα επιβιώσουν. Η μετάδοση της πληροφορίας είναι ένα πολυ σημαντικό θέμα που ανάγεται στο άλυτο πρόβλημα του φαινομένου της προέλευσης της ζωής και της εξέλιξης των ειδών.

1.3. Τα βασικά στατιστικά ensembles

Ενώ είμαστε πολύ ικανοποιημένοι από τον τρόπο με τον οποίο η φυσική περιγράφει τα άτομα και τους γαλαξίες, δεν μπορούμε να πούμε το ίδιο και για την περίπτωση των πολύπλοκων συστημάτων που εμφανίζονται σε ενδιάμεσες κλίμακες μεγέθους. Ο Boltzmann άρχισε από την θερμοδυναμική, που ερμηνεύει με μεγάλη επιτυχία τα μακροσκοπικά συστήματα, και σκοπός του ήταν να οδηγηθεί στην περιγραφή τους με την παραδοχή της μη αποδεκτής στην εποχή του "ατομικής υπόθεσης*". Περιέγραψε, λοιπόν, τα σωμάτια σε ένα κλειστό σύστημα με τη χρήση της κλασσικής μηχανικής εισάγοντας την "υπόθεση της εργοδικότητας", που δηλώνει πως η κάθε μικροκατάσταση του συστήματος είναι εξ' ίσου πιθανή. Οδηγήθηκε έτσι στον γνωστό τύπο για την εντροπία, ως τον λογάριθμο του συνολικού αριθμού των μικροκαταστάσεων. Με την κλασσική έννοια του "φασικού χώρου", όπου το κάθε σημείο του καθορίζει τις θέσεις και τις αντίστοιχες ορμές όλων των μορίων ενός αερίου, επιτυγχάνεται η περιγραφή της χρονικής εξέλιξης ενός συστήματος μέσω της κίνησης του σημείου στο οποίο αντιστοιχεί στον φασικό χώρο. Μπορεί επομένως να ειπωθεί, πως η εργοδική υπόθεση εκφράζει την τάση του σημείου να καλύψει με την κίνησή του, με ίση πιθανότητα, όλον τον διαθέσιμο φασικό χώρο.

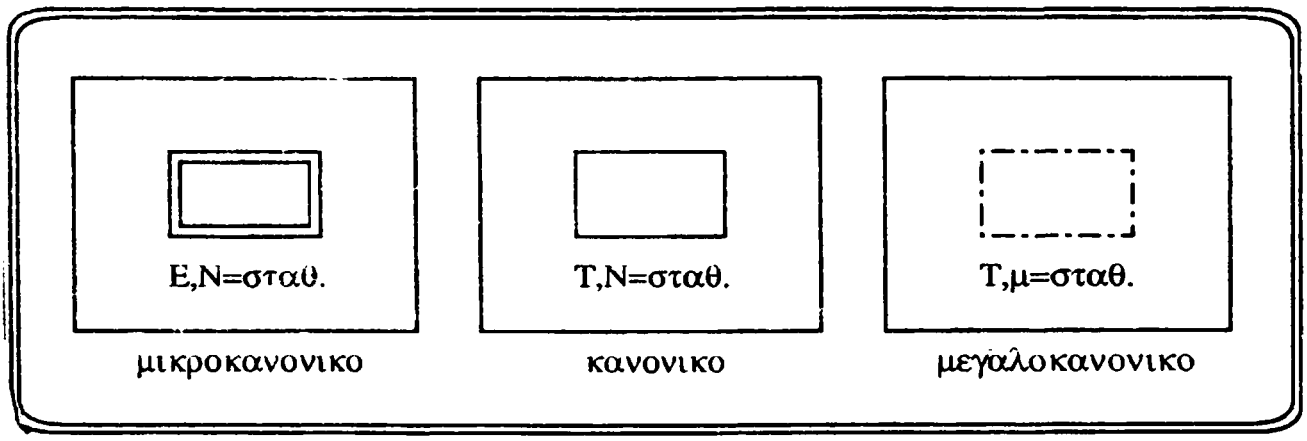
Οι νέες ιδέες της κβαντικής μηχανικής επέβαλλαν μια διαφορετική αντιμετώπιση της φυσικής πραγματικότητας. Αντί για τον όγκο του φασικού χώρου στην κβαντική μηχανική ομιλούμε για αριθμό καταστάσεων. Η καταμέτρηση των κβαντικών καταστάσεων και άλλες έννοιες, όπως η πυκνότητα καταστάσεων, είναι βασικές για τον ΤΟΜΟ ΙΙ που κρατάτε στα χέρια σας. Ο αριθμός των καταστάσεων που υπόκεινται σε μια ορισμένη συνθήκη, π.χ. οι καταστάσεις που αντιστοιχούν σε τιμές της ενέργειας

* Το κατεστημένο δεν αποδέχθηκε τον Boltzmann κυρίως λόγω της πίστης του στα άτομα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

μικρότερες από μια ορισμένη τιμή, οδηγεί κατευθείαν στην εντροπία, που μετριέται από τα ψηφία (με τον λογάριθμο) του ολικού αριθμού των καταστάσεων. Ανάλογα ορίζεται και η απόλυτη θερμοκρασία Τ μέσω της αύξησης της εντροπίας λόγω αύξησης της ενέργειας, το χημικό δυναμικό μ, ενώ έπονται και οι θερμοδυναμικοί νόμοι.

Με την εισαγωγή των στατιστικών ensembles που έγινε στην ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι ορίζεται η κατανομή των πιθανοτήτων για κάθε μια κατάσταση. Η μελέτη των φυσικών συστημάτων επιτυγχάνεται με τον υπολογισμό των αντίστοιχων μέσων τιμών στο δεδομένο στατιστικό ensemble. Οι διακυμάνσεις από δείγμα σε δείγμα των τιμών στο στατιστικό ensemble εκτιμούνται σχετικά εύκολα ενώ στο οριο των μακροσκοπικών σωμάτων είναι συνηθισμένο οι σχετικές (ή ποσοστικές) διακυμάνσεις να μειώνονται ανάλογα με το αντίστροφο της τετραγωνικής ρίζας του αριθμού των σωματίων ($1/\sqrt{N}$). Άμεσο αποτέλεσμα αυτής της διαπίστωσης είναι πως στο θερμοδυναμικό όριο ($N \to \infty$) οι σχετικές διακυμάνσεις τείνουν στο μηδέν, η κατανομή πιθανοτήτων γίνεται μιά συνάρτηση δ ακριβώς στην μέση τιμή και όλες οι μετρήσιμες τιμές συμπίπτουν πλέον με τις μέσες τιμές.



Σχ.1.1. Σχηματική αναπαράσταση του μικροκανονικού, κανονικού και μακροκανονικού ensembie. Οι διπλές γραμμες δεν επιτρέπουν μεταφορά ενέργειας ή σωματίων, οι απλές γραμμές επιτρέπουν την μεταφορά ενέργειας αλλά όχι σωματίων ενώ οι διακεκομμένες γραμμές επιτρέπουν την μεταφορά ενέργειας και σωματίων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Ένα κλειστό (θερμικά μονωμένο) σύστημα μελετάται στο **μικροκανονικό ensemble** και παρουσιάζει ίσες πιθανότητες για κατάληψη της κάθε μικροκατάστασής του. Αποτέλεσμα είναι η ταχεία μετάβασή του στην μακροκατάσταση ισορροπίας, που αντιστοιχεί στον συντριπτικά μεγαλύτερο αριθμό μικροκαταστάσεων. Δεν παρουσιάζει όμως μεγάλο ενδιαφέρον (Σχ.1.1), αφού πιό συνηθισμένη είναι η περίπτωση "ανοικτού" συστήματος σε σταθερή θερμοκρασία T (στην γλώσσα της ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. I σε επαφή με λουτρό θερμοκρασίας T) που οδηγεί στο **κανονικό ensemble**. Στην περίπτωση αυτή το σύστημα είναι μεταβλητής ενέργειας E αλλά σταθερής θερμοκρασία T και αριθμού σωματίων N(Σχ. 1.1). Ένα πρόβλημα ακόμη αυξημένης πολυπλοκότητας είναι η περίπτωση του **μεγαλοκανονικού (ή μακροκανονικού) ensemble** όπου επιτρέπεται όχι μόνο η ανταλλαγή ενέργειας αλλά και σωματίων με κάποιο μεγάλο λουτρό (εδώ η ενέργεια E και ο αριθμός σωματίων N είναι μεταβλητές) και είναι δυνατόν να λεχθεί πως το σύστημα είναι σε σταθερή θερμοκρασία T και σταθερό χημικό δυναμικό μ (Σχ. 1.1.).

1.3.1. Το κανονικό ensemble

Στο κανονικό ensemble η πιθανότητα p_n να βρούμε το σύστημα N σωματίων σε κάθε μία από τις (μικρο) καταστάσεις του $|n\rangle$, που αντιστοιχούν στις (συνήθως εκφυλισμένες) ενεργειακές στάθμες των N σωματίων E_n, με συνθήκες ισορροπίας σταθερών N, T και V, είναι ανάλογη του παράγοντα Boltzmann

$$p_n \propto \exp(-E_n/k_B T) \quad . \tag{1.6}$$

Από την κανονικοποίηση $\sum_n p_n = 1$ της (1.6) προκύπτει η κατανομή Boltzmann (ή η κανονική κατανομή χωρίς να συγχέεται με την κατανομή Gauss)

$$p_n = \frac{\exp(-E_n/k_BT)}{\sum_n \exp(-E_n/k_BT)} \quad , \tag{1.7}$$

ώστε

$$\boxed{p_n = \frac{1}{Z}\exp(-E_n/k_BT) = \frac{1}{Z}\exp(-\beta E_n)} \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_BT} \quad , \tag{1.8}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και με άθροισμα σε όλες τις (μικρο) καταστάσεις των N σωματίων $|n\rangle$

$$\boxed{Z = \sum_n \exp(-E_n / k_B T) = \sum_n \exp(-\beta E_n)} \quad . \tag{1.9}$$

Η Z είναι η θεμελιώδης ποσότητα της στατιστικής φυσικής γνωστή με το όνομα συνάρτηση επιμερισμού. Από την Z προκύπτει η μέση ενέργεια

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad , \tag{1.10}$$

ενώ η αντίστοιχη διασπορά $\langle (\Delta E)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ υπολογίζεται από την σχέση

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = -\frac{\partial}{\partial \beta}\langle E \rangle \, . \tag{1.11}$$

Στο αποτέλεσμα (1.7) μπορεί να φθάσουμε με δύο τρόπους (ίδε ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι). Ο πιό εύκολος είναι ίσως, μέσω της αρχής της μεγίστης εντροπίας, με μεγιστοποίηση της εντροπίας πληροφορίας

$$\frac{S}{k_B} = -\sum_n p_n \ln p_n \quad , \tag{1.12}$$

με τις συνθήκες

$$\sum_n p_n = 1 \quad ,$$

$$\sum_n E_n p_n = E = \langle E \rangle, \tag{1.13}$$

εισάγοντας δύο πολλαπλασιαστές Lagrange (λ και β). Η δεύτερη συνθήκη (εξ. 1.13) προϋποθέτει ότι το αποτέλεσμα της μέτρησης της ενέργειας (που εκφράζεται από τη μέση τιμή $\langle E \rangle$) είναι γνωστό, ενώ στην πράξη μετριέται πάντα η θερμοκρασία Τ. Στην λήψη της κανονικής κατανομής πιθανοτήτων

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(Boltzmann) (εξ. 1.8) χρησιμοποιούμε την θερμοδυναμική σχέση που ορίζει την θερμοκρασία T

$$\frac{1}{T}=\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N}\ , \tag{1.14}$$

με E = <E>, ενώ μπορεί κανείς να δείξει ότι ο δεύτερος πολλαπλασιαστής του Lagrange (ο πρώτος εκτιμάται από την συνθήκη κανονικοποίησης, ΣΤΑΤ, ΦΥΣ. I, Κεφ. 3.6.2.) στην διαδικασία μεγιστοποίησης "υπο συνθήκας" είναι $\beta = 1/k_B T$.

Στην κανονική κατανομή η ελεύθερη ενέργεια F υπολογίζεται συναρτήσει της θερμοκρασίας T, του όγκου V, του αριθμού σωματίων N, κ.λ.π. από την εξίσωση γέφυρας

$$\boxed{F=-k_B T\ \ln Z}\ . \tag{1.15}$$

Από την εξ. (1.15) μπορούν, επίσης, να ληφθούν οι υπόλοιπες θερμοδυναμικές ποσότητες (πίεση P, εντροπία S, μέση ενέργεια E=<E>) από τις σχέσεις

$$P=-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N},\ S=-\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N},\ E=F+T\,S. \tag{1.16}$$

1.3.2. Το μεγαλοκανονικό (ή μακροκανονικό) ensemble

Στην περίπτωση αυτή το σύστημα είναι σε επαφή με λουτρό ενέργειας (θερμική επαφή) ενώ ανταλάσσει και σωμάτια με λουτρό σωματίων (διαχυτική επαφή), με αποτέλεσμα η ενέργεια E αλλά και ο αριθμός των σωματίων N να είναι μεταβλητές ενώ οι T, V και μ είναι σταθερές. Η αντίστοιχη κανονικοποιημένη πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στην (μικρο) κατάσταση (για τα N σωμάτια) |n> με ενέργεια των N σωματίων $E_n = E_n(N)$ είναι

$$\boxed{p_{N,n}=\frac{1}{\mathcal{Z}}\ \exp[-\beta(E_n-N\mu)]}\ , \tag{1.17}$$

όπου η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού δίνεται από το διπλό άθροισμα

$$\boxed{\mathcal{Z}=\sum_N\ \sum_n \exp\left[-\beta(E_n-N\mu)\right]}\ . \tag{1.18}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η μεγαλοκανονική κατανομή είναι γνωστή και ως κατανομή Gibbs ενώ οι εξ. (1.17) και (1.18) προκύπτουν και με μεγιστοποίηση της εντροπίας της πληροφορίας

$$\frac{S}{k_B} = -\sum_N \sum_n p_{N,n} \ln p_{N,n} \qquad (1.19)$$

με τις εξής τρεις συνθήκες:

$$\sum_N \sum_n p_{N,n} = 1$$

$$\sum_N \sum_n E_n p_{N,n} = E$$

$$\sum_N \sum_n N p_{N,n} = N \quad , \qquad (1.20)$$

όπου E = <E> και N = <N> είναι η μέση ενέργεια και ο μέσος αριθμός σωματίων στο σύστημα. Μπορεί κανείς να δείξει (όπως μάθαμε στην ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι) ότι στην διαδικασία μεγιστοποίησης "υπό συνθήκας" πολλαπλασιάζουμε επί λ, β και γ τις προηγούμενες τρείς συνθήκες και αφού τις αφαιρέσουμε από την εντροπία πληροφορίας S/k_B λαμβάνουμε μία ποσότητα που την παραγωγίζουμε ως προς $p_{N,n}$ και εξισώνουμε το αποτέλεσμα με το μηδέν. Με περαιτέρω αντικατάσταση στις τρεις συνθήκες προκύπτουν οι πολλαπλασιαστές Lagrange λ, β και γ. Για τον δεύτερο πολλαπλασιαστή παίρνουμε πάλι $\beta = 1/k_B T$ ενώ ο τρίτος πολλαπλασιαστής γ εκτιμάται από το β καί το χημικό δυναμικό μ μέσω της σχέσης $\gamma = -\beta\mu$, αφού λάβουμε υπ' όψιν και τις θερμοδυναμικές σχέσεις για το χημικό δυναμικό

$$\mu = -T\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{E,V} = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V} = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} . \qquad (1.21)$$

Το μεγαλοκανονικό στατιστικό ensemble περιλαμβάνει σαν μερική περίπτωση το κανονικό ensemble. Επιπλέον, από την μεγαλοκανονική

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

συνάρτηση επιμερισμού $Z(\mu,T)$ προκύπτει μία νέα εκτατική μεταβλητή, το μεγαλοκανονικό δυναμικό $\Omega(\mu,T)$, από την σχέση

$$\boxed{\Omega = -PV = -k_B T \ln Z} \ , \qquad (1.22)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε και τις θερμοδυναμικές σχέσεις $G = \mu N = F + PV$.

Ο μέσος αριθμός σωματίων υπολογίζεται συναρτήσει της Z

$$\langle N \rangle = \frac{1}{Z} \sum_N \sum_n N \exp[-\beta(E_n - N\mu)]$$

$$= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} \ , \qquad (1.23)$$

και η αντίστοιχη διασπορά $\langle (\Delta N)^2 \rangle = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2$ είναι

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = -k_B T \left(\frac{\partial^2 \ln \Omega}{\partial \mu^2}\right)_{T,V} = k_B T \frac{\partial}{\partial \beta} \langle N \rangle \ . \qquad (1.24)$$

Σχέσεις ανάλογες με την (1.10) για την μέση ενέργεια $\langle E \rangle$ μπορεί επίσης να ληφθούν και στο μεγαλοκανονικό ensemble. Στο όριο του μεγάλου N οι σχετικές διακυμάνσεις $\sqrt{\langle (\Delta N)^2 \rangle}/\langle N \rangle$ από την εκτατικότητα του Ω (εξ. 1.23, 1.24) τείνουν στο μηδέν. Επομένως το μεγαλοκανονικό και το κανονικό ensemble συμπίπτουν σε αυτό το όριο. Περισσότερα όμως για την χρήση του μεγαλοκανονικού ensemble θα δούμε στο Κεφ. 5.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Η ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ BOLTZMANN ΤΟΥ ΕΝΟΣ ΣΩΜΑΤΙΟΥ

2.1 Η μέθοδος της στατιστικής φυσικής

2.2 Καταμέτρηση των κβαντικών καταστάσεων

2.3 Πυκνότητα καταστάσεων ρ(ε)

2.4 Συνάρτηση επιμερισμού z - κβαντικός όγκος V_Q

2.5 Ακριβής επίλυση του προβλήματος ελεύθερου σωματίου σε "κουτί"

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ BOLTZMANN ΤΟΥ ΕΝΟΣ ΣΩΜΑΤΙΟΥ

2.1. Η μέθοδος της στατιστικής φυσικής

Η στατιστική φυσική συνδέει την μικροσκοπική περιγραφή της κλασσικής (ή της κβαντικής) μηχανικής με την μακροσκοπική θεώρηση της θερμοδυναμικής. Η θερμοδυναμική, ενώ μας παρέχει σχέσεις μεταξύ των διάφορων μακροσκοπικών μεγεθών της ύλης, δεν μας επιτρέπει την ακριβή γνώση των αριθμητικών τιμών μιας συγκεκριμένης ιδιότητας του συστήματος. Η πληροφορία αυτή δίνεται από την λήψη της στατιστικής μέσης τιμής για τις μακροσκοπικές ιδιότητες με αφετηρία μικροσκοπικά (κλασσικά ή κβαντικά) μοντέλα. Επομένως, είναι δυνατόν να ειπωθεί πως η στατιστική φυσική συνοψίζεται σε μια διαδικασία λήψης μέσων τιμών με σκοπό την πρόγνωση των μετρήσιμων τιμών για βασικές μακροσκοπικές ποσότητες, γεφυρώνοντας έτσι τον μικρόκοσμο με τον μακρόκοσμο.

Η επιβεβαίωση και η ερμηνεία των θερμοδυναμικών νόμων στο όριο που ο αριθμός σωματίων N ενός μακροσκοπικού συστήματος είναι πολύ μεγάλος, αποτελεί τον πρωταρχικό στόχο της στατιστικής φυσικής. Στην ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. I είδαμε πως γι' αυτό το σκοπό απαιτήθηκε η εισαγωγή βασικών ιδεών της θεωρίας πιθανοτήτων και της μαθηματικής στατιστικής. Οι έννοιες που συναντήσαμε ήταν η μέση τιμή $\langle x \rangle$ ενός φυσικού μεγέθους x και η μέση απόκλιση των επιμέρους τιμών της x από την $\langle x \rangle$, όπως εκτιμάται μέσω της μέσης τιμής $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$. Η $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ αποκαλείται και διασπορά σ^2 ενώ $\sigma = +\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$ είναι η τυπική απόκλιση από τη μέση τιμή. Το βασικό αποτέλεσμα που προκύπτει στις περισσότερες περιπτώσεις συνοψίζεται στη σχέση για την σχετική ή ποσοτική τυπική απόκλιση από τη μέση τιμή

$$\frac{\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}}{\langle x \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad . \tag{2.1}$$

Η σχέση (2.1) είναι συνέπεια του γεγονότος, ότι η μέση τιμή $\langle x \rangle$ και η διασπορά $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ είναι εκτατικές μεταβλητές ($\propto N$).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

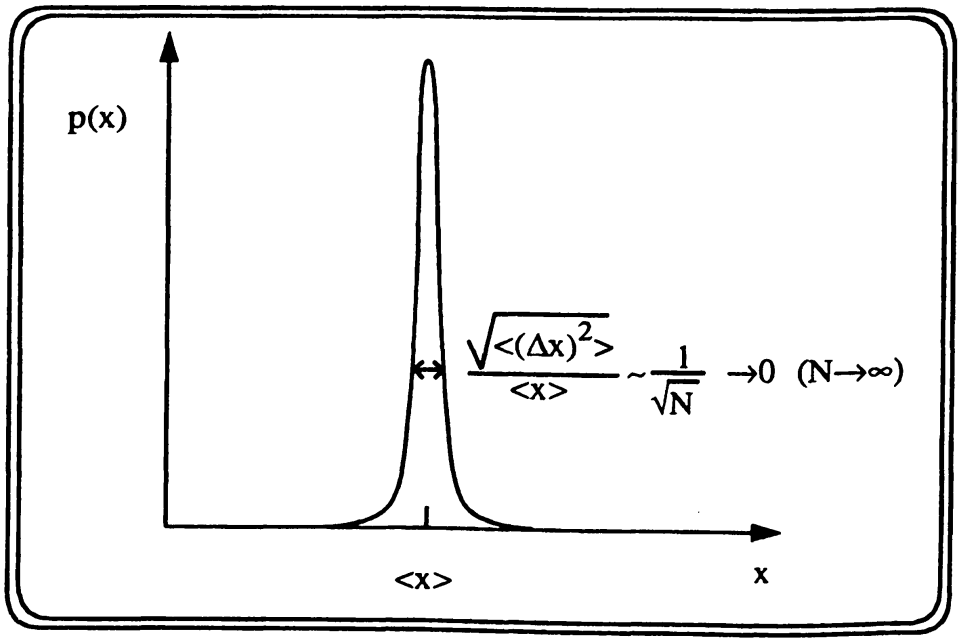
Οι ιδιότητες των μακροσκοπικών συστημάτων που αποτελούνται από τον πολύ μεγάλο αριθμό ($N \approx 10^{24}$) σωματίων περιγράφονται στο γνωστό και ως θερμοδυναμικό όριο

$$N \to \infty \ , \qquad \frac{N}{V} = \text{σταθ.} \quad \text{και} \quad \frac{E}{N} = \text{σταθ.}, \tag{2.2}$$

όπου V και E είναι ο όγκος και η ολική ενέργεια των N-σωματίων, αντίστοιχα. Επομένως, η στατιστική περιγραφή των N σωματίων αποκαθιστά την μακροσκοπική θερμοδυναμική περιγραφή, που βασίζεται απλώς σε αξιώματα και περιέχει εμπειρικές σχέσεις μεταξύ των μακροσκοπικών μετρήσιμων μεγεθών. Μετά την επιλογή του κατάλληλου στατιστικού ensemble που επιτρέπει την εκτίμηση των αντίστοιχων πιθανοτήτων, έπεται ο υπολογισμός των μέσων τιμών

$$\langle x \rangle = \sum_n x_n p_n = \int x\, p(x)\, dx \tag{2.3}$$

και των αντίστοιχων διακυμάνσεων $\langle (\Delta x)^2 \rangle$. Στο όριο (2.2) η σχετική τυπική



Σχ. 2.1. Η κατανομή πιθανοτήτων p(x) είναι πολύ απότομη γύρω από τη μέση τιμή <x> στο θερμοδυναμικό όριο (εξ. 2.2).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

απόκλιση είναι από την εξ. (2.1) ≈ 10^{-12} (ή 10^{-10}%), που αποτελεί μια αμελητέα ποσότητα. Άρα στο θερμοδυναμικό όριο οι μέσες τιμές <x> αντιστοιχούν στις πειραματικές μετρήσιμες τιμές με αμελητέες διακυμάνσεις γύρω από αυτές. (Σχ. 2.1).

Η απότομη κατανομή των πιθανοτήτων στο θερμοδυναμικό όριο ικανοποιείται γιά τις μετρήσιμες μακροσκοπικές ποσότητες (π.χ. την ενέργεια E). Στην συνέχεια θα μελετήσουμε εκτενώς την περίπτωση του τέλειου εξιδανικευμένου αερίου, που αποτελείται από N μόρια κινούμενα ελεύθερα σε συγκεκριμένο χώρο χωρίς αλληλεπιδράσεις. Το σύστημα αυτό, που είναι γνωστό και ως "ιδανικό αέριο", αποτελεί το βασικό πρότυπο της στατιστικής μας μελέτης. Θα πρέπει να αναφερθεί πως τα μόρια εκτελούν σχεδόν ελεύθερη κίνηση (χωρίς συγκρούσεις) με μέσο μήκος ελεύθερης διαδρομής μερικά Å (1Å $=10^{-8}$ cm). Επομένως το κάθε μόριο έχει ουσιαστικά μόνο κινητική ενέργεια και το ιδανικό αέριο υπακούει στην γνωστή καταστατική εξίσωση

$$PV = N k_B T \quad , \qquad (2.4)$$

όπου P είναι η πίεση, V ο διαθέσιμος όγκος και T η θερμοκρασία, ενώ k_B είναι η σταθερά του Boltzmann.

Ο τρόπος που θα αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα είναι να επιλέξουμε πρώτα το κατάλληλο στατιστικό ensemble (συνήθως το κανονικό) με σκοπό να υπολογίσουμε τις κατάλληλες μέσες τιμές, που σύμφωνα με την εξ. (2.1) αντιστοιχούν στις θερμοδυναμικές τιμές. Αρχικά θα επιχειρήσουμε την στατιστική μελέτη ενός μόνο σωματίου και στην συνέχεια τα αποτελέσματα θα γενικευθούν για αυθαίρετα μεγάλο αριθμό από σωμάτια N. Είναι βέβαια αναμενόμενο από τη σχέση (2.1) πως γιά N = 1 είμαστε πολύ μακριά από το θερμοδυναμικό όριο και οι σχετικές διακυμάνσεις για τα διάφορα μεγέθη δεν αναμένεται να είναι σε αυτή την περίπτωση αμελητέες. Έτσι μπορεί να ειπωθεί πως οι μέθοδοι και τα αποτελέσματα αὐτού του κεφαλαίου θέτουν απλώς τις βάσεις (π.χ. προσδιορίζουν τις μονοσωματιακές καταστάσεις που καταλαμβάνουν τα πολλά σωμάτια) για ένα συστηματικό τρόπο μελέτης του συστήματος των N-σωματίων, με χρήση της επαγωγικής μεθόδου αρχίζοντας από το ένα σωμάτιο. Η στατιστική μελέτη των N-σωματίων θα ακολουθήσει στα επόμενα κεφάλαια.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

2.2. Καταμέτρηση των κβαντικών καταστάσεων

Η κβαντική μηχανική μας δίνει κανόνες για τον υπολογισμό πιθανοτήτων σε γεγονότα που αφορούν τον μικρόκοσμο. Είναι κι αυτή μία πιθανοκρατική θεωρία, όχι όμως συνηθισμένη, αφού με δεδομένα δύο γεγονότα "Α" και "Β" το γεγονός "Α και Β" συχνά δεν έχει νόημα. Ο αναγνώστης που γνωρίζει τις βασικές αρχές της κβαντικής μηχανικής θα θυμηθεί πως αυτό αντιστοιχεί στο γεγονός της μη μετάθεσης των τελεστών $\hat{A}$ και $\hat{B}$ που αντιστοιχούν στα μετρήσιμα μεγέθη Α και Β. Η σχέση μετάθεσης $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ έχει ως αποτέλεσμα την αδυναμία για ταυτόχρονη γνώση των δύο μεγεθών Α και Β.

Η κλασσική μηχανική περιορίζεται στην περιγραφή της εξέλιξης στον χώρο των συντεταγμένων θέσης x και ορμής $p = m\dot{x}$ όπου $\dot{x} = dx/dt$, μέσω της επίλυσης των διαφορικών εξισώσεων του Newton (ή του Hamilton) ενώ η κβαντική μηχανική διερευνά τη χρονική εξέλιξη του πλάτους πιθανοτήτας $\psi(x,t)$ που προκύπτει από τη λύση της εξίσωσης του Schrödinger. Το μέτρο του τετράγωνου της κυματοσυνάρτησης $\psi(x,t)$, που είναι $p(x,t) = |\psi(x,t)|^2$, δίνει την πιθανότητα εύρεσης του σωματίου στη θέση x την χρονική στιγμή t. Αν οι μέσες τιμές της θέσης $\langle x \rangle$ και της ορμής $\langle p \rangle$ που αντιστοιχούν στους τελεστές $\hat{\alpha}$ και $\hat{\beta}$ έχουν αντίστοιχες διακυμάνσεις τις $\Delta x \sim \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$ και $\Delta p \sim \sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle}$, τότε από τη σχέση μετάθεσης $[\hat{\alpha}, \hat{\beta}] = i\hbar$ έπεται ότι

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h. \qquad (2.5)$$

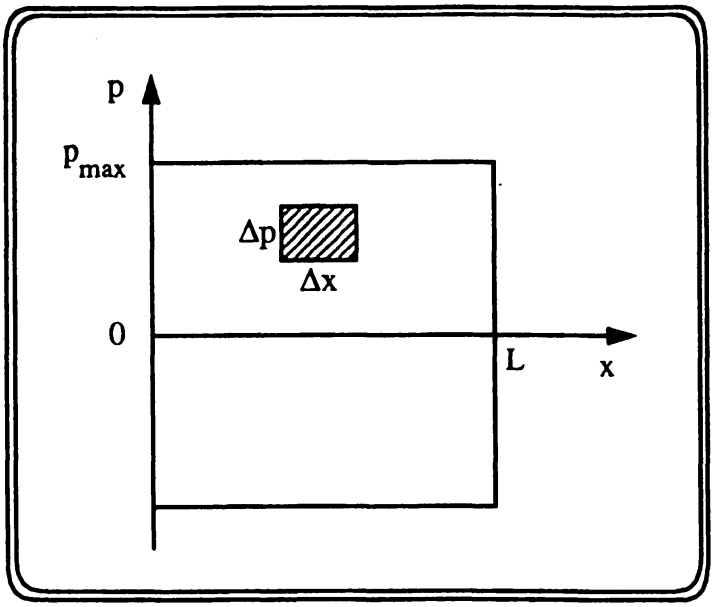
Από την εξ. (2.5), που αποτελεί την αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg, μπορούμε να συμπεράνουμε πως $\Delta x = 0$ με πλήρη καθορισμό της θέσης x, οδηγεί σε άπειρη αβεβαιότητα ($\Delta p = \infty$) στον αντίστοιχο προσδιορισμό της ορμής, και αντιστρόφως.

Ας επιχειρήσουμε τώρα τον απλούστερο δυνατό υπολογισμό που αφορά ένα σωμάτιο μάζας m που κινείται σε μονοδιάστατο "κουτί" (προφανώς σε μια γραμμή στην μία διάσταση) μήκους L. Ο φασικός χώρος είναι διπλάσιας διάστασης, γιατί αποτελείται από την θέση (x) και την ορμή (p) και έχει σχεδιασθεί στο Σχ. 2.2. Επομένως αν μία (μικρο)κατάσταση αντιστοιχεί σε ένα σημείο (x, p) αυτού του χώρου, λαμβάνοντας υπ' όψιν και την αρχή της

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αβεβαιότητας (εξ. 2.5), το καλύτερο που μπορούμε να κάνουμε είναι η εκτίμηση αυτού του σημείου με λάθη Δx και Δp στην θέση στην ορμή και

$$\Delta x \cdot \Delta p = h \quad . \qquad (2.6)$$



Σχ. 2.2. Ο φασικός χώρος (x,p) στην περίπτωση της κίνησης ενός σωματίου σε διάστημα [0, L] με ορμή στο $[-p_{max}, p_{max}]$. Μια (μικρο)κατάσταση αντιστοιχεί σε ένα σημείο αυτού του χώρου, όμως με την εισαγωγή της αρχής της αβεβαιότητας του Heisenberg (εξ. 2.6) αντιστοιχεί στο γραμμοσκιασμένο εμβαδό. Τον ολικό αριθμό καταστάσεων στο διάστημα θέσεων (0, L) με ορμή στο $[-p_{max}, p_{max}]$ μας τον δίνει ο αριθμός που δηλώνει πόσα γραμμοσκιασμένα εμβαδά χρειάζονται για να καλύψουν τον ολικό διαθέσιμο χώρο.

Με τη συνθήκη (2.6) που ανάγει πλέον την κάθε μία κατάσταση στο γραμμοσκιασμένο εμβαδό* του Σχ. 2.2., ίσο με την κβαντική σταθερά h, είναι δυνατόν να εκτιμηθεί ο ολικός αριθμός των καταστάσεων από το μοίρασμα του διαθέσιμου χώρου των φάσεων.

---

* Το γραμμοσκιασμένο "κουτί " με πλευρές Δx και Δp θα μπορούσε να ήταν ένα οποιαδήποτε γεωμετρικό σχήμα με το ίδιο εμβαδό h.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άρα, ο συνολικός αριθμός των κβαντικών καταστάσεων γιά το σωμάτιο που κινείται στο χώρο [0, L] με ορμή στο διάστημα $[-p_{max}, p_{max}]$ καθορίζεται από το πηλίκο του ολικού εμβαδού του φασικού χώρου $2p_{max} \cdot L$ δια το εμβαδόν h, ώστε

$$\textit{αριθμός καταστάσεων} = \frac{L \cdot 2p_{max}}{h} \quad . \tag{2.7}$$

Προφανώς το σωμάτιο του ιδανικού αερίου που περιορίζεται μεταξύ $[-p_{max}, p_{max}]$ στον χώρο των ορμών έχει μόνο κινητική ενέργεια λόγω ταχύτητας (ο διπλασιασμός της ταχύτητας τετραπλασιάζει την ενέργεια) με

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} \quad , \tag{2.8}$$

απ' όπου προκύπτει το άνω όριο της ενέργειας

$$\varepsilon_{max} = \frac{p^2_{max}}{2m} \quad . \tag{2.9}$$

Επομένως το ερώτημα σχετικά με τον αριθμό καταστάσεων μπορεί να τεθεί ως εξής: "ποιός είναι ο αριθμός των καταστάσεων για ένα σωμάτιο που περιορίζεται στο διάστημα [0, L] με $\varepsilon \le \varepsilon_{max}$;"

Η απάντηση στο παραπάνω ερώτημα δίνεται με τον απολύτως καθορισμένο αριθμό $N(\varepsilon_{max})$ και οδηγούμεθα στο παράδοξο των κβαντικών (διακριτών) τιμών της ενέργειας που δεν συμβαδίζει με την κλασσική λογική περί του συνεχούς. Από την εξ. (2.7) και την εξ. (2.9) για $\varepsilon_{max} = \varepsilon$ προκύπτει το αποτέλεσμα

$$\boxed{N(\varepsilon) = 2L \frac{(2m\,\varepsilon)^{1/2}}{h}} \quad , \quad \text{για } d = 1 \, , \tag{2.10}$$

που εκφράζει τον αριθμό καταστάσεων γιά κίνηση του σωματίου στην μια διάσταση (d = 1) στο διάστημα [0, L] και με ενέργεια μέχρι μια μέγιστη τιμή ε.

Ο παραπάνω υπολογισμός εύκολα γενικεύεται στην περίπτωση τριών (d = 3) διαστάσεων. Ένα "τίμιο" σωμάτιο σε χώρο όγκου $V = L^3$ θα κινείται σε έναν 6-διάστατο (με 3 θέσεις και 3 ορμές) φασικό χώρο. Ο αντίστοιχος αριθμός καταστάσεων προκύπτει από το μοίρασμα του αντίστοιχου 6-διάστατου χώρου με όγκο θέσεων (είναι ο όγκος V)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\int_V d^3\vec{x} = \int\int\int dx\, dy\, dz = V \qquad (2.11)$$

και ορμών (είναι ο όγκος σφαίρας με ακτίνα p)

$$\int d^3\vec{p} = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{p_{max}} p^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dp = 4\pi \frac{p_{max}^3}{3} \quad . \qquad (2.12)$$

Επομένως ο αριθμός των κβαντικών καταστάσεων για το σωμάτιο που κινείται στον όγκο V με μέτρο της ορμής μέχρι την τιμή $p_{max} = p$ είναι

$$\textit{αριθμός καταστάσεων} = \frac{1}{h^3}\, V\, (\frac{4}{3}\pi\, p^3) \ , \qquad (2.13)$$

αφού η κάθε κβαντική κατάσταση αντιστοιχεί στον στοιχειώδη όγκο h^3. Με την αντικατάσταση του μέτρου της ορμής από την ενέργεια (εξ.2.9) προκύπτει ο ολικός αριθμός των κβαντικών καταστάσεων, ώστε το σωμάτιο στο "κουτί" όγκου V να έχει ενέργεια μικρότερη της ε

$$\boxed{N(\varepsilon) = \frac{1}{h^3}\, V\, \frac{4}{3}\pi\, (2\, m\, \varepsilon)^{3/2}} \ , \ \text{για } d = 3 \ . \qquad (2.14)$$

Ερώτηση1: Να δειχθεί ότι ο αριθμός των κβαντικών καταστάσεων με ενέργεια μικρότερη της ε στις δύο διαστάσεις είναι

$$\boxed{N(\varepsilon) = \frac{1}{h^2}\, A\, \pi\, (2\, m\, \varepsilon)} \ , \text{για } d = 2 \ , \qquad (2.15)$$

όπου Α είναι το εμβαδόν της διδιάστατης επιφάνειας που κινείται το σωμάτιο.

Από τα παραπάνω μπορούμε να συμπεράνουμε πως ο στοιχειώδης αριθμός κβαντικών καταστάσεων dN, για σωμάτιο σε αυθαίρετη διάσταση του χώρου d, δίνεται από τον στοιχειώδη όγκο του φυσικού χώρου $d\Gamma$ διαιρεμένο με τον όγκο φασικού χώρου h^d που καταλαμβάνει η μια κατάσταση. Επομένως,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\boxed{dN = \frac{d\Gamma}{h^d} = \frac{d^d\vec{x}\cdot d^d\vec{p}}{h^d}} \quad , \quad \text{όπου } d \text{ η διάσταση χώρου.} \qquad (2.16)$$

Ερώτηση 2: Να δείξετε πως ο στοιχειώδης αριθμός καταστάσεων είναι

$$dN = \frac{dx\cdot dp}{h} \quad , \qquad \text{για } d=1 \qquad (2.17)$$

και

$$dN = \frac{d^3\vec{x}\cdot d^3\vec{p}}{h^3} \quad , \qquad \text{για } d=3 \ , \qquad (2.18)$$

αντιστοίχως.

Πριν προχωρήσουμε ας σταθούμε μια στιγμή για να θέσουμε ένα βασικό ερώτημα: "γιατί μετράμε καταστάσεις;" Η απάντηση, βέβαια, είναι εύκολη και δίνεται από τον βασικό τύπο της στατιστικής φυσικής που συνδέει την εντροπία S με τον λογάριθμο του αριθμού των καταστάσεων g,

$$S = k_B \ln g \ , \quad k_B = \text{σταθ. Boltzmann,} \qquad (2.19)$$

που διατύπωσε ο πατέρας της στατιστικής Boltzmann*. Επομένως με τον λογάριθμο που εκτιμά τον αριθμό των ψηφίων ενός αριθμού επιτυγχάνεται ο υπολογισμός της εντροπίας, που δηλώνει το ποσό της αταξίας που εμπεριέχει ένα σύστημα. Η σπουδαιότητα της ατομικής μικροσκοπικής στατιστικής περιγραφής του Boltzmann (1900), σε μια εποχή που οι μηχανές εσωτερικής καύσεως και η θερμοδυναμική ήταν στο απώγειό τους, ανάγει την στατιστική φυσική σε μια πραγματική "επανάσταση" στο χώρο της φυσικής. Διαφέρει ριζικά από τις παρόμοιες "επαναστάσεις" της σχετικιστικής φυσικής και της κβαντικής μηχανικής, που κατέστρεψαν πρώτα κάτι άλλο (π.χ. την κλασσική μηχανική). Αυτό δεν συνέβη με την στατιστική φυσική και μαζί με την

---

* Ο Boltzmann αγνοήθηκε και μισήθηκε υπόκωφα από το καταστημένο της εποχής του. Η θεμελίωση της στατιστικής φυσικής από τον Boltzmann έγινε σε μια εποχή που η κβαντική μηχανική δεν υπήρχε, αλλά ούτε καν η ατομική υπόθεση ήταν αποδεκτή!

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ευρύτητα των εφαρμογών της στην περιγραφή του φυσικού κόσμου την καθιστά επιστήμη ακόμη μεγαλύτερης σπουδαιότητας.

Ας σταθούμε όμως σε ένα ακόμη ερώτημα. Αφορά την εφαρμογή του τύπου (2.16) για τον στοιχειώδη όγκο του φασικού χώρου σε μια αυθαίρετη διάσταση του πραγματικού χώρου d. Ας θεωρήσουμε ένα υπερκυβικό σύστημα πλευράς L. Ο όγκος του φασικού χώρου που αναλογεί στις θέσεις είναι προφανώς L^d. Ποιος είναι όμως ο όγκος της d-διάστατης σφαίρας ακτίνας $p = \sqrt{2m\varepsilon}$; Γι' αυτήν την περίπτωση θα χρησιμοποιήσουμε τον μαθηματικό τύπο (ναι, υπάρχει!)

$$V_d = \frac{\pi^{d/2} R^d}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)} \quad , \tag{2.19}$$

που δίνει τον όγκο σφαίρας με ακτίνα R στις d-διαστάσεις. Ο αριθμός $\Gamma(\frac{d}{2}+1)$ δίνεται από τον ορισμό της συνάρτησης Γ (ΠΑΡΑΡΤ. Α)

$$\Gamma(\frac{d}{2}+1) = \frac{d}{2}\,\Gamma(\frac{d}{2}), \qquad \Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}\,. \tag{2.20}$$

Άρα, ο αριθμός των κβαντικών καταστάσεων σωματίου που κινείται στον d-διάστατο χώρο L^d με ενέργεια μικρότερη της ε ευρίσκεται ολοκληρώνοντας την εξ. (2.16). Συνοψίζεται στη σχέση

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{h^d}\, L^d\, \frac{\pi^{d/2}\,(2m\varepsilon)^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)} \quad , \text{ για } d\,. \tag{2.21}$$

Αν γράψουμε την (2.21) με χρήση, αντί του h, του $\hbar$ (= h/ 2π) και με βάση την (2.20) έχουμε τον πλέον εύχρηστο τύπο

$$\boxed{N(\varepsilon) = \frac{2\,L^d}{d\,\Gamma(\frac{d}{2})} \cdot \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{d/2} \varepsilon^{d/2}} \quad . \tag{2.22}$$

Η σχέση (2.22) ισχύει για κάθε ακέραια διάσταση του χώρου d και δηλώνει τον αριθμό των καταστάσεων με ενέργεια μικρότερη της ε, που είναι ανάλογος της ενέργειας ε υψωμένης στην δύναμη d/2.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

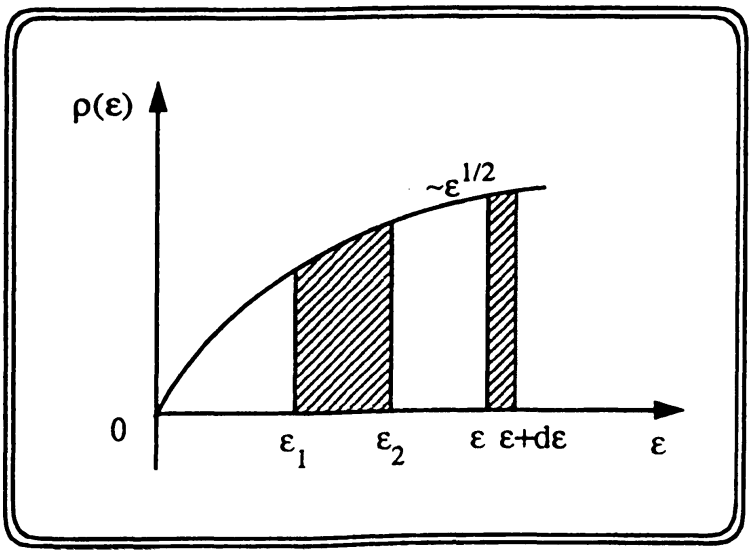
2.3. Πυκνότητα καταστάσεων ρ(ε)

Στο κεφ. 2.2. με χρήση των ιδεών του Planck (1906) είδαμε πως ο φυσικός χώρος που για d = 3 είναι 6-διάστατος (x, y, z, p_x, p_y, p_z), περιγράφεται από τον στοιχειώδη όγκο $d\Gamma = d^3\vec{x}\, d^3\vec{p}$, ενώ ο στοιχειώδης αριθμός κβαντικών καταστάσεων δίνεται από το λόγο $d\Gamma/h^3$. Επομένως, ισχύει η αντιστοιχία

αριθμός καταστάσεων στην κβαντική μηχανική ⇔
όγκος φασικού χώρου στην κλασσική μηχανική

(2.23)

Έτσι μπαίνουμε έμμεσα στον μαγικό, μη ρεαλιστικό, κόσμο της κβαντικής μηχανικής, όπου η καθημερινή λογική δεν ισχύει. Βασιζόμενοι πλέον στην περίεργη κβαντική λογική, παίζοντας με τις λίγες σταθερές που δίνονται από τα σύμβολα h , π , κ.λ.π., μπορούμε να περιγράψουμε τον φυσικό κόσμο. Αν αυτό το "παιγνίδι" δημιουργεί ενθουσιασμό σε μερικούς, δεν αποκλείεται να απωθεί και ορισμένους άλλους. Πρέπει, όμως, να προχωρήσουμε ...



Σχ.2.3. Η πυκνότητα καταστάσεων ελεύθερου σωματίου στις τρεις διαστάσεις (d = 3) από την εξ. (2.28). Τα γραμμοσκιασμένα εμβαδά δίνουν τον στοιχειώδη αριθμό καταστάσεων ρ(ε) dε (εξ. 2.24). και τον αριθμό καταστάσεων $N(\varepsilon_2) - N(\varepsilon_1)$ (εξ. 2.26).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Αφού γνωρίζουμε ότι ο ολικός αριθμός καταστάσεων από ενέργεια μηδέν μέχρι την τιμή της ενέργειας ε δίνεται από τον $N(\varepsilon)$ ο στοιχειώδης αριθμός καταστάσεων με ενέργεια στο στοιχειώδες (απειροστικό) διάστημα $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$ θα είναι:

$$\textit{αριθμός καταστάσεων στο } [\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon] = dN(\varepsilon) = \rho(\varepsilon)\, d\varepsilon, \qquad (2.24)$$

απ' όπου προκύπτει η σχέση

$$\boxed{\rho(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}} \ . \qquad (2.25)$$

Με την εξ. (2.25) η πυκνότητα καταστάσεων $\rho(\varepsilon)$ ορίζεται ως ο αριθμός των καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας. Ο αριθμός των καταστάσεων στο (πεπερασμένο) ενεργειακό διάστημα $[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$ δίνεται από το ορισμένο ολοκλήρωμα (Σχ. 2.3)

$$N(\varepsilon_2) - N(\varepsilon_1) = \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \rho(\varepsilon)\ d\varepsilon \quad . \qquad (2.26)$$

Για σωμάτιο που κινείται στον d-διάστατο χώρο των θέσεων παραγωγίζοντας την εξ. (2.22) προκύπτει ο γενικός τύπος γιά την πυκνότητα καταστάσεων

$$\boxed{\rho(\varepsilon) = \frac{L^d}{\Gamma(\frac{d}{2})} \cdot \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{d/2} \varepsilon^{(d-2)/2}} \ , \qquad \forall\, d\,. \qquad (2.27)$$

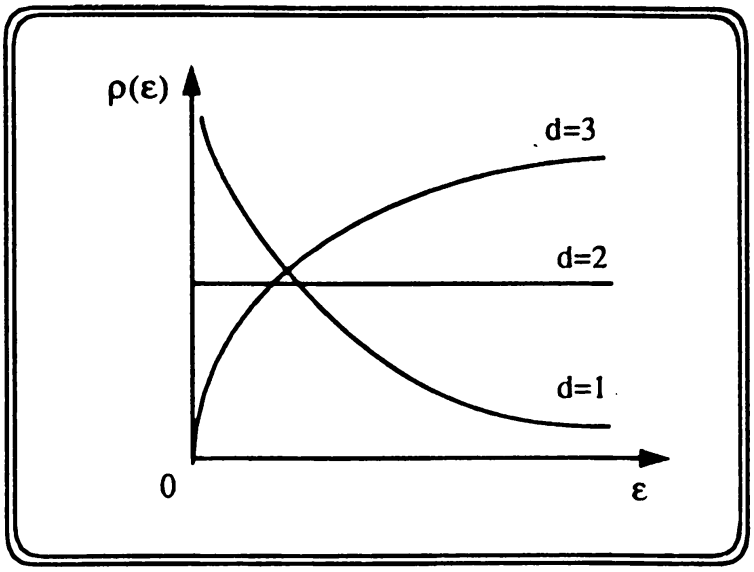
Άσκηση 1: Να δείξετε πως στον συνήθη 3-διάστατο χώρο ισχύει

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{2V}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}, \quad \text{για } d = 3, \qquad (2.28)$$

είτε με αντικατάσταση του $d = 3$ στην εξ. (2.27), είτε με κατευθείαν παραγώγιση της εξ. (2.14), που δίνει τον ολικό αριθμό καταστάσεων με ενέργεια μικρότερη της ε στον 3-διάστατο χώρο και γράφεται ως

$$N(\varepsilon) = \frac{4V}{3\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{3/2} \quad \text{για } d=3. \qquad (2.29)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 2.4. Οι πυκνότητες μονοσωματιακών καταστάσεων ρ(ε), με αυθαίρετες μονάδες, σε d = 1, 2 και 3.

2.4. Συνάρτηση επιμερισμού z - κβαντικός όγκος V_Q

Η συνάρτηση επιμερισμού του ενός σωματίου z (δηλώνεται με μικρό γράμμα όταν αφορά ένα σωμάτιο) υπολογίζεται στην κανονική κατανομή (κανονικό ensemble), όπως είδαμε στο Κεφ.1.3, από το άθροισμα όλων των εκθετικών παραγόντων Boltzmann σε όλες τις (μονοσωματιακές στην περίπτωσή μας) καταστάσεις που τις ονομάζουμε |r> ενέργειας ε_r (με μικρό ε), σύμφωνα με τον τύπο

$$z = \sum_r e^{-\beta\varepsilon_r} \quad , \qquad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad . \tag{2.30}$$

Η ύπαρξη όμως εκφυλισμένων καταστάσεων είναι άλλο ένα χαρακτηριστικό της κβαντικής μηχανικής. Ο εκφυλισμός σημαίνει ότι περισσότερες από μια καταστάσεις |r> έχουν την ίδια ενέργεια ε_r και δηλώνει την ύπαρξη κάποιας συμμετρίας στο σύστημά μας. Ο εκφυλισμός παύει να υπάρχει (αίρεται) με την μείωση της συμμετρίας. (Δείτε και το ΠΑΡΑΡΤ. Β στην ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι).

Το άθροισμα στις καταστάσεις |r> μπορεί να αντικατασταθεί με άθροισμα ως προς τις ενέργειες ε_r, αλλά σε αυτή την περίπτωση στο άθροισμα θα πρέπει να πολλαπλασιάσουμε τον κάθε παράγοντα Boltzmann επί τον εκφυλισμό της

ενέργειας στην οποία αντιστοιχεί. Θεωρώντας ότι η πυκνότητα καταστάσεων ρ(ε) είναι, κατά την ευρεία έννοια, ένα είδος εκφυλισμού της ενεργειακής στάθμης ε, με την προϋπόθεση ότι το ενεργειακό φάσμα είναι πυκνό, το άθροισμα γίνεται ολοκλήρωμα

$$\sum_{r} \rightarrow \int d\varepsilon\, \rho(\varepsilon) \quad , \tag{2.31}$$

με το ρ(ε) dε να δηλώνει τον συνολικό αριθμό των καταστάσεων στο στοιχειώδες διάστημα [ε, ε + dε]. Με την ύπαρξη της πυκνότητας καταστάσεων ρ(ε) το άθροισμα σε όλες τις καταστάσεις μετατρέπεται σε ολοκλήρωμα σε όλες τις ενέργειες

$$z = \sum_{r} e^{-\beta\varepsilon_r} \rightarrow \sum_{\varepsilon=0}^{\infty} \rho(\varepsilon)\, e^{-\beta\varepsilon} \rightarrow \int_{0}^{\infty} d\varepsilon\, \rho(\varepsilon)\, e^{-\beta\varepsilon} \quad . \tag{2.32}$$

Στο Κεφ. 2.5 θα διερευνηθεί περαιτέρω κάτω από ποιές προϋποθέσεις είναι εφικτή η αντικατάσταση του αθροίσματος από το ολοκλήρωμα. Είναι φυσικό πως απαραίτητη προϋπόθεση για κάτι τέτοιο είναι οι καταστάσεις να είναι πολύ κοντά η μια στην άλλη και επομένως το ενεργειακό φάσμα πυκνό (οιονεί-συνεχές).

Ο υπολογισμός της z από την (2.32) με χρήση της πυκνότητας ρ(ε) (εξ. 2.27) γιά τον d-διάστατο χώρο, εν γένει, είναι

$$z = \frac{L^d}{\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{d/2} \int_{0}^{\infty} d\varepsilon\, \varepsilon^{(d-2)/2}\, e^{-\beta\varepsilon} \quad . \tag{2.33}$$

Από την εξ. (2.33) με την αντικατάσταση

$$\beta\,\varepsilon = x, \qquad \beta\, d\varepsilon = dx \,, \tag{2.34}$$

το ολοκλήρωμα γίνεται (ΠΑΡΑΡΤ. Α)

$$\frac{1}{\beta^{d/2}} \int_{0}^{\infty} dx\; x^{d/2-1}\, e^{-x} = \frac{1}{\beta^{d/2}}\, \Gamma(\frac{d}{2}) \quad . \tag{2.35}$$

Άρα,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$z = \frac{L^d}{\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{d/2} \frac{1}{\beta^{d/2}} \Gamma(\frac{d}{2})$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{z = L^d \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{d/2}} \quad , \quad \text{για } \forall\, d\,, \tag{2.36}$$

που για d=3 ($V = L^d$) δίνει

$$\boxed{z = V \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}} \quad , \text{για } d = 3 \quad . \tag{2.37}$$

Άσκηση1: Να δείξετε πως ο αριθμός των καταστάσεων στο ενεργειακό διάστημα $[0, k_BT]$ είναι

$$N(k_BT) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}}\, z \quad , \quad \text{για } d = 3. \tag{2.38}$$

Επομένως εκτός από την, συγκριτικά αμελητέα, σταθερά ($\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \approx 0.75$) η συνάρτηση επιμερισμού z (είναι ένας αριθμός) μετράει τον αριθμό καταστάσεων $N(k_BT)$ ενέργειας μέχρι k_BT.

Άσκηση 2: Από την εξ. (2.37) για την z και τις σχέσεις (1.10) και (1.11)

$$\langle\varepsilon\rangle = -\frac{\partial \ln z}{\partial\beta} \;,\; \langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle = -\frac{\partial\langle\varepsilon\rangle}{\partial\beta} \quad , \tag{2.39}$$

να δείξετε ότι για ένα σωμάτιο ιδανικού αερίου στον d-διάστατο χώρο ισχύει

$$\langle\varepsilon\rangle = d \cdot \left(\frac{k_BT}{2}\right), \quad \langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle = d \cdot \frac{(k_BT)^2}{2} \quad , \tag{2.40}$$

ενώ η σχετική τυπική απόκλιση είναι

$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle}}{\langle\varepsilon\rangle} = \sqrt{\frac{2}{d}} \quad , \text{ στις d-διαστάσεις.} \tag{2.41}$$

Παρατηρούμε πως η σχετική τυπική απόκλιση τείνει στο μηδέν μόνο όταν η διάσταση $d \to \infty$. Το αποτέλεσμα της εξ. (2.41) για $d = 3$ είναι $\sqrt{2/3} \approx 0.816$ και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

δεν είναι βέβαια αμελητέο, επειδή προσπαθούμε να μιλήσουμε για στατιστική ενός σωματίου στον τρισδιάστατο χώρο(η συνθήκη (2.1) δεν ισχύει).

Είδαμε στα κεφάλαια που προηγήθηκαν, όταν ένα σωμάτιο ιδανικού αερίου μάζας m κινείται χωρίς αλληλεπιδράσεις μόνο η κινητική του ενέργεια $\varepsilon = p^2/2m$ υπεισέρχεται στους αντίστοιχους υπολογισμούς. Ο υπολογισμός της z αποτελεί το πιο βασικό αποτέλεσμα για την στατιστική του ενός σωματίου (εξ. 2.37), στο οποίο θα επιμείνουμε γράφοντάς το (γιά d = 3) και ως

$$z = V\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = \frac{V}{V_Q}\ , \tag{2.42}$$

όπου (γιά να είναι η z ένας αριθμός) η V_Q έχει διαστάσεις όγκου. Η ποσότητα

$$V_Q = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{3/2} = \lambda^3 \tag{2.43}$$

με διαστάσεις όγκου ονομάζεται "κβαντικός όγκος" του σωματίου, ενώ λ είναι το "θερμικό μέσο μήκος κύματος σωματίου" με ενέργεια k_BT. Από τον ορισμό του κβαντικού μήκους κύματος De Broglie σωματίου με ενέργεια k_BT και ορμή $\sqrt{2mk_BT}$

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mk_BT}} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{1/2}\pi^{1/2} \tag{2.44}$$

προκύπτει πως

$$\lambda = \frac{\lambda_{DB}}{\pi^{1/2}}\ . \tag{2.45}$$

Αν κάνουμε χρήση των σταθερών $h = 6.6 \times 10^{-27}$erg sec, $k_B = 1.4 \times 10^{-16}$ erg K^{-1} με $N_A = 6 \times 10^{23}$ τον αριθμό του Avogadro και M το μοριακό βάρος ($M = N_A \cdot m$, επειδή σε ποσότητα ίση με το μοριακό βάρος περιέχονται N_A μόρια), οδηγούμεθα στην πιό άμεση σχέση γιά τον κβαντικό όγκο

$$V_Q = \lambda^3 = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{k_B/N_A}\right)^{3/2}\ \frac{1}{(MT)^{3/2}}\ , \tag{2.46}$$

που μετά την αντικατάσταση των σταθερών εκφράζεται και με τον πλέον εύχρηστο τύπο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\boxed{V_Q = \frac{5.321 \times 10^{-21}}{(MT)^{3/2}}} \quad \text{σε } cm^3, \qquad (2.47)$$

που ενσωματώνει για την ευκολία μας όλες τις απαραίτητες σταθερές. Επιπλέον, το ιδανικό αέριο ορίζεται ως το αέριο μη αλληλεπιδρώντων σωματίων στο κλασσικό όριο $z >> 1$.

Άσκηση 3: Να υπολογίσετε τη συνάρτηση επιμερισμού z ενός σωματίου ^4He σε όγκο $V = 1\ cm^3$ και θερμοκρασία $T = 100K$.

Λύση: Το μοριακό βάρος είναι $M = 4$ και με αντικατάσταση στην (2.47) προκύπτει $z \approx 1.5 \times 10^{24}$ ενώ ο αριθμός καταστάσεων στο διάστημα $[0, k_BT]$ είναι $N(k_BT) \approx 1.13 \times 10^{24}$.

Άσκηση 4: Να γράψετε τη σχέση (2.43) για τον κβαντικό όγκο V_Q σε αυθαίρετη διάσταση του χώρου d. Να εφαρμόσετε το αποτέλεσμα για $d = 1$ (μήκος) και για $d = 2$ (επιφάνεια).

2.5 Ακριβής επίλυση του προβλήματος ελεύθερου σωματίου σε "κουτί"

Μετά την καταμέτρηση των κβαντικών καταστάσεων θα προχωρήσουμε και στον ακριβή υπολογισμό τους. Αυτό προϋποθέτει την ακριβή επίλυση του κβαντικού προβλήματος "ενός ελεύθερου σωματίου σε κουτί", που έχει προηγηθεί στην ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι. Οι κβαντομηχανικοί τελεστές έχουν ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις, έτσι ώστε όταν ένας τελεστής δράσει επί μιας ιδιοσυνάρτησης το αποτέλεσμα είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή πολλαπλασιασμένη επί την ιδιοσυνάρτηση. Θα επιχειρήσουμε εδώ μια επανάληψη του βασικού προβλήματος εύρεσης των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του Χαμιλτονιανού τελεστή, που αφορά ένα σωμάτιο ιδανικού αερίου κινούμενο ελεύθερα (με δυναμικό μηδέν) σε χώρο όγκου V (όταν $d = 3$) εντός ενός απειρόβαθου

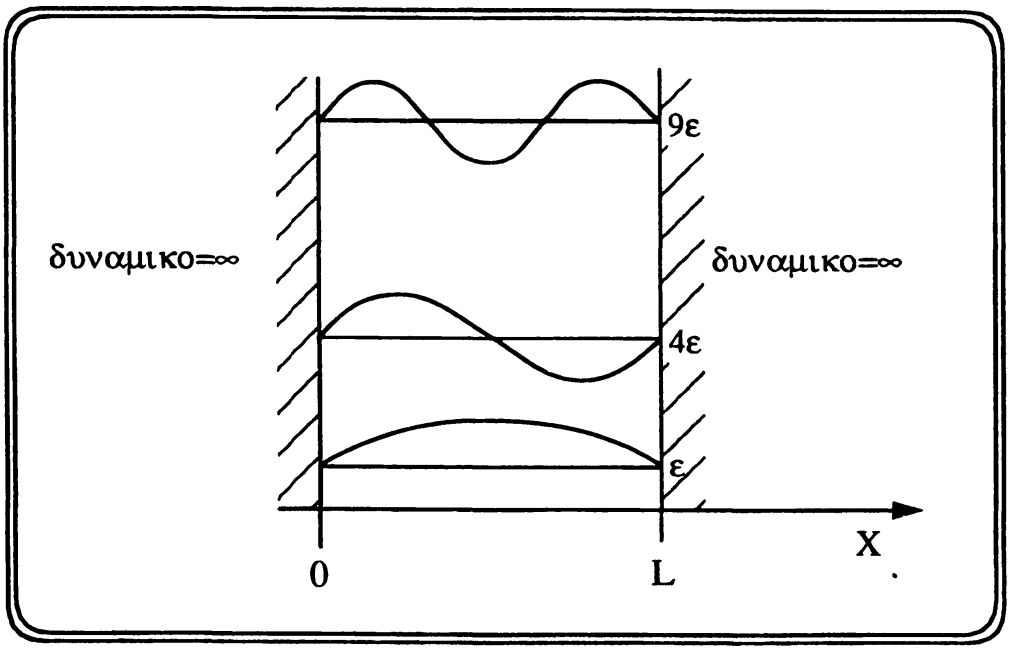
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

πηγαδιού δυναμικού (Σχ. 2.5). Στους υπολογισμούς μας θα αγνοήσουμε το σπιν και την δομή του σωματίου.

Η Χαμιλτονιανή Η που επεισέρχεται στη στατική εξίσωση του Schrödinger

$$\hat{H}\,\phi = \varepsilon\,\phi \qquad (2.48)$$

είναι η $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$ και με την αντικατάσταση $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$, $\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$, έχουμε την διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης



Σχ. 2.5. Το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού και οι αντίστοιχες ιδιολύσεις (στάσιμα κύματα) ελεύθερου σωματίου στη μια διάσταση (εξ. 2.54). Το σωμάτιο κινείται με δυναμικό μηδέν στο διάστημα [0, L] ενώ το δυναμικό είναι άπειρο εκτός αυτών των ορίων.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\phi(x,y,z) = \varepsilon\,\phi(x,y,z) \quad . \qquad (2.49)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Οι ιδιοτιμές ε του Χαμιλτονιανού τελεστή $\hat{H}$ είναι οι ενέργειες του συστήματος και αποτελούν ένα συνεχές ή διακριτό φάσμα. Με την απαίτηση των οριακών συνθηκών, που προκύπτουν φυσιολογικά στην κβαντική μηχανική εφ' όσον το σωμάτιο περιορίζεται σε κάποιον χώρο (π.χ. στον [0, L]), το ενεργειακό φάσμα γίνεται διακριτό. Από τις λύσεις της εξ. (2.49), επειδή το διάστημα μεταξύ δύο διαδοχικών ενεργειακών ιδιοτιμών είναι αντιστρόφως ανάλογο του τετραγώνου του L, στο όριο του μεγάλου L το ενεργειακό φάσμα γίνεται συνεχές. Διακριτό φάσμα έχουμε μόνο για πεπερασμένα συστήματα. Πρέπει εδώ να αναφερθεί πως στην κλασσική μηχανική ακόμη και ένα πεπερασμένο σύστημα έχει συνεχές φάσμα, Αυτό διαφέρει ριζικά με ό,τι συμβαίνει στην κβαντική μηχανική.

Άσκηση1: Να ευρεθούν οι ιδιολύσεις της εξ. (2.49) στη μία διάσταση (d = 1), όταν το σωμάτιο κινείται στο διάστημα [0, L], όπου η εξίσωση του Schrödinger γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\phi(x) = \varepsilon\,\phi(x)$$

$$\Leftrightarrow \quad \phi(x)'' + k^2\,\phi(x) = 0\ ,\ k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\ . \tag{2.50}$$

Λύση:

Από την εξ. (2.50) γράφεται η γενική λύση

$$\phi(x) = A\sin(kx) + B\cos(ky) \tag{2.51}$$

που ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες "σκληρού τοίχου"

$$\phi(0) = \phi(L) = 0\ . \tag{2.52}$$

Επομένως από τις εξ. (2.51) και (2.52)

$$\phi(0) = B = 0 \Rightarrow B = 0\ , \tag{2.53}$$

$$\phi(L) = A\sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = n\pi, \qquad n = 1, 2, \ldots \Rightarrow k = \frac{n\pi}{L}\ . \tag{2.54}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Έτσι οδηγούμεθα στην λύση των στάσιμων κυμάτων με ενέργειες (ιδιοτιμές) τις ε_n και τροχιακά (ιδιοσυναρτήσεις) $\phi_n(x)$:

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon_n &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\cdot n^2 \\ \phi_n(x) &= A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \end{aligned}\right\} \quad . \tag{2.55}$$

Η σταθερά $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$ προκύπτει από τη συνθήκη κανονικοποίησης $\int_0^L |\phi_n(x)|^2\, dx$ =1. Οι ιδιολύσεις της Η για n = 1, 2, 3 φαίνονται στο Σχ. 2.5.

Η εξ. (2.49) για d = 3 λύνεται επίσης εύκολα (με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών) και τα αποτελέσματα για τις ενέργειες και τα μοριακά τροχιακά (καταστάσεις) είναι

$$\varepsilon_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\,(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{2.56}$$

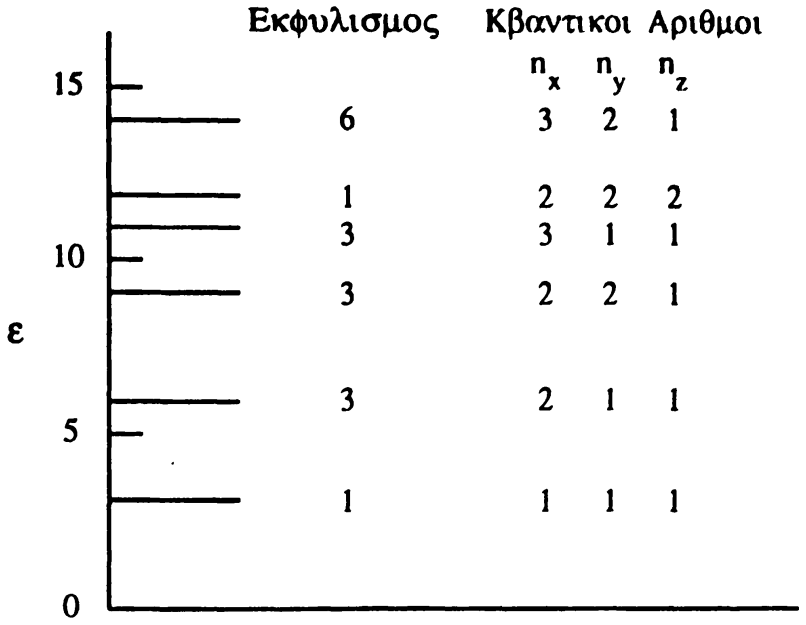
$$\phi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{n_z\pi z}{L}\right), \tag{2.57}$$

με $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots$

Είναι ενδιαφέρον ότι στην περίπτωση αυτή υπάρχουν πολλοί δυνατοί τρόποι με τους οποίους το άθροισμα τετραγώνων τριών ακεραίων $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ δίνει το ίδιο αποτέλεσμα(Σχ. 2.6). Από αυτήν την διαπίστωση προκύπτει πως ο εκφυλισμός είναι μεγάλος, π.χ. ο εκφυλισμός της πρώτης διηγερμένης στάθμης είναι 3 αφού $\varepsilon_{211} = \varepsilon_{121} = \varepsilon_{112}$.

Με τη γνώση των ακριβών ενεργειακών τιμών από την (2.56) επανερχόμαστε τώρα στη βασική υπόθεση περί αρκετά πυκνού (οιονεί-συνεχούς) φάσματος (εξ. 2.31), που μας επέτρεψε να αντικαταστήσουμε το άθροισμα ως προς όλες τις καταστάσεις με ένα ολοκλήρωμα που περιέχει την πυκνότητα των καταστάσεων ρ(ε). Προκειμένου να ελέγξουμε αυτήν την υπόθεση αρκεί να εξετάσουμε δύο διαδοχικούς όρους στο ενεργειακό φάσμα και για ευκολία αυτό θα το κάνουμε στην μονοδιάστατη περίπτωση (εξ. 2.55), όπου είναι εμφανής και η απουσία εκφυλισμού (όπως συνήθως συμβαίνει σε μονοδιάστατα προβλήματα αφού η συμμετρία είναι περιορισμένη). Η

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 2.6. Οι χαμηλότερες ενέργειες (ιδιοτιμές) ελεύθερου σωματίου σε "κουτί" όγκου V σε μονάδες $\frac{\hbar^2\pi^2}{2mV^{2/3}}$ (εξ. 2.56), οι εκφυλισμοί τους και οι κβαντικοί αριθμοί n_x, n_y και n_z.

ενεργειακή διαφορά ενεργειακή διαφορά δύο γειτονικών καταστάσεων είναι

$$\Delta_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n+1)^2 - \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(2n+1)\,,\ n = 1, 2, \ldots \quad (2.58)$$

Επειδή στον υπολογισμό της συνάρτησης επιμερισμού z υπεισέρχεται το γινόμενο $\beta\varepsilon_n = \varepsilon_n / k_B T$, είναι λογικό η ενεργειακή διαφορά Δ_n να εκτιμηθεί σε σχέση με το γινόμενο $k_B T$. Προφανώς η προσέγγιση του πυκνού φάσματος, που επιτρέπει την μετατροπή του αθροίσματος σε ολοκλήρωμα μέσω της εξ. (2.31), ικανοποιείται μόνον όταν

$$k_B T >> \Delta_n\,. \quad (2.59)$$

Για σωμάτιο σε όγκο $V = L^3$ η βασική ποσότητα που υπεισέρχεται στην αντίστοιχη ενέργεια (εξ. 2.56) είναι η $\frac{\hbar^2\pi^2}{2mV^{2/3}}$ που μπορεί να αντιστοιχηθεί και στο γινόμενο $k_B\Theta_\mu$, με $\Theta_\mu = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mV^{2/3}k_B}$. Η εισαγωγή της χαρακτηριστικής θερμοκρασίας Θ_μ (λόγω της μεταφορικής κίνησης του σωματίου που είναι ελεύθερο, άρα έχει μόνο κινητική ενέργεια) έγινε για διευκόλυνσή μας. Επομένως, η απαραίτητη συνθήκη τώρα γίνεται $T >> \Theta_\mu$. Με αντικατάσταση των σταθερών προκύπτει πως γιά σωμάτια σε "κουτί" μακροσκοπικών

διαστάσεων (Π.1) η Θ_μ είναι πάντα πολύ μικρή, μικρότερη από κάθε φυσικά επιτεύξιμη θερμοκρασία T (π.χ. ακόμη και γιά 1mK $=10^{-3}$K) η εξ. (2.59) ή T >> Θ_μ ικανοποιούνται. Επειδή ο εκφυλισμός αυξάνει στις υψηλότερες ενεργειακές στάθμες (υψηλές τιμές των n_x, n_y , n_z) θα μπορούσαμε να συμπεράνουμε πως η εξ. 2.59 ικανοποιείται δυσκολώτερα. Όμως εκεί αντιστοιχεί μεγαλύτερος αριθμός καταστάσεων λόγω εκφυλισμού με αποτέλεσμα, τελικά, να ικανοποιείται ακόμη ευκολώτερα η συνθήκη του πυκνού φάσματος. Σαν συμπέρασμα, από το γεγονός της μικρής τιμής της Θ_μ, προκύπτει πως για μακροσκοπικό όγκο V κάθε φυσικά πραγματοποιήσιμη χαμηλή θερμοκρασία αποτελεί στην ουσία μια οριακή περίπτωση υψηλής θερμοκρασίας και το άθροισμα μετατρέπεται ασφαλώς (δηλ. με αμελητέο σφάλμα) σε ολοκλήρωμα.

Παράδειγμα 1: Για ένα σωμάτιο μάζας m = 10^{-22} gr σε μακροσκοπικό "κουτί" όγκου V = 10^6 cm^3 και θερμοκρασία δωματίου T = 300K υπολογίζεται ότι

$$k_B\Theta_\mu \approx 10^{-34} \text{ erg} \qquad (2.60)$$

ενώ η τιμή της θερμικής ενέργειας που αντιστοιχεί στην θερμοκρασία T είναι

$$k_BT \approx 10^{-14} \text{ erg} \quad , \qquad (2.61)$$

σαφώς μεγαλύτερη τιμή από την $k_B\Theta_\mu$. Αποτέλεσμα είναι πως το φάσμα σε σύγκριση με τη μέση θερμική ενέργεια k_BT του μορίου μπορεί να θεωρηθεί ως πυκνό (οιονεί-συνεχές).

Παράδειγμα 2: Για το ίδιο σωμάτιο του Π1 αλλά σε μικροσκοπικό "κουτί" με διαστάσεις ατόμου (V = 1 Å^6 = 10^{-24} cm^3) ο αντίστοιχος υπολογισμός δίνει

$$k_B\Theta_\mu \approx 10^{-13} \text{ erg} \qquad (2.62)$$

και η ανισότητα T >> Θ_μ που επιτρέπει την θεώρηση του πυκνού (οιονεί-συνεχούς) φάσματος δεν ισχύει. Είναι προφανές ότι αυτή η περίπτωση αποτελεί εξαίρεση και ο υπολογισμός της z θα πρέπει να γίνει επακριβώς με το άθροισμα (και όχι το ολοκλήρωμα) ως προς όλες τις καταστάσεις.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άσκηση 2: Η λύση της εξίσωσης Schrödinger για ένα μόριο μάζας m που κινείται σε διδιάστατο χώρο εμβαδού $A=L^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\phi_{n_x,n_y}=\varepsilon_{n_x,n_y}\phi_{n_x,n_y} \qquad (2.63)$$

είναι

$$\phi_{n_x,n_y}(x,y)=\left(\frac{2}{L}\right)\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right),\ n_x,n_y=1,2,\ldots \qquad (2.64)$$

Να υπολογισθεί η μέση ενέργεια του μορίου στις ακραίες περιπτώσεις:
(i) $k_BT \gg \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ και (ii) $T=0$.

Λύση:

(i). Στην περίπτωση αυτή το φάσμα των ενεργειακών καταστάσεων ε_r $(=\varepsilon_{n_x,n_y})$.

$$\varepsilon_{n_x,n_y}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2),\quad n_x,n_y=1,2,\ldots \qquad (2.65)$$

μπορεί να θεωρηθεί ως οιονεί-συνεχές, αρκεί η απόσταση των διαδοχικών σταθμών να είναι μικρή. Η συνάρτηση επιμερισμού είναι

$$z=\sum_r \exp(-\beta\varepsilon_r)=\sum_{n_x=1}^{\infty}\sum_{n_y=1}^{\infty}\exp\left[-\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2)\right]$$

$$=\left(\sum_{n=1}^{\infty}\exp\left[-\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2k_BT}n^2\right]\right)^2$$

$$=\left(\int_0^{\infty}dn\,\exp\left[-\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2k_BT}n^2\right]\right)^2$$

$$=\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi 2mL^2k_BT}{\hbar^2\pi^2}}\right)^2$$

$$=L^2\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)$$

$$=A\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right). \qquad (2.66)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Το αποτέλεσμα αυτό συμπίπτει (όπως αναμένεται) με αυτό που λαμβάνεται από την εξ. (2.36) για d=2, ενώ στην απόδειξη που οδήγησε στη (2.66) έγινε χρήση του (μισού) ολοκληρώματος του Gauss $\int_0^\infty e^{-\alpha x^2}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$.

Η μέση ενέργεια στην διδιάστατη περίπτωση είναι

$$<\varepsilon> = -\frac{\partial \ln z}{\partial \beta} = 2\,\frac{k_B T}{2} \quad . \tag{2.67}$$

(ii). Για T = 0K μόνον η χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη ε_{11} είναι κατειλημμένη, αφού στον υπολογισμό της z συνεισφέρει μόνο ο πρώτος όρος στο άθροισμα των εκθετικών (οι άλλοι όροι είναι μηδέν λόγω αρνητικού απειρισμού του εκθετικού) και επομένως η μέση ενέργεια του σωματίου είναι

$$<\varepsilon> = \varepsilon_{11} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\cdot 2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}. \tag{2.68}$$

Άσκηση 3: Σε κουτί όγκου $V = L^3$ υπάρχει ένα μόριο μάζας m και το σύστημα ευρίσκεται σε θερμοκρασία T. Αν θεωρηθούν γνωστές οι ιδιοτιμές ενέργειας του μορίου (εξ. 2.56, 2.57) να ευρεθούν:

(i). Η ιδιοτιμή της πίεσης στα τοιχώματα $P_r = -\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial V}$ όταν το μόριο είναι στην κατάσταση $|r> = \phi_{n_x,n_y,n_z}$ συναρτήσει των ε_r και V.

(ii). Να υπολογισθεί η εντροπία του μορίου όταν σε κάποια χαμηλή T μόνο οι δύο χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες έχουν φυσική σημασία.

Λύση :

(i). $$\varepsilon_r = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mV^{2/3}}\,(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{2.69}$$

$$P_r = -\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mV^{2/3}}\right)(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$= \frac{2}{3}\,\frac{1}{V}\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mV^{2/3}}\right)(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{2.70}$$

$$\Leftrightarrow \quad P_r = \frac{2}{3V}\,\varepsilon_r \ . \tag{2.71}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(ii). Έχουμε, επίσης,

$$\varepsilon_o = \varepsilon_{111} = 3\varepsilon \tag{2.72}$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{211} = \varepsilon_{121} = \varepsilon_{112} = 6\varepsilon \ , \tag{2.73}$$

με $$\varepsilon = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m} V^{-2/3} \ . \tag{2.74}$$

Η εντροπία δίνεται από το άθροισμα σε όλες τις καταστάσεις $|r>$ που υπεισέρχονται (στην προκειμένη περίπτωση είναι τέσσερις):

$$S = -k_B \sum_r p_r \ln p_r \ , \text{με} \ \sum_r \rightarrow \sum_{n_x,n_y,n_z \le 2}$$

$$= -k_B\{p_{111} \ln p_{111} + p_{211} \ln p_{211} + p_{121} \ln p_{121} + p_{112} \ln p_{112}\} \tag{2.75}$$

με

$$p_{111} = \frac{e^{-\beta\varepsilon_o}}{z} = \frac{e^{-3\beta\varepsilon}}{z} \quad , \quad p_{211} = p_{121} = p_{112} = \frac{e^{-\beta\varepsilon_1}}{z} = \frac{e^{-6\beta\varepsilon}}{z} \tag{2.76}$$

και

$$z = e^{-\beta\varepsilon_o} + 3\, e^{-\beta\varepsilon_1} = e^{-3\beta\varepsilon}\,(1 + 3\, e^{-3\beta\varepsilon}) \ . \tag{2.77}$$

Με αντικατάσταση των παραπάνω η εντροπία είναι:

$$S = -k_B\{\frac{e^{-\beta\varepsilon_o}}{z}[\ln(e^{-\beta\varepsilon_o}) - \ln z] + 3\,\frac{e^{-\beta\varepsilon_1}}{z}[\ln(e^{-\beta\varepsilon_1}) - \ln z]\}$$

$$= k_B\{\frac{e^{-\beta\varepsilon_o}}{z}(\beta\varepsilon_o + \ln z) + 3\,\frac{e^{-\beta\varepsilon_1}}{z}(\beta\varepsilon_1 + \ln z)\}$$

$$= k_B\{\frac{3\beta\varepsilon + 18\beta\varepsilon\, e^{-3\beta\varepsilon} + \ln z\,(1 + 3e^{-3\beta\varepsilon})}{1 + 3e^{-3\beta\varepsilon}}\}$$

$$= k_B\{\ln(1 + 3e^{-3\beta\varepsilon}) + \frac{9\beta\varepsilon\, e^{-3\beta\varepsilon}}{1 + 3e^{-3\beta\varepsilon}}\} \ . \tag{2.78}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ:

Η στατιστική Boltzmann ενός σωματίου μάζας m σε "κουτί" όγκου V, όταν το σύστημα είναι σε θερμοκρασία T, συνοψίζεται στις εξής βασικές σχέσεις:

$$\boxed{dN = \frac{d^3\vec{x}\, d^3\vec{p}}{3}} \qquad (2.79)$$

όπου ο dN δίνει τον στοιχειώδη αριθμό καταστάσεων στον στοιχειώδη όγκο $d^3\vec{x}\, d^3\vec{p}$ του φασικού χώρου ενώ μετά από ολοκλήρωση η

$$\boxed{N(\varepsilon) = \frac{4V}{3\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{3/2}} \qquad (2.80)$$

μετράει τον συνολικό αριθμό των κβαντικών καταστάσεων στο ενεργειακό διάστημα [0, ε]. Η πυκνότητα καταστάσεων (αριθμός καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας) δίνεται από την συνάρτηση

$$\boxed{\rho(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{2V}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}}, \qquad (2.81)$$

ενώ η συνάρτηση επιμερισμού του ελεύθερου σωματίου σε όγκο V με θερμοκρασία T είναι

$$\boxed{z = V\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}} \; . \qquad (2.82)$$

Η συνάρτηση επιμερισμού z γράφεται και ως

$$\boxed{z = \frac{V}{V_Q}} \; , \qquad (2.83)$$

όπου V_Q είναι ο κβαντικός όγκος του σωματίου ενέργειας k_BT που μπορεί να εκτιμηθεί από τον όγκο "κουτιού" πλευράς περίπου ίσης με το μέσο θερμικό μήκος κύματος De Broglie. Οι παραπάνω σχέσεις λαμβάνονται με την προϋπόθεση του πυκνού (οιονεί-συνεχούς) μονοσωματιακού ενεργειακού φάσματος, ώστε τα αντίστοιχα αθροίσματα μπορεί να μετατραπούν με ασφάλεια σε ολοκληρώματα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ:

1. Ποιός είναι ο όγκος του φασικού χώρου στην κλασσική φυσική που αντιστοιχεί σε μια κβαντική κατάσταση; Σε ποιό συμπέρασμα μας οδηγεί αυτό σχετικά με την φύση του φάσματος των κβαντικών καταστάσεων;

2. Πώς γίνεται το μοίρασμα του διαθέσιμου κλασσικού όγκου στην κβαντική μηχανική, για να ευρεθεί ο αριθμός των κβαντικών καταστάσεων; Σε ποιόν φυσικό οφείλεται η ανακάλυψη αυτού του τρόπου μελέτης;

3. Γιατί είναι απαραίτητη η καταμέτρηση των κβαντικών καταστάσεων ενός συστήματος; Με ποιά βασική ποσότητα της στατιστικής συνδέεται;

4. Να εκτιμήσετε τον αριθμό των κβαντικών καταστάσεων $N(k_BT)$ ενός σωματίου μάζας $m = 7 \times 10^{-24}$ gr, που κινείται στον μακροσκοπικό όγκο $V = 10^3\ cm^3$ και το σύστημα είναι σε θερμοκρασία δωματίου $T = 300K$. Τι τάξης μεγέθους είναι αυτός ο αριθμός σε σχέση με τον ολικό αριθμό σωματίων ενός αερίου ($N = 10^{24}$);

5. Τι δηλώνει η πυκνότητα καταστάσεων; Τι το ορισμένο ολοκλήρωμα της πυκνότητας καταστάσεων (π.χ. μεταξύ ε_1 και ε_2); Να υπολογίσετε την πυκνότητα καταστάσεων $\rho(\varepsilon)$ και την συνάρτηση επιμερισμού z για ένα σωμάτιο που κινείται σε έναν τετραδιάστατο υπερκύβο όγκου L^4.

6. Να περιγράψετε μέσω της αντίστοιχης πυκνότητας καταστάσεων την περιοχή ενεργειών (μικρές ή μεγάλες) που το φάσμα είναι πυκνό και αραιό, αντίστοιχα, στην μονοδιάστατη περίπτωση. Τι συμβαίνει στις δύο διαστάσεις; Στις τρεις;

7. Να σχεδιάσετε όπως στο Σχ. 2.6, αλλά σε οριζόντια μορφή, τις ενεργειακές στάθμες στην μονοδιάστατη περίπτωση μέχρι το n=15 σε μονάδες του $\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$. Θεωρείστε στην συνέχεια ένα ενεργειακό διάστημα $\Delta\varepsilon = 50$ στις ίδιες μονάδες. Να μετρήσετε τις καταστάσεις στα διαστήματα, από 0 μέχρι Δε, από Δε μέχρι 2 Δε, από 2Δε μέχρι 3 Δε, κ.λ.π. και να σχεδιάσετε αυτόν τον

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αριθμό (σε ιστόγραμμα) συναρτήσει της ενέργειας. Να υπερθέσετε στο ιστόγραμμα την αναλυτική μορφή της ρ(ε) στην μονοδιάστατη περίπτωση. Τι παρατηρείται;

8. Στην ερώτηση 7 να θεωρήσετε την ε_n σαν συνεχή μεταβλητή (θεωρώντας και το n συνεχές). Παραγωγίζοντας την $\varepsilon_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} n^2$ ως προς n να δείξετε ότι ο αριθμός των ενεργειακών καταστάσεων dn ανά μονάδα ενεργειακού διαστήματος dε (ο λόγος dn/dε σαν συνάρτηση της ε) δίνει την μονοδιάστατη πυκνότητα καταστάσεων (από την εξ. 2.27) $\rho(\varepsilon) = \frac{L}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2} \varepsilon^{-1/2}$.

9. Να επαναλάβετε τα ερωτήματα 7 και 8 για την διδιάστατη και την τρισδιάστατη περίπτωση. Παρατηρείστε ότι η καταμέτρηση των καταστάσεων περιλαμβάνει τώρα και το εκφυλισμό των ενεργειακών σταθμών.

10. Γιατί στις χαμηλές θερμοκρασίες Τ, όπου δεν ισχύει η προσέγγιση του οιονεί-συνεχούς φάσματος, αρκούν μόνο οι χαμηλότεροι όροι καταστάσεων (με τις μικρότερες ενέργειες) στον υπολογισμό της συνάρτησης επιμερισμού; Ποιές είναι οι καταστάσεις που συνεισφέρουν γιά Τ = 0Κ; (Να εξετάσετε τον όρο $-\beta\varepsilon = -\varepsilon/k_B T$ που υπεισέρχεται στο εκθετικό για τον υπολογισμό της z και την αντίστοιχη πιθανότητα κατάληψης μιάς κατάστασης. Επίσης, να δικαιολογήσετε τα συμπεράσματά σας και από φυσική άποψη θεωρώντας την κατάληψη των καταστάσεων από το σωμάτιο σε θερμοκρασία Τ. Γιατί για χαμηλές Τ το σωμάτιο έχει αυξημένη πιθανότητα να καταλάβει μόνο τις χαμηλές καταστάσεις;)

11. Τι εκφράζει ο κβαντικός όγκος V_Q; Τι τάξης μεγέθους αριθμός είναι η z ; Τι μετράει;

12. Από ποιά θερμοδυναμική ποσότητα μπορεί να μετρηθούν οι διακυμάνσεις στην ενέργεια; Ποιά είναι η τιμή της ποσοστικής τυπικής απόκλισης στην ενέργεια του ενός σωματίου; Πώς συμπεριφέρεται σε αυθαίρετη διάσταση του χώρου d; Πότε τείνει στο μηδέν;

13. Από την καταστατική εξίσωση του ιδανικού αερίου γιά N = 1 και την μέση ενέργεια του ενός σωματίου να δείξετε τον γενικής ισχύος τύπο του ιδανικού

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αερίου $PV = \frac{2}{3} E$, όπου $E = \langle \varepsilon \rangle$. Πώς τροποποιείται ο τύπος αυτός στις d διαστάσεις; Να εφαρμόσετε το αποτέλεσμα γιά $d = 1$ και $d = 2$.

14. Η συγκέντρωση ή πυκνότητα ενός σωματίου (αριθμός σωματίων ανά μονάδα όγκου) σε όγκο V είναι 1/V. Ποιά είναι η κινητική ενέργεια του σωματίου όταν είναι στην βασική κατάσταση; Ποιά είναι η τιμή της θερμοκρασίας T για την οποία η θερμική ενέργεια $k_B T$ ισούται με την βασική ενέργεια; Να υπολογίσετε σε αυτήν την περίπτωση την συνάρτηση επιμερισμού z και να δείξετε ότι η συγκέντρωση 1/V ισούται με την κβαντική συγκέντρωση $1/V_Q$ (εκτός από μη σημαντικούς παράγοντες της τάξης μονάδα). Επίσης, σε αυτήν την θερμοκρασία η κατάληψη της βασικής στάθμης αναμένεται, πως είναι τάξης μονάδα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

1. Ένα μόριο ιδανικού αερίου κινείται σε διδιάστατη επιφάνεια $A = L^2$ και έχει ενέργεια

$$\varepsilon = c(p_x^2 + p_y^2 + m^2 c^2)^{1/2} - m c^2 \quad .$$

Να ευρεθούν :

(i). Η πυκνότητα καταστάσεων $\rho(\varepsilon)$.

(ii). Η συνάρτηση επιμερισμού z .

(iii). Να γίνει η πλήρης θερμοδυναμική περιγραφή του συστήματος με έμφαση στα όρια $\beta m c^2 \to 0$ και $\beta m c^2 \to \infty$ ενώ παράλληλα να εξετάσετε αν η επιλογή του μηδενός της ενέργειας επηρεάζει τις απαντήσεις σας.

2. Να υπολογισθεί η πυκνότητα καταστάσεων $\rho(\varepsilon)$ και η συνάρτηση επιμερισμού $z \left(= V\frac{1}{\pi^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3 \right)$ για ένα μόριο ιδανικού σχετικιστικού αερίου σε όγκο V και θερμοκρασία T, όπου η ενέργεια συνδέεται με την ορμή μέσω της σχέσης

$$\varepsilon = c\,|\vec{p}\,| = c\,p\,,$$

στο ακραίο σχετικιστικό όριο με c την ταχύτητα του φωτός. Στην συνέχεια να επιχειρηθεί η γενίκευση των αποτελεσμάτων σε κάθε διάσταση του χώρου d.

3. Ένα σωμάτιο κινείται ελεύθερα σε "κουτί" όγκου $V = L^3$ με ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις που δίνονται από τις εξ. (2.56) και (2.57). Αν θεωρήσετε τους αριθμούς n_x, n_y και n_z που λαμβάνουν μόνο θετικές τιμές σαν συνιστώσες ενός διανύσματος $\vec{n}$:

(i). Να υπολογισθεί η πυκνότητα καταστάσεων $\rho(n)$, ώστε ο $\rho(n)\,dn$ να μετράει τις καταστάσεις με $n = |\vec{n}\,|$ στο διάστημα $(n, n + dn)$.

(ii). Αν $\vec{k} = \frac{\pi}{L}\vec{n} = (k_x, k_y, k_z)$, όπως προκύπτει στην περίπτωση που οι οριακές συνθήκες είναι "σκληρού τοίχου", να σχεδιασθεί η κατανομή των καταστάσεων στον διδιάστατο χώρο (k_x, k_y) και να εκτιμηθεί ο στοιχειώδης όγκος που καταλαμβάνει η κάθε μια κατάσταση.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(iii). Να υπολογισθεί η αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων ρ(k), ώστε ο αριθμός ρ(k)dk να μετράει στις καταστάσεις με $k = |\vec{k}|$ στο διάστημα (k, k + dk).

(iv). Αν οι οριακές συνθήκες είναι περιοδικές τότε $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\ \vec{n}$ με το $\vec{n}$ να δέχεται τώρα όλες τις τιμές (θετικές, αρνητικές και μηδέν) για τα n_x, n_y και n_z. Αλλάζει η ρ(k) σε αυτήν την περίπτωση και γιατί;

(v). Κάνοντας χρήση των σχέσεων $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ και $\varepsilon = p^2/2m$, $p = |\vec{p}|$ να υπολογίσετε τις πυκνότητες καταστάσεων ρ(p) και ρ(ε). Να ελέγξετε αν το αποτέλεσμα εξαρτάται από την επιλογή των οριακών συνθηκών.

(vi). Να υπολογίσετε την συνάρτηση επιμερισμού z του σωματίου.

Σημείωση: οι συναρτήσεις ρ(n), ρ(k), ρ(p), και ρ(ε) δεν έχουν προφανώς την ίδια μορφή.

4. Ένας μονοδιάστατος αρμονικός ταλαντωτής έχει ένα άπειρο σύνολο από ενεργειακές στάθμες, με $\varepsilon_r = r\,\hbar\omega$, όπου ο r είναι θετικός ακέραιος ή μηδέν, ενώ το μηδέν της ενέργειας λαμβάνεται για r = 0. Να υπολογίσετε και να σχεδιάσετε την ελεύθερη ενέργεια και την εντροπία του συστήματος.

(Απάντηση: $f = k_B T \ln [1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)]$, $s = \frac{\hbar\omega}{k_B T} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} - \ln [1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)]$).

5. Τα μαγνόνια (κύματα σπίν στους σιδηρομαγνήτες) έχουν τετραγωνική σχέση διασποράς

$$\varepsilon = D\,k^2 = D\,p^2/\hbar^2 \quad ,$$

όπου D μιά σταθερά, γιά μικρές τιμές της ενέργειας ε (θετική ή μηδέν). Να υπολογίσετε την πυκνότητα καταστάσεων ρ(ε) σε κάθε διάσταση του χώρου d.

6. Τα φωνόνια (ακουστικά κύματα στους μονωτικούς κρυστάλλους) έχουν γραμμική σχέση διασποράς

$$\omega = c\,k = c\,p/\hbar \quad ,$$

για μικρές τιμές της συχνότητας ω, όπου c η ταχύτητα του ήχου. Να υπολογίσετε την πυκνότητα καταστάσεων ρ(ω) σε κάθε διάσταση του χώρου d.

7. Τα φωτόνια (σωμάτια μάζας μηδέν και σπιν 1) έχουν επίσης γραμμική σχέση διασποράς

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\omega = c\,k = c\,p/\hbar \ ,$$

όπου c η ταχύτητα του φωτός. Να υπολογίσετε την πυκνότητα καταστάσεων ρ(ω) σε κάθε διάσταση του χώρου d και να δείξετε ότι πρέπει να πολλαπλασιασθεί επί δύο λόγω εκφυλισμού, αφού η προβολή του σπιν παίρνει, λόγω μηδενικής μάζας, τις τιμές +1 και −1.

8. Ένα στατιστικό μορφοκλασματικό (π.χ. το διηθητικό συσσωμάτωμα του ΠΑΡΑΡΤ. Γ) χαρακτηρίζεται από μιά διάσταση d_f που δεν είναι ακέραιος αριθμός και ο όγκος μεταβάλλεται συναρτήσει της ακτίνας με δύναμη d_f. Να θεωρήσετε (ΠΑΡΑΡΤ. Γ. της ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι) ότι η συχνότητα ω των ταλαντώσεων αυτού του πλέγματος συναρτήσει της ορμής p (για μικρές συχνότητες) δεν ακολουθεί μία γραμμική σχέση (όπως στα φωνόνια) αλλά με εκθέτη α/2 και τα σωμάτια ονομάζονται φρακτόνια. Να δείξετε με σχέσεις αναλογίας ότι η πυκνότητα καταστάσεων μεταβάλλεται ως

$$\rho(\omega) = A\,\omega^{(d_s-2)/2} \quad , \ A = \text{σταθ.},$$

με την φρακτονική διάσταση $d_s = 2d_f/\alpha$. Αποδεικνύεται ότι για κάθε διάσταση του χώρου που "ζει" αυτό το μορφοκλασματικό οι εκθέτες d_f και α συνδυάζονται έτσι ώστε $d_s = 4/3$, με αρκετά καλή ακρίβεια. Πώς συμπεριφέρεται η θερμοχωρητικότητα αυτού του φρακτονικού αερίου για μικρές θερμοκρασίες Τ;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΤΟ ΙΔΑΝΙΚΟ ΑΕΡΙΟ Ν-ΣΩΜΑΤΙΩΝ

3.1. Καταστάσεις πολλών-σωματίων
3.2. Διακρίσιμα σωμάτια-κλασσική στατιστική
3.3. Υπολογισμός της εντροπίας S και το παράδοξο του Gibbs
3.4. Μη διακρίσιμα σωμάτια
3.5. Οιονεί-κλασσική στατιστική και η εξίσωση Sackur-Tetrod
3.6. Κριτήρια ισχύος της οιονεί-κλασσικής στατιστικής
3.7. Αριθμός καταστάσεων Ν-σωματίων με ολική ενέργεια μέχρι Ε
3.8 Υπολογισμός του μέσου αριθμού κατάληψης $<n_r>$
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΤΟ ΙΔΑΝΙΚΟ ΑΕΡΙΟ Ν-ΣΩΜΑΤΙΩΝ

3.1. Καταστάσεις πολλών - σωματίων

Το βασικό πρόβλημα αποτελεί η επίλυση της εξίσωσης Schröndinger και ειδικότερα η εύρεση των ενεργειακών σταθμών με τους αντίστοιχους εκφυλισμούς της κάθε μιας. Η γνώση αυτών των ποσοτήτων επιτρέπει την εφαρμογή της άμεσης στατιστικής διαδικασίας στο κατάλληλο στατιστικό ensemble, για τον υπολογισμό των μακροσκοπικών παραμέτρων. Όμως, η λύση της εξίσωσης Schröndinger είναι δύσκολη έως ανέφικτη στις περισσότερες των περιπτώσεων και συνήθως πρέπει να περιορισθούμε σε προσεγγίσεις. Για το ιδανικό αέριο, ευτυχώς, η εξίσωση Schröndinger επιλύεται ακριβώς (π.χ. για ένα ελεύθερο σωμάτιο ιδανικού αερίου αυτό έχει γίνει στο Κεφ.2). Γενικώτερα όμως, όταν το σύστημα αποτελείται από Ν μη-αλληλεπιδρώντα υποσυστήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι λύσεις του ενός. Παραδείγματα τέτοιων συστημάτων εκτός από το ιδανικό αέριο, που ανάγει το πρόβλημα στις χβαντικές λύσεις ενός ελεύθερου σωματίου σε "κουτί" με μηδενική δυναμική ενέργεια, είναι και τα στερεά Einstein και Debye, όπου ως ανεξάρτητα υποσυστήματα θεωρούνται τα επιμέρους άτομα του στερεού.

Η εξίσωση του Schröndinger για σύστημα μη αλληλεπιδρώντων Ν-σωματίων γράφεται

$$H\ \Psi = E\ \Psi \tag{3.1}$$

όπου $H = H_1 + H_2 + \ldots H_N$ με

$$H_i\ \phi_r(i) = \varepsilon_r(i)\ \phi_r(i) \tag{3.2}$$

τις εξισώσεις για το i-σωμάτιο. Μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε με αντικατάσταση, πως

$$\Psi = \phi_r(1)\ \phi_s(2) \ldots\ \phi_w(N) \tag{3.3}$$

και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$E = \varepsilon_r(1) + \varepsilon_s(2) + \ldots + \varepsilon_w(N) \quad , \tag{3.4}$$

με τους δείκτες r, s, . . . , w, να δηλώνουν τις μονοσωματιακές καταστάσεις, ενώ οι αριθμοί στις παρενθέσεις (1, 2, 3, ..., N) καταγράφουν τα σωμάτια* .

Από τις εξ. (3.3) και (3.4) μπορούμε να κατασκευάσουμε όλες τις καταστάσεις πολλών σωματίων από τις μονοσωματιακές καταστάσεις των επιμέρους σωματίων. Μια προσεκτικώτερη παρατήρηση δείχνει πως η ενέργεια E του συστήματος των N-σωματίων μπορεί να καθοριστεί μονοσήμαντα από ένα σύνολο ακεραίων αριθμών. Αυτοί είναι οι δείκτες κατάληψης n_r των μονοσωματιακών καταστάσεων $|r>$. Επομένως, η ενέργεια του συστήματος γράφεται και ως

$$E_{\{n_r\}} = E_{n_1, n_2, n_3, \ldots} = \sum_r n_r \varepsilon_r \, , \tag{3.5}$$

με το άθροισμα σε όλες τις μονοσωματιακές καταστάσεις $|r>$. Στην περίπτωση του κανονικού ensemble, όπου ο αριθμός των σωματιδίων είναι σταθερός, ισχύει η συνθήκη

$$N = \sum_r n_r \quad , \tag{3.6}$$

αθροίζοντας τους αριθμούς κατάληψης n_r σε όλες τις μονοσωματιακές καταστάσεις $|r>$.

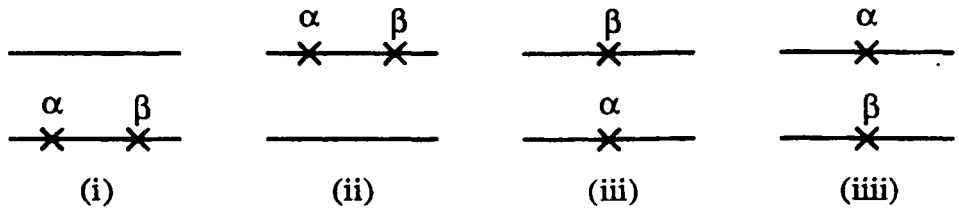
Αφού καταγράψαμε τις κβαντικές καταστάσεις των πολλών (N) σωματίων, είναι λογικό να αναζητήσουμε και να υπολογίσουμε τον πιθανό ενεργειακό εκφυλισμό της κάθε μιας. Αυτό σημαίνει πως διαφορετικοί συνδυασμοί των $\{n_r\}$ μπορεί να δώσουν την ίδια ενέργεια $E_{\{n_r\}}$. Εδώ όμως είναι απαραίτητο να αποφασίσουμε για το είδος των σωματίων που αποτελούν το σύστημά μας. Συγκεκριμένα τα σωμάτια μπορεί να είναι διακρίσιμα (με ... "ονοματεπώνυμο") ή μη διακρίσιμα (χωρίς "ονοματεπώνυμο") μεταξύ τους. Στην πρώτη περίπτωση τα σωμάτια λαμβάνονται στο πνεύμα της κλασσικής μηχανικής, ενώ στη δεύτερη περίπτωση είναι τα γνωστά, παρόμοια, κβαντικά

* **Σημείωση:** Ο προσεκτικός αναγνώστης θα έχει παρατηρήσει πως οι ενέργειες των N-σωματίων συμβολίζονται με κεφαλαία γράμματα, ενώ του ενός σωματίου με μικρά.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

σωμάτια. Επιπλέον, τα μη διακρίσιμα κβαντικά σωμάτια είναι δύο ειδών, ανάλογα με το σπιν τους: μποζόνια ή φερμιόνια.

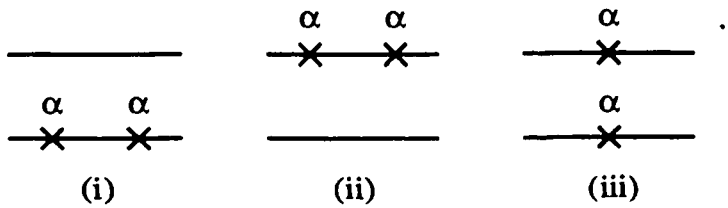
Παράδειγμα 1: Δύο διακρίσιμα σωμάτια (N = 2 καταλαμβάνουν τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις ε_r, r=1, 2. Στην περίπτωση αυτή οι δυνατές πολυσωματιακές καταστάσεις του συστήματος είναι οι εξής:



Σχ. 3.1.

με ενέργειες: **(i).** $E_{2,0} = 2\,\varepsilon_1$, **(ii).** $E_{0,2} = 2\,\varepsilon_2$, **(iii).** $E_{1,1} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ και **(iv).** $E_{1,1} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$. Είναι προφανές ότι οι καταστάσεις (iii) και (iv) γράφονται ως $\{n_1,n_2\} = \{1,1\}$ και δεν διαφέρουν ούτε ως προς την ενεργειά τους ($E_{1,1} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$). Διαφέρουν όμως ως προς το είδος. Τα σωμάτια είναι **διακρίσιμα**, που καταλαμβάνουν την κάθε στάθμη (στην (iii) το α-σωμάτιο είναι στην ε_1 και το β στη ε_2 ενώ στην (iv) αντιστρόφως).

Παράδειγμα 2: Η περίπτωση του Παραδείγματος 1 για δύο **μη διακρίσιμα** σωμάτια επιτρέπει την καταγραφή μόνο των τριών καταστάσεων



Σχ. 3.2.

με ενέργειες: **(i).** $E_{2,0} = 2\,\varepsilon_1$, **(ii).** $E_{0,2} = 2\,\varepsilon_2$ και **(iii).** $E_{1,1} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$, αντίστοιχα. Είναι προφανές ότι οι καταστάσεις (iii) και (iv) του Π1 τώρα συμπτύσσονται σε μία, γιατί δεν υπάρχει πλέον διαφορά, λόγω της μη διακρισιμότητας των σωματίων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Από το Π1 φαίνεται πως στην περίπτωση των διακρίσιμων σωματίων υπάρχει σημαντικός εκφυλισμός των ενεργειακών σταθμών $E_{\{n_r\}}$ (π.χ. η $\varepsilon_1 + \varepsilon_2$ είναι διπλά εκφυλισμένη) ενώ η μη διακρισιμότητα των σωματίων (Π2) έχει ως αποτέλεσμα την άρση του εκφυλισμού (η $\varepsilon_1 + \varepsilon_2$ έχει τώρα εκφυλισμό μονάδα). Για τα μη διακρίσιμα (κβαντικά) σωμάτια ισχύει και μια επιπλέον διάκριση: ανάλογα με το σπιν τους τα σωμάτια είναι **φερμιόνια**, όπου $n_r = 0$ ή 1 χωρίς πολλαπλή κατάληψη της κάθε μονοσωματιακής κατάστασης $|r>$, ή **μποζόνια** όπου κάθε $n_r = 0, 1, 2, ..., N$ είναι επιτρεπτό. Τα φερμιόνια έχουν ημιακέραιο σπιν και υπακούουν στην "απαγορευτική αρχή του Pauli" που τα κάνει "ακατάδεκτα" στο να μοιράζονται την ίδια κατάσταση $|r>$. Τέτοιος περιορισμός δεν υφίσταται για τα μποζόνια που έχουν ακέραιο σπίν. Με αυτή όμως την διάκριση θα ασχοληθούμε λεπτομερώς σε άλλα κεφάλαια.

Συμπέρασμα: Για τα διακρίσιμα (κλασσικά) σωμάτια* δεν αρκεί να πεις **πόσα** από αυτά είναι στην κάθε μονοσωματιακή κατάσταση $|r>$ αλλά και **ποιά.** Επομένως, κάθε ανταλλαγή δύο διακρίσιμων σωματίων, παρ' όλο που οι αριθμοί κατάληψης παραμένουν οι ίδιοι, πρέπει να καταγραφεί ως ξεχωριστή κατάσταση του αερίου.

3.2. Διακρίσιμα σωμάτια-κλασσική στατιστική

Οι πολυσωματιακές ενεργειακές στάθμες χαρακτηρίζονται από το σύνολο των αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ και έχουν ενέργεια που δίνεται από την εξ. (3.5). Στην περίπτωση διακρίσιμων σωματίων το σύνολο των αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ περιγράφει την ενεργειακή στάθμη, όχι όμως και την αντίστοιχη κβαντική κατάσταση των N-σωματίων. Ο εκφυλισμός που μετράει τον αριθμό των καταστάσεων N **διακρίσιμων** σωματίων με την ίδια ενέργεια $E_{\{n_r\}}$ είναι

$$g_{\{n_r\}} = \frac{N!}{n_1!\, n_2! \ldots n_r! \ldots} \quad , \quad N = \sum_r n_r \, . \tag{3.7}$$

---

* Σωμάτια με ονοματεπώνυμο!

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Στο αποτέλεσμα (3.7) καταλήγουμε εύκολα, αν θυμηθούμε πως ο εκφυλισμός δίνεται από τον αριθμό των τρόπων που μπορούμε να επιλέξουμε ένα σύνολο αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ από τον αριθμό N, ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη $N = \sum_r n_r$. Πρέπει βέβαια να λάβουμε υπ' όψιν μας πως ο ολικός αριθμός των μεταθέσεων N αριθμών είναι N!, ενώ οι μεταθέσεις των n_r σωματίων που περιέχονται στην κατάσταση $|r>$ είναι $n_r!$ (Ασκ. 4)

Παράδειγμα: Να δείξετε τους εκφυλισμούς των E_{n_1,n_2} στο Π1 του Κεφ. 3.1. με βάσει την εξ. (3.7).

Η κανονική συνάρτηση επιμερισμού των N διακρίσιμων σωματίων υπολογίζεται σχετικά εύκολα. Από την σχέση

$$Z_{\Delta IAK}(N) = \sum_{\{n_r\}} g_{\{n_r\}} \exp(-\beta E_{\{n_r\}}),\ \beta = \frac{1}{k_B T}\ , \qquad (3.8)$$

και με χρήση των εξ. (3.5) και (3.7)

$$Z_{\Delta IAK}(N) = \sum_{\{n_r\}} \frac{N!}{\prod_r n_r!} \exp(-\beta \sum_r n_r \varepsilon_r)$$

$$= \sum_{n_1,n_2,\ldots}^{N} \frac{N!}{n_1! n_2! \ldots n_r! \ldots} (e^{-\beta\varepsilon_1})^{n_1} (e^{-\beta\varepsilon_2})^{n_2} \ldots (e^{-\beta\varepsilon_r})^{n_r} \ldots \qquad (3.9)$$

Το πολλαπλό αυτό άθροισμα στην εξ. 3.9, ως προς τα σύνολα των αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ υπολογίζεται ακριβώς, αν ληφθεί υπ' όψιν το πολυωνυμικό θεώρημα

$$(x_1 + x_2 + \ldots + x_r + \ldots)^N = \sum_{\{n_r\}} \frac{N!}{n_1!\, n_2! \ldots n_r! \ldots} x_1^{n_1} x_2^{n_2} \ldots x_r^{n_r} \ldots \qquad (3.10)$$

Επομένως η συνάρτηση επιμερισμού μπορεί να γραφεί ως

$$Z_{\Delta IAK}(N) = (e^{-\beta\varepsilon_1} + e^{-\beta\varepsilon_2} \ldots + e^{-\beta\varepsilon_r} + \ldots)^N = z^N\ , \qquad (3.11)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όπου z είναι η συνάρτηση επιμερισμού του ενός σωματίου. Είναι επίσης αξιοσημείωτο το γεγονός ότι η παραπάνω αυστηρή μαθηματική διερεύνηση δεν μας επιβεβαιώνει παρά ένα αναμενόμενο αποτέλεσμα ($Z = z^N$) που είναι άμεση συνέπεια της ανεξαρτησίας των N διακρίσιμων σωματίων.

Γνωρίζοντας την συνάρτηση επιμερισμού υπολογίζονται, κατευθείαν, οι βασικές θερμοδυναμικές ποσότητες, όπως η ολική ενέργεια E και η ελεύθερη ενέργεια Helmholtz F. Η ενέργεια είναι εκτατική μεταβλητή (ανάλογη του αριθμού σωματίων N) αφού από την εξ. (2.40) για d = 3

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$= N k_B T^2 \frac{\partial \ln z}{\partial T} = N \frac{3}{2} k_B T \ , \qquad (3.12)$$

με διακυμάνσεις που εκτιμούνται μέσω της διασποράς

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta}$$

$$= k_B T^2 \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_V$$

$$= k_B T^2 C_V \ , \qquad (3.13)$$

όπου C_V είναι η θερμοχωρητικότητα του αερίου.

Άσκηση: Να υπολογισθεί η μέση ολική ενέργεια $\langle E \rangle$ και οι διακυμάνσεις της $\langle (\Delta E)^2 \rangle$ για ένα μονοατομικό ιδανικό αέριο N σωματίων. (**Απάντηση:** $\langle E \rangle = \frac{3}{2} N k_B T$ και $\langle (\Delta E)^2 \rangle = \frac{3}{2} N k_B{}^2 T^2$). Να δείξετε, επίσης, ότι η σχετική τυπική απόκλιση είναι $\sqrt{2/3N}$ και παίρνει πολύ μικρές τιμές όταν ο N είναι της τάξης του αριθμού του Avogadro $N_A = 6 \times 10^{23}$.

Η ελεύθερη ενέργεια είναι η εκτατική μεταβλητή που ορίζεται από την σχέση

$$F = -k_B T \ln Z = -N k_B T \ln z \, . \qquad (3.14)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

3.3. Υπολογισμός της εντροπίας S και το παράδοξο του Gibbs

Η εντροπία S από τη θερμοδυναμική σχέση $F = E - TS$ και την (3.14) είναι

$$S = \frac{E - F}{T} = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial T} + k_B \ln Z \quad . \tag{3.15}$$

Με βάση τη σχέση (3.11) που ισχύει για N διακρίσιμα σωμάτια και την εισαγωγή της συνάρτησης επιμερισμού του ενός σωματίου

$$z = V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \tag{3.16}$$

έχουμε

$$S = k_B T \frac{3}{2} N \frac{1}{T} + k_B \left(\ln V + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right) + \frac{3}{2} \ln (k_B T)\right)$$

$$= N k_B \left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right) + \frac{3}{2} \ln (k_B T) + \ln V\right) . \tag{3.17}$$

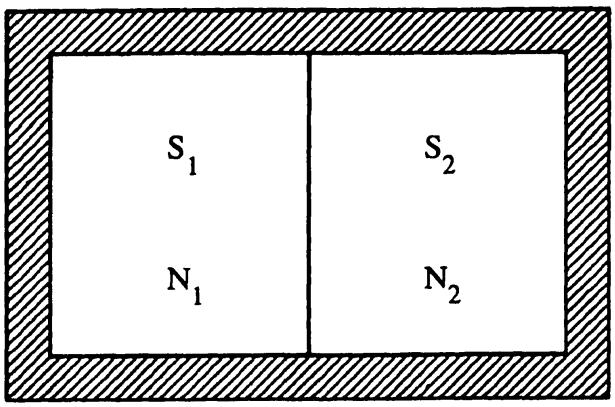
Οι δύο πρώτοι όροι στο άθροισμα της εξ. (3.17) είναι σταθερές, ανεξάρτητες των T, V και N ενώ οι δύο τελευταίοι όροι περιέχουν την εξάρτηση από τη θερμοκρασία T και τον όγκο V, αντίστοιχα. Η έκφραση όμως για την εντροπία S που μόλις υπολογίσαμε δεν είναι σωστή!

Θα πρέπει εδώ να εξηγήσουμε τι εννοούμε με την τελευταία πρόταση της προηγούμενης παραγράφου σχετικά με την ορθότητα της εντροπίας S. Πρώτα-πρώτα θα παρατηρήσουμε ότι για $T \to 0$ η εντροπία $S \to -\infty$, λόγω του λογαριθμικού όρου στο άθροισμα της εξ. (3.17) που περιέχει την εξάρτηση από τη θερμοκρασία T. Δεν πρέπει όμως να μας ανησυχεί η κατάφωρη αυτή παραβίαση του 3ου θερμοδυναμικού νόμου, περί μηδενικής εντροπίας στο απόλυτο μηδέν, επειδή οι υπολογισμοί μας έγιναν στα πλαίσια της κλασσικής στατιστικής που δεν ισχύει για χαμηλές θερμοκρασίες T. Στην περίπτωση χαμηλής T μόνο οι μονοσωματιακές καταστάσεις $|r\rangle$ χαμηλής ενέργειας ε_r είναι κατηλειμμένες με αποτέλεσμα να είναι απολύτως αναγκαία η πλήρης κβαντομηχανική περιγραφή.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Όμως η έκφραση της εξ. (3.17) για την S είναι λανθασμένη, επειδή υπονοεί ότι η εντροπία δεν συμπεριφέρεται όπως θα έπρεπε για μια εκτατική μεταβλητή, δηλ. δεν είναι ανάλογη του αριθμού σωματίων N. Έτσι, ενώ κανείς θα ανέμενε ότι μεγέθυνση του συστήματος με κάποιον συντελεστή κλίμακας οδηγεί στην αντίστοιχη αύξηση των ανεξάρτητων παραμέτρων V και N, αλλά και της μέσης ενέργειας <E>, με τον ίδιο συντελεστή, η εντροπία δεν αυξάνει ανάλογα. Αυτό οφείλεται στον όρο N lnV της εξ. (3.17) που κάνει την S μη αμιγώς εκτατική μεταβλητή, αφού λόγω της εκτατικότητας του όγκου V ο όρος αυτός είναι της μορφής N lnN και όχι απλώς N.

Το γεγονός ότι η εντροπία S δεν είναι ανάλογη του N φαίνεται και ως εξής: φανταστείτε ένα δοχείο που χωρίζεται σε δύο τμήματα (Σχ.3.3) με κάποιο χώρισμα, που δεν επηρεάζει την κατανομή στις επιτρεπτές μικροκαταστάσεις, δηλ. με μια αντιστρεπτή διαδικασία.



Σχ. 3.3. Ένα δοχείο ιδανικού αερίου που χωρίζεται σε δύο ίσα μέρη με ένα χώρισμα.

Η εντροπία θα πρέπει να είναι η ίδια με και χωρίς το χώρισμα, ώστε

$$S = S_1 + S_2 , \tag{3.18}$$

όπου S_1 και S_2 είναι οι εντροπίες των δύο τμημάτων. Είναι εύκολο να αποδείξουμε ότι από τον τύπο (3.17) δεν προκύπτει η προσθετικότητα της εξ. (3.18). Έστω ότι το δοχείο διαχωρίζεται σε δύο ίσα τμήματα όγκου $V_1 = V_2 = V/2$ με $N_1 = N_2 = N/2$. Τότε, η εντροπία για κάθε μέρος θα είναι

$$S_1 = S_2 = N_1 k_B [\text{σταθ.} + \frac{3}{2} \ln (k_B T) + \ln V_1] . \tag{3.19}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ενώ η εντροπία όλου του αερίου χωρίς το χώρισμα είναι

$$S = N k_B [\ \text{σταθ.} + \frac{3}{2} \ln (k_B T) + \ln V] \ , \qquad (3.20)$$

Η διαφορά τους

$$S - 2S_1 = N k_B [\ \ln V - \ln (\frac{V}{2})]$$

$$= N k_B \ln 2 \qquad (3.21)$$

δεν είναι μηδέν, όπως απαιτείται από την εξ. (3.18) και με την (3.19).

Το προφανές παράδοξο στο οποίο καταλήξαμε συζητήθηκε από τον Gibbs και είναι γνωστό στη βιβλιογραφία ως "το παράδοξο του Gibbs". Πού όμως βρίσκεται το λάθος; Η απάντηση είναι μάλλον απλή και δεν έχει προφανώς να κάνει με την προσθετικότητα των εντροπιών της εξ. (3.18), η οποία ισχύει γενικά για δύο συστήματα που αλληλεπιδρούν ασθενώς μεταξύ τους. Πρέπει, όμως να θυμηθούμε, ότι για την προσθετικότητα των εντροπιών απαιτείται και όλες οι εξωτερικές παράμετροι να παραμένουν οι ίδιες σε κάθε υποσύστημα. Αν ξεχωρίσουμε πλήρως (το ένα εδώ και το άλλο εκεί) τα δύο υποσυστήματα "1" και "2" του Σχ. 3.3., με τον ίδιο όγκο V/2 για το καθένα, τότε η συνολική εντροπία των δύο απομακρυσμένων συστημάτων θα ικανοποιεί την προσθετικότητα της εξ. (3.18). Στην περίπτωση της εξ. (3.21) κάναμε κάτι παραπάνω: μετακινήσαμε το χώρισμα και ενώ πριν την αφαίρεση οι μονοσωματιακές καταστάσεις υπολογίζονται σε όγκο V/2 για το κάθε υποσύστημα, μετά υπολογίζονται στον συνολικό όγκο V. Η αφαίρεση του χωρίσματος έχει ως φυσική συνέπεια την δυνατότητα εύρεσης ενός μορίου σε οποιοδήποτε σημείου του όγκου V, ενώ πριν αυτό θα μπορούσε να ευρεθεί μόνο στον μισό χώρο όγκου V/2. Π.χ. αν τα δύο υποσυστήματα αποτελούνται από διαφορετικά είδη μορίων (κόκκινα και μπλέ) στην περίπτωση της αφαίρεσης του χωρίσματος θα είχαμε διάχυση των διαφορετικών μορίων σε όλο τον διαθέσιμο χώρο. Μια διαδικασία που προφανώς δεν αντιστρέφεται με απλή επανατοποθέτηση του χωρίσματος! Επομένως, η αύξηση στην εντροπία (εξ. 3.21) οφείλεται στην μη αντιστρεπτή διαδικασία που μόλις περιέγραψα, από την αύξηση της αταξίας λόγω της ανάμιξης δύο διαφορετικών αερίων.

Θα νόμιζε κάποιος πως, επειδή τα αέρια στα δύο υποσυστήματα που μελετάμε είναι τα ίδια (όμοια), δεν θα έπρεπε να συμβαίνει αυτή η αύξηση

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

στην εντροπία με την ανάμιξη. Αυτό είναι απολύτως αληθές. Όμως μην ξεχνάτε: τα σωμάτια των αερίων τα θεωρήσαμε ως διακρίσιμα (ανόμοια, δηλ. σαν να είναι χρωματισμένα), αφού πήραμε στα σοβαρά την κλασσική μηχανική. Εάν το αέριο αντιμετωπισθεί με κβαντομηχανικούς όρους, ώστε τα σωμάτια να είναι μη διακρίσιμα, το παράδοξο του Gibbs αίρεται. Παρ' όλο που περιμένουμε τα αποτελέσματα αυτού του κεφαλαίου να έχουν ισχύ μόνο σε υψηλές-Τ, η χρήση της διακρισιμότητας των σωματίων εισάγει ένα σφάλμα, που εκδηλώνεται με το παράδοξο του Gibbs. Το παράδοξο του Gibbs και οι θερμοδυναμικές του συνέπειες ήταν το βασικό πρόβλημα της στατιστικής φυσικής στις αρχές του αιώνα. Επιλύθηκε αργότερα με την ανακάλυψη της κβαντομηχανικής.

3.4. Μη διακρίσιμα σωμάτια.

Γνωρίζουμε ότι στον μικρόκοσμο παύει να ισχύει η κλασσική μηχανική και τα σωμάτια είναι όχι μόνο όμοια αλλά και μη διακρίσιμα, σύμφωνα με την κβαντική μηχανική. Επομένως, δεν υπάρχει ο εκφυλισμός, των πολυσωματιακών καταστάσεων που συναντήσαμε στην περίπτωση των διακρίσιμων σωματίων, αφού οι ανακατατάξεις (μεταθέσεις) μεταξύ των μη διακρίσιμων σωματίων δεν έχουν φυσικό νόημα (Π.χ. Π1 και Π2 στο Κεφ. 3.1). Για μη διακρίσιμα σωμάτια το σύνολο των αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ χαρακτηρίζει πλέον, όχι μόνο τις πολυσωματιακές ενεργειακές στάθμες, αλλά καθορίζονται μονοσήμαντα και οι καταστάσεις των πολλών- σωματίων. Επιπλέον, επειδή η Χαμιλτονιανή του συστήματος παραμένει αναλλοίωτη σε αντιμεταθέσεις των οποιονδήποτε δύο μη διακρισίμων σωματίων, οι λύσεις της εξίσωσης του Schröndinger είναι συμμετρικές ή αντισυμμετρικές.

Ας δούμε την περίπτωση N = 2 μη διακρίσιμων (παρόμοιων) σωματίων στα πλαίσια της κβαντικής μηχανικής. Η πρόταση "το σωμάτιο 1 είναι εδώ και το σωμάτιο 2 είναι εκεί" ισοδυναμεί με "το σωμάτιο 2 είναι εδώ και το σωμάτιο 1 είναι εκεί". Επομένως για το πλάτος πιθανότητας (κυματο-συνάρτηση) $\Psi(x_1,x_2)$ υπάρχουν δύο δυνατότητες, η **συμμετρική**

$$\Psi(x_1,x_2) = +\Psi(x_2,x_1) \qquad (3.22)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

είτε η **αντισυμμετρική**

$$\Psi(x_1,x_2) = -\Psi(x_2,x_1) \ . \qquad (3.23)$$

Οι εξ. (3.22) και (3.23) προκύπτουν επειδή η πιθανότητα $|\Psi(x_1,x_2)|^2$ να ευρεθεί "το σωμάτιο 1 στη θέση x_1 και το σωμάτιο 2 στη θέση x_2" παραμένει η ίδια, όταν έχουμε αντιμετάθεση δύο σωματίων (η πιθανότητα γίνεται $|\Psi(x_2,x_1)|^2$) ώστε:

$$|\Psi(x_1,x_2)|^2 = |\Psi(x_2,x_1)|^2 \ , \qquad (3.24)$$

απ' όπου προκύπτουν οι εξ. (3.22) και (3.23). Βλέπουμε, λοιπόν, πως με την αντιμετάθεση η πιθανότητα δεν αλλάζει λόγω ταυτότητας των σωματίων. Στην περίπτωση της συμμετρικής κυματοσυνάρτησης αντιστοιχούν τα κβαντικά σωμάτια ακέραιου σπιν, γνωστά και ως μποζόνια, ενώ στην αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση αντιστοιχούν τα σωμάτια ημιακέραιου σπιν, γνωστά και ως φερμιόνια.

Από την αντιμετάθεση δύο σωματίων ισχύει η σχέση ιδιοτιμών

$$\Psi(x_2,x_1) = \lambda\, \Psi(x_1,x_2) \ , \qquad \text{με} \quad \lambda \in \text{στο σύνολο των ακεραίων,} \quad (3.25)$$

και με μια δεύτερη αντιμετάθεση ($\Psi(x_1,x_2) = \lambda\, \Psi(x_2,x_1)$) η εξ. (3.25) γράφεται

$$\Psi(x_2,x_1) = \lambda^2\, \Psi(x_2,x_1) \ , \qquad (3.26)$$

απ' όπου

$$\lambda^2 = 1 \quad \text{και} \quad \lambda = \pm 1 \ . \qquad (3.27)$$

και οδηγούμεθα πάλι στις δύο περιπτώσεις των εξ. (3.22) και (3.23). Λόγω της μη διακρισιμότητας των σωματίων οι καταστάσεις μετά από ανταλλαγή δύο σωματίων είναι φυσικά ισοδύναμες, ώστε να ισχύει η εξ. (3.24).

Η περίπτωση για $N = 2$ μπορεί εύκολα να γενικευθεί και για κάθε αριθμό σωματίων N. Πάλι θα διακρίνουμε τις συμμετρικές κυματοσυναρτήσεις

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_\alpha, \ldots, \vec{r}_\beta, \ldots) = +\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_\beta, \ldots, \vec{r}_\alpha, \ldots) \ , \quad (3.28)$$

που παραμένουν οι ίδιες και τις αντισυμμετρικές κυματοσυναρτήσεις

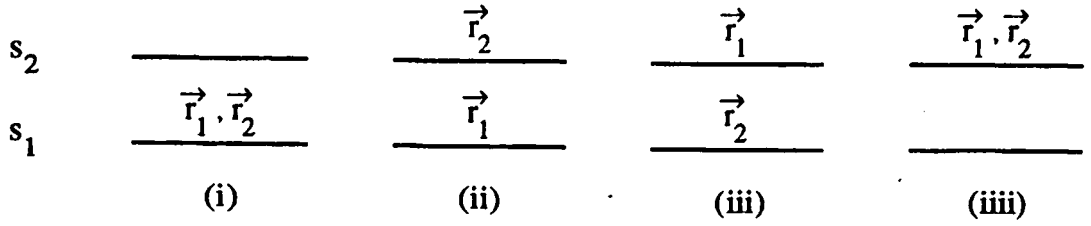
$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_\alpha, \ldots, \vec{r}_\beta, \ldots) = -\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_\beta, \ldots, \vec{r}_\alpha, \ldots) \ , \quad (3.29)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

που αλλάζουν πρόσημο σε κάθε αντιμετάθεση δύο σωματίων α και β. Οι $\vec{r}_i$, δηλώνουν τις συντεταγμένες χώρου και τις προβολές του σπιν για το i σωμάτιο ενώ οι Ψ δεν αλλάζουν ή αλλάζουν, απλώς πρόσημο, όταν ένα ζεύγος σωματίων ανταλάσσει καταστάσεις. Είναι πάλι προφανές, ότι η φυσική ποσότητα $|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_\alpha, \ldots, \vec{r}_\beta, \ldots)|^2$ παραμένει πάλι αναλλοίωτη σε οποιανδήποτε ανταλλαγή των α και β. Στην περίπτωση που η αντιμετάθεση δύο σωματίων δεν αλλάζει την Ψ τα σωμάτια είναι **μποζόνια**, ενώ στην περίπτωση που δημιουργεί αλλαγή προσήμου στην Ψ είναι **φερμιόνια**.

Παράδειγμα 1: N = 2 σωμάτια στις δύο μονοσωματιακές καταστάσεις (τροχιακά) $\phi_{s_1}(\vec{r}_1)$ και $\phi_{s_2}(\vec{r}_2)$. Για την περίπτωση που τα σωμάτια είναι διακρίσιμα (κλασσικά) υπάρχουν οι εξής δυνατότητες τοποθέτησής τους :

(i). $\phi_{s_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_1}(\vec{r}_2)$, (ii). $\phi_{s_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_2}(\vec{r}_2)$, (iii).$\phi_{s_2}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_1}(\vec{r}_2)$ και (iv).$\phi_{s_2}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_2}(\vec{r}_2)$, (3.29)



Σχ. 3.4. Οι τοποθετήσεις δύο διακρίσιμων (κλασσικών) σωματίων με συντεταγμένες $\vec{r}_1$ και $\vec{r}_2$ στις δύο μονοσωματιακές καταστάσεις s_1 και s_2.

Στην περίπτωση των μη διακρίσιμων μποζονίων του Π1 οι αντίστοιχες καταστάσεις είναι τρεις, γιατί οι (ii) και (iii) συμπτύσσονται σε μια κατάσταση που είναι ο γραμμικός συνδυασμός

$$\Psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{s_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_2}(\vec{r}_2) + \phi_{s_2}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_1}(\vec{r}_2)\right) \qquad (3.40)$$

Η $\Psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ είναι συμμετρική, αφού εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι ισχύει η

$$\Psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = +\,\Psi_S(\vec{r}_2, \vec{r}_1)\ ,$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ενώ ο παράγοντας $1/\sqrt{2}$ στην εξ. (3.40) είναι απαραίτητος για λόγους κανονικοποίησης. Συνολικά στην περίπτωση των μποζονίων έχουμε τις τρεις καταστάσεις

$$\text{(i). } \phi_{s_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_1}(\vec{r}_2),\ \text{(ii) \& (iii). } \Psi_S(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \text{ και (iv). } \phi_{s_2}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_2}(\vec{r}_2) \quad .(3.42)$$

Στην περίπτωση των μη διακρίσιμων φερμιονίων οι καταστάσεις (i) και (iv) (Σχ.3.4) δεν υπάρχουν πλέον λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli ενώ οι (ii) και (iii) συμπτύσσονται πάλι σε μια κατάσταση

$$\Psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{s_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_2}(\vec{r}_2) - \phi_{s_2}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_1}(\vec{r}_2)\right) \quad . \qquad (3.43)$$

Είναι επίσης εύκολο να δειχθεί πως η Ψ_A είναι αντισυμμετρική

$$\Psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = -\,\Psi_A(\vec{r}_2,\vec{r}_1) \qquad (3.44)$$

και κανονικοποιημένη. Επιπλέον αποτελεί τη μοναδική κατάσταση του συστήματος των $N = 2$ φερμιονίων.

Παράδειγμα 2: Όταν δύο φερμιόνια είναι στην ίδια μονοσωματιακή κατάσταση ($s_1 = s_2$) από την εξ. (3.43)η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση γίνεται

$$\Psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{s_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_1}(\vec{r}_2) - \phi_{s_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_1}(\vec{r}_2)\right) = 0\ , \qquad (3.45)$$

η οποία δηλώνει την ισχύ της απαγορευτικής αρχής του Pauli (δεν επιτρέπει την διπλή κατάληψη των μονοσωματιακών καταστάσεων).

Η γενική κυματοσυνάρτηση των N-σωματίων είναι δυνατόν να γραφεί για **μποζόνια**

$$\Psi_S = \sqrt{\frac{n_1!\,n_2!\,\ldots}{N!}}\ \Sigma\,\phi_{s_1}(\vec{r}_1)\,\phi_{s_2}(\vec{r}_2)\ldots \qquad (3.46)$$

με το άθροισμα να εκτείνεται σε όλες τις δυνατές μεταθέσεις των δεικτών s_1, s_2, ..., ενώ για τα φερμιόνια

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{s_1}(\vec{r}_1)\, \phi_{s_1}(\vec{r}_2) \ldots \phi_{s_1}(\vec{r}_N) \\ \phi_{s_2}(\vec{r}_1)\, \phi_{s_2}(\vec{r}_2) \ldots \phi_{s_2}(\vec{r}_N) \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \end{vmatrix} , \qquad (3.47)$$

που είναι γνωστή και ως η " ορίζουσα του Slater".

Παράδειγμα 3: Στην περίπτωση N = 3 σωματίων $\Psi_A = \phi_{s_1}(1)\, \phi_{s_2}(2)\, \phi_{s_3}(3) + \phi_{s_1}(2)\, \phi_{s_2}(3)\, \phi_{s_3}(1) + \phi_{s_1}(3)\, \phi_{s_2}(1)\, \phi_{s_3}(2) \mp \phi_{s_1}(2)\, \phi_{s_2}(1)\, \phi_{s_3}(3) \mp \phi_{s_1}(1)\, \phi_{s_2}(3)\, \phi_{s_3}(2) \mp \phi_{s_1}(3)\, \phi_{s_2}(2)\, \phi_{s_3}(1)$.

3.5. Οιονεί-κλασσική στατιστική και η εξίσωση Sackur-Tetrode

Το πρώτο βήμα για την βελτίωση της κλασσικής στατιστικής είναι να θεωρήσουμε τα σωμάτια ως μη διακρίσιμα, ενώ όπως και στην κλασσική στατιστική θα αγνοήσουμε την κβαντική στατιστική και το σπιν. Θα ονομάσουμε την βελτιωμένη αυτή κλασσική στατιστική οιονεί-κλασσική στατιστική. Η βασική διαφορά που εισάγει είναι στην μη διακρισιμότητα των σωματίων μέσω του αριθμού N!, που δηλώνει τις αντιμεταθέσεις μεταξύ σωματίων. Επειδή η μη διακρισιμότητα των σωματίων δεν δίνει αυτές τις επιπλέον καταστάσεις η κλασσική συνάρτηση επιμερισμού (3.11) πρέπει να διαιρεθεί με το N!

Ξεκινάμε από το γεγονός ότι η κλασσική στατιστική υποθέτει ότι οι μονοσωματιακές καταστάσεις είναι αραιοκατηλειμμένες. Ο μέσος αριθμός κατάληψης μιας μονοσωματιακής στάθμης $|r\rangle$ είναι

$$\langle n_r \rangle \ll 1 , \qquad (3.48)$$

που σημαίνει, πως στις περισσότερες περιπτώσεις έχουμε $n_r = 0$ ή 1. Επομένως, τα παραγοντικά $n_r! = 0!$ ή 1! σε αυτό το όριο δίνουν πάντα το αποτέλεσμα $n_r!$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

= 1 και η συνάρτηση επιμερισμού των N μη διακρίσιμων σωματίων γράφεται (απουσία εκφυλισμού) ως

$$Z_{\text{ΜΗ ΔΙΑΚ}}(N) = \sum_{\{n_r\}} \exp\left(-\beta \sum_r n_r \varepsilon_r\right). \qquad (3.49)$$

Όμως η συνάρτηση επιμερισμού των διακρίσιμων σωματίων (με εκφυλισμό) είναι

$$Z_{\text{ΔΙΑΚ}}(N) = \sum_{\{n_r\}} g_{\{n_r\}} \exp\left(-\beta \sum_r n_r \varepsilon_r\right)$$

$$= \sum_{\{n_r\}} \frac{N!}{\prod_r n_r!} \exp\left(-\beta \sum_r n_r \varepsilon_r\right)$$

$$= N! \sum_{\{n_r\}} \exp\left(-\beta \sum_r n_r \varepsilon_r\right)$$

$$= N!\ Z_{\text{ΜΗ ΔΙΑΚ}}(N)\ , \qquad (3.50)$$

αφού $n_r! = 1$ στο κλασσικό όριο. Από την εξ. (3.50) προκύπτει αμέσως η σχέση

$$\boxed{Z_{\text{ΜΗ ΔΙΑΚ}}(N) = \frac{Z_{\text{ΔΙΑΚ}}(N)}{N!} = \frac{z^N}{N!}} \qquad (3.51)$$

Είναι προφανές ότι διαιρώντας με τον παράγοντα N! την $Z_{\text{ΔΙΑΚ}}$ λαμβάνεται υπ' όψιν η μη διακρισιμότητα των N σωματίων.

Η οιονεί-κλασσική προσέγγιση είναι πραγματοποιήσιμη στα όρια του πυκνού φάσματος μονοσωματιακών καταστάσεων και ύπαρξης λίγων σωματίων στις μονοσωματιακές καταστάσεις (εξ. 3.48). Είναι επίσης προφανές, ότι στο όριο αυτό δεν αναμένεται να γίνει αισθητή η διαφορά μεταξύ των μποζονίων και φερμιονίων, αφού $\langle n_r \rangle << 1$ που σημαίνει πως και η απαγορευτική αρχή του Pauli ικανοποιείται στην οιονεί-κλασσική στατιστική αναγκαστικά. Δεν πρέπει, επίσης, να νομισθεί πως η οιονεί-κλασσική στατιστική, μέσω της διαίρεσης με τον παράγοντα N! στην συνάρτηση επιμερισμού, μπορεί να υποκαταστήσει την πλήρη κβαντική περιγραφή. Αυτό θα γίνει στο Κεφ. 5 όπου θα εισάγουμε τον αναγνώστη στην πλήρη κβαντική στατιστική των μποζονίων και των φερμιονίων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Η θεώρηση των N-σωματίων ως κβαντικών (μη διακρίσιμων) επιτρέπει την άρση του παράδοξου του Gibbs (Κεφ. 3.3), με αποτέλεσμα η εντροπία S να συμπεριφέρεται πλέον ως εκτατική μεταβλητή. Από τη σχέση (2.51) με $Z = Z_{\text{ΜΗ ΔΙΑΚ}}(N)$ λογαριθμίζοντας προκύπτει:

$$\ln Z = N \ln z - \ln N!$$

$$\approx N \ln z - N \ln N + N, \qquad (3.52)$$

λαμβάνοντας υπ' όψιν και τον προσεγγιστικό τύπο $N! \approx e^{-N} N^N$, γνωστό και ως τύπο του Stirling (ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι), που ισχύει όταν $N >> 1$. Η εντροπία S υπολογίζεται κατευθείαν (εξ. 3.15)

$$S = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial T} + k_B \ln Z$$

$$= N k_B \left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) + \frac{3}{2} \ln (k_B T) + \ln V \right) - N k_B \ln N + N k_B$$

$$= N k_B \left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) + \frac{3}{2} \ln (k_B T) + \ln \frac{V}{N} \right). \qquad (3.53)$$

Η εξίσωση (3.53) είναι γνωστή και ως εξίσωση Sackur-Tetrode (1911). Στην εξ. (3.53) δεν υπάρχει το παράδοξο του Gibbs και η S συμπεριφέρεται σαν μια φυσιολογική εκτατική μεταβλητή. Η εκτατικότητα της S εξασφαλίζεται από την ύπαρξη του σταθερού λόγου $\frac{V}{N}$ στον λογάριθμο. Θυμηθείτε πως ο όρος N lnN που δημιουργούσε το πρόβλημα (λόγω του lnN) τώρα, αντικαθίσταται από το N επί τον λογάριθμο μιας σταθεράς (επειδή οι V και N είναι εκτατικές ποσότητες ο λόγος τους είναι ποσότητα ανεξάρτητη του N). Σε μια πιό συνοπτική μορφή η εξίσωση Sackur-Tetrode γράφεται και ως

$$\boxed{S = k_B \left[\frac{5}{2} - \ln \left(N \frac{V_Q}{V} \right) \right]}, \qquad (3.54)$$

όπου V_Q είναι ο κβαντικός όγκος (εξ. 2.43), ενώ $\frac{N}{V}$ είναι η πυκνότητα (σωμάτια ανά μονάδα όγκου) του αερίου.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άσκηση 1: Να ευρεθεί η έκφραση των Sackur-Tetrode για την εντροπία S συστήματος N μονοατομικών σωματίων σε αυθαίρετη διάσταση του χώρου d (δοχείο όγκου L^d). Με αντικατάσταση d = 2 να βρεθεί η εντροπία S για σωμάτιο που κινείται σε διδιάστατη επιφάνεια εμβαδού $A = L^2$.

Η εντροπία S από την εξ. (3.54) στην οιονεί-κλασσική στατιστική περιέχει ασφαλώς και την κβαντική σταθερά ħ, μέσω του κβαντικού όγκου V_Q, ενώ είναι προφανές ότι η S "εξ ορισμού" προϋποθέτει την ύπαρξη των κβαντικών (διακριτών) ενεργειακών σταθμών Η εντροπία S λαμβάνεται από την θερμοχωρητικότητα $C_V(T)$ με ολοκλήρωση μέσω της θερμοδυναμικής σχέσης

$$S(T) - S(0) = \int_0^T C_V(T') \frac{dT'}{T'} \quad + \text{αύξηση S λόγω τήξης ή βρασμού.} \quad (3.55)$$

Τα πειραματικά αποτελέσματα με την εξ. (3.55), για αρκετά υψηλές θερμοκρασίες, είναι σε συμφωνία με αυτά που λαμβάνονται από την εξ. (3.54).

Άσκηση 2: Να αποδειχθεί ότι η έκφραση (3.53) για την S μπορεί να γραφεί και ως (N φορές η εντροπία του ενός σωματίου)

$$S = -N k_B \sum_r p_r \ln p_r , \quad (3.56)$$

όπου $p_r = e^{-\beta\varepsilon_r}/ z$ είναι η πιθανότητα ένα σωμάτιο να είναι στην κατάσταση |r>

και $z = \sum_r e^{-\beta\varepsilon_r}$ με $\beta = 1/ k_B T$.

3.6. Κριτήρια ισχύος της οιονεί-κλασσικής στατιστικής

Η σωστή συνάρτηση επιμερισμού Z των N ελεύθερων σωματίων του ιδανικού αερίου, που λαμβάνει υπ' όψιν και την ουσιαστική μη διακρισιμότητα των μορίων αποφεύγοντας τις δυσκολίες του παραδόξου του Gibbs, είναι


ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$Z = \frac{z^N}{N!} = \frac{V^N}{N!}\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3N/2} . \qquad (3.57)$$

Αν και η μελέτη γίνεται στα πλαίσια της κλασσικής φυσικής η εξ. (3.57) εκφράζει την βελτιωμένη οιονεί-κλασσική στατιστική. Το φυσιολογικό ερώτημα που προκύπτει είναι: σε ποιό βαθμό η διαδικασία της οιονεί-κλασσικής στατιστικής παραμένει ισχυρή στη μελέτη φυσικών συστημάτων πολλών-σωματίων;

Από την αρχή της απροσδιοριστίας του Heisenberg

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar , \qquad (3.58)$$

που εισάγει τις αβεβαιότητες Δx και Δp στον ταυτόχρονου καθορισμό των x και p, αν η μέση τιμή της ορμής είναι $\langle p \rangle$ και η μέση απόσταση μεταξύ των σωματίων a τότε για να ισχύει η κλασσική περιγραφή ($a\langle p \rangle >> h$) πρέπει

$$a >> \lambda_{DB} = h/\langle p \rangle , \qquad (3.59)$$

όπου λ_{DB} είναι το μέσο μήκος κύματος De Broglie. Στο όριο αυτό η κβαντική περιγραφή ανάγεται στην κίνηση κυματοπακέτων, που περιγράφουν τα σωμάτια, κινούμενα ανεξάρτητα το ένα από το άλλο στα πλαίσια μιας οιονεί-κλασσικής περιγραφής.

Η μέση ενδοσωματιακή απόσταση a εκτιμάται, αν φαντασθούμε ότι το κάθε σωμάτιο είναι στο κέντρο μιας μικρής κυψελίδας με μορφή κύβου πλευράς a. Επειδή οι κυψελίδες για όλα τα σωμάτια γεμίζουν όλον το διαθέσιμο όγκο V έχουμε

$$V = N\,a^3 \text{ ή } a = (V/N)^{1/3}. \qquad (3.60)$$

Η μέση ορμή $\langle p \rangle$ εκτιμάται από τη μέση ενέργεια $\langle \varepsilon \rangle$ ενός σωματίου σε θερμοκρασία T. Από την εξ. (3.12) για N=1

$$\langle p \rangle = \sqrt{2m\langle \varepsilon \rangle} = \sqrt{3mk_BT} , \qquad (3.61)$$

ώστε

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{3mk_BT}} \qquad (3.62)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και η συνθήκη (3.59) γίνεται

$$\boxed{\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} >> \frac{h}{\sqrt{3mk_BT}} \quad \text{ή} \quad T >> T_0 = \frac{h^2}{3mk_Ba^2}} \quad , \quad a = \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} . \qquad (3.63)$$

Επομένως προσδιορίστηκε η συνθήκη για να μπορέσουμε να δούμε την κυματική φύση των σωματίων. Η θερμοκρασία T_0 λέγεται και θερμοκρασία εκφυλισμού. Η ποσότητα a στα στερεά εκτιμάται από την μέση πλεγματική απόσταση που είναι μερικά Å(= 10^{-8} cm). Περίπου ίδιες είναι και οι τιμές και για τα υγρά ενώ για τα αέρια είναι πολύ μεγαλύτερες. Γιά τα ηλεκτρόνια σε στερεά και υγρά, με αντικατάσταση των σταθερών και της μάζας του ηλεκτρονίου, διαπιστώνουμε πως η συνθήκη (3.63) δεν ισχύει σχεδόν ποτέ για ρεαλιστικές θερμοκρασίες. Αντιθέτως, για τα βαρύτερα άτομα, ατομικού βάρους M, μπορεί να δειχθεί πως η θερμοκρασία εκφυλισμού $T_0 = 50/M$ σε (Kelvin) στα στερεά ή τα υγρά. Για άτομα στην αέρια φάση η συνθήκη (3.63) ικανοποιείται σχεδόν πάντα.

Από την εξ. (3.63) προκύπτει πως η οιονεί-κλασσική στατιστική μπορεί να εφαρμοσθεί στο σύστημα του ιδανικού αερίου αρκεί η συγκέντρωση $\frac{N}{V}$ των σωματίων να είναι αρκετά μικρή ή η θερμοκρασία T αρκετά μεγάλη, με την προϋπόθεση ότι η μάζα των σωματίων m δεν είναι πάρα πολύ μικρή. Σε παρόμοιο αποτέλεσμα με την εξ. (3.63) καταλήγουμε αν εκτιμήσουμε τον μέσο αριθμό κατάληψης $\langle n_r \rangle$ από την πιθανότητα $p_r = e^{-\beta\varepsilon_r}/z$ να βρεθεί ένα μόριο στην κατάσταση $|r\rangle$ με ενέργεια ε_r. Η πιθανότητα μπορεί να εκτιμηθεί προφανώς από την αντίστοιχη συχνότητα κατάληψης της μονοσωματιακής κατάστασης $|r\rangle$, ώστε

$$p_r = \frac{\langle n_r \rangle}{N} = \frac{e^{-\beta\varepsilon_r}}{z} \qquad (3.64)$$

Η απαίτηση της κλασσικής και οιονεί-κλασσικής στατιστικής για μικρό μέσον δείκτη κατάληψης $\langle n_r \rangle << 1$ (εξ. 3.48) οδηγεί στην συνθήκη

$$\langle n_r \rangle = N \frac{e^{-\beta\varepsilon_r}}{V\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}} << 1$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{T >> T_o = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = \frac{4}{\pi}\,\Theta_\mu N^{2/3}}\,, \quad \Theta_\mu = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mk_B V^{2/3}}\,, \qquad (3.65)$$

εφ' όσον αγνοήσουμε τον εκθετικό παράγοντα $e^{-\beta\varepsilon_r}$ (≈ 1). Το νόημα της εξ. (3.65) είναι πως ορίζει μια φυσική περιοχή με $\langle n_r \rangle << 1$, ενώ δείχνει και την αναγκαιότητα της κβαντικής στατιστικής για θερμοκρασίες χαμηλότερες μιας ορισμένης τιμής, που είναι ανάλογη της T_o. Αντί για το λ_{DB} μπορεί να χρησιμοποιήσουμε το "μέσο θερμικό μήκος κύματος

$$\lambda = \frac{\lambda_{DB}}{\sqrt{\pi}} = V_Q^{1/3} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}\right)^{1/2} \qquad (3.66)$$

και η (3.59), για να ισχύει η κλασσική στατιστική, γίνεται

$$\lambda << a\,. \qquad (3.67)$$

Οι σχέσεις (3.67) και (3.59) είναι ισοδύναμες, όπως και οι (3.63) και (3.65), εκτός από ασήμαντες πολλαπλασιαστικές σταθερές.

Αριθμητικά παραδείγματα: Οι παραπάνω συνθήκες ισχύος της κλασσικής στατιστικής ικανοποιούνται για τα περισσότερα αέρια, αλλά υπάρχουν αρκετές σημαντικές περιπτώσεις που παραβιάζονται. Επιπλέον η κβαντική στατιστική, όπως περιγράφεται στα Κεφ. 5-7, είναι απολύτως απαραίτητη στις χαμηλές θερμοκρασίες, κυρίως για τα υγρά και τα στερεά.

(i). Έστω αέριο He σε θερμοκρασία $T \approx 300K$ ($k_B T \approx 4.2 \times 10^{-14}$ erg), πίεση P = 760 mm Hg $\approx 10^6$ dynes/ cm^2, με μάζα μορίου $m = 7 \times 10^{-24}$ gr ($= \frac{M}{N_A}$, M=μοριακό βάρος = 4 και $N_A = 6 \times 10^{23}$). Εύκολα από την καταστατική εξίσωση υπολογίζεται η πυκνότητα του αερίου

$$\frac{N}{V} = \frac{P}{k_B T} = 2.4 \times 10^{19} \text{ μόρια cm}^{-3}, \qquad (3.68)$$

απ' όπου η μέση απόσταση είναι $a = (V/N)^{1/3} \approx 3.5 \times 10^{-7}$ cm, ενώ $\lambda = \frac{\lambda_{DB}}{\sqrt{\pi}} = 0.4 \times 10^{-8}$ cm. Άρα η συνθήκη $\lambda << a$ ικανοποιείται. Επομένως, η οινεί-κλασσική συνάρτηση επιμερισμού αποτελεί μια πολύ καλή προσέγγιση του

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αερίου. Συνήθως, όμως τα περισσότερα αέρια έχουν μεγαλύτερο μοριακό βάρος και επομένως μικρότερη τιμή του λ με αποτέλεσμα το κριτήριο (3.67) να ικανοποιείται ακόμη ευκολώτερα. Μέσω της εξίσωσης (3.65) μπορεί να εκτιμηθεί και η θερμοκρασία εκφυλισμού $T_0 = \frac{4}{\pi}\ \Theta_\mu\ N^{2/3} \approx 0.06K$ και τα κβαντικά φαινόμενα πρέπει να ληφθούν σοβαρά υπ' όψιν για θερμοκρασίες κάτω από την T_0. Διαπιστώνουμε, όμως, ότι στην περίπτωση αυτή, για το μεγαλύτερο μέρος της κλίμακας θερμοκρασιών, η οιονεί-κλασσική στατιστική ισχύει.

(ii). Στην περίπτωση του ιδανικού αερίου που αποτελείται από τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας των μετάλλων η μάζα m ($\approx 10^{-29}$ gr) μικραίνει κατά 7 000 φορές σε σχέση με το He. Επομένως, το λ (εξ. 3.66) αναμένεται να μεγαλώσει, όπως επίσης και η θερμοκρασία T_0 πάνω από την οποία ισχύει η κλασσική στατιστική (εδώ έχουμε $T_0 \approx 10^4 - 10^5 K$). Η ιδιαίτερα μεγάλη τιμή της T_0 μας επιβάλλει την αντιμετώπιση των ηλεκτρονίων ως ιδανικό αέριο Fermi σε όλη σχεδόν την κλίμακα των επιτεύξιμων θερμοκρασιών με τη κβαντική στατιστική, που θα γνωρίσουμε στα παρακάτω κεφάλαια. Η οιονεί-κλασσική στατιστική σε αυτήν την περίπτωση δεν είναι, προφανώς, χρήσιμη, αφού ισχύει μόνο για πολύ υψηλές T ($>> T_0$).

3.7. Αριθμός καταστάσεων N-σωματίων με ολική ενέργεια μέχρι E

Μέχρι αυτό το σημείο αγνοήσαμε την κβαντική στατιστική και το σπιν ενώ ορίσαμε τις καταστάσεις των N-σωματίων (διακρίσιμων ή μη) με το σύνολο των αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ των μονοσωματιακών καταστάσεων r. Ας επιχειρήσουμε, στο πνεύμα του Κεφ.2., να γενικεύσουμε τον υπολογισμό καταμέτρησης των κβαντικών καταστάσεων για N-σωμάτια. Αναμένεται ότι ο αριθμός καταστάσεων (των N-σωματίων) δίνεται από τον όγκο του φασικού χώρου 3N + 3N = 6N διαστάσεων, αφού τα N σωμάτια κινούνται στον τρισδιάστατο χώρο των θέσεων, διαιρεμένο με την σταθερά του Planck h στην αντίστοιχη δύναμη 3N. Άρα, (εξ. 2.21)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$N(E) = V^N \frac{\left(\frac{\pi^{3N/2}(2mE)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}\right)}{h^{3N}} , \qquad (3.69)$$

όπου $\Gamma(3N/2+1)$ είναι η συνάρτηση Γ (ΠΑΡΑΡΤ. Α) ενώ στην παρένθεση παραθέτουμε τον όγκο σφαίρας ακτίνας $(2mE)^{1/2}$ στις 3N-διαστάσεις του χώρου των ορμών. Η εξ. (3.69) πρέπει να τροποποιηθεί στα πλαίσια της οιονεί-κλασσικής στατιστικής, ώστε να λαμβάνει υπ' όψιν και την απουσία εκφυλισμού λόγω μη διακρισιμότητας των σωματίων. Γι αυτόν τον σκοπό αρκεί να την διαιρέσουμε με τον αριθμό των μεταθέσεων N!* , σύμφωνα με το Κεφ. 3.5,

$$\boxed{N(E) = \frac{V^N}{N!\,\Gamma(\frac{3N}{2}+1)} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3N/2} E^{3N/2}} \quad . \qquad (3.70)$$

Ο συνολικός αριθμός καταστάσεων με ενέργειες μέχρι $E = N\frac{3}{2}k_BT$ (εξ. 3.12) είναι

$$N(E = N\tfrac{3}{2}k_BT) = \frac{V^N}{N!}\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3N/2} \frac{(\frac{3}{2}N)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}$$

$$\approx \frac{z^N}{N^N} e^{5N/2} , \qquad (3.71)$$

όπου έγινε χρήση του τύπου Stirling

$$N! \approx N^N e^{-N} \qquad (3.72)$$

και

$$\Gamma(\frac{3N}{2}+1) = (\frac{3N}{2})! \approx (\frac{3}{2}N)^{3N/2} e^{-3N/2} . \qquad (3.73)$$

Ο ολικός αριθμός των καταστάσεων για τα N-σωμάτια του αερίου μπορεί να γραφεί και ως

* Ο εκφυλισμός λόγω διακρισιμότητας

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\boxed{\mathcal{N}\left(N\frac{3}{2}k_BT\right)=\left(\frac{V}{N}\right)^N\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3N/2}e^{5N/2}} \quad . \tag{3.74}$$

Αν αντικαταστήσουμε τις σταθερές στην εξ. (3.74), με $m=7 \times 10^{-24}$gr, $V = 10^3 cm^3$ και $N = 2 \times 10^{22}$ σωμάτια, σε απόλυτη θερμοκρασία 300 βαθμών Kelvin έχουμε ότι ο αριθμός των καταστάσεων είναι περίπου

$$\approx 10^{5^{22}} \quad . \tag{3.75}$$

Τέτοιους φανταστικά μεγάλους αριθμούς αντιμετωπίσαμε στη ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι. Εάν επιχειρούσαμε να γράψουμε αυτόν τον αριθμό σε ένα πολύ μεγάλο χαρτί θα είμαστε νεκροί πολύ πριν τελειώσουμε! Ο αριθμός της εξ. (3.75), έχει αριθμό ψηφίων της τάξης του 10^{22}, ενώ ένας μεγάλος αριθμός π.χ. ένα τρισεκατομμύριο έχει αριθμό ψηφίων μόλις 12. Τέτοιοι αριθμοί αντιμετωπίζονται με τον ορισμό της εντροπίας, που μετράει τον αριθμό των ψηφίων στον ολικό αριθμό καταστάσεων. Π.χ στο παράδειγμά μας λογαριθμίζοντας (για ευκολία μας με δεκαδικό λογάριθμο) η εντροπία είναι περίπου

$$S = \log\left(10^{5^{22}}\right) \approx 10^{22} \ , \tag{3.76}$$

ενώ ο ορισμός του Boltzmann $S = k_B \ln g$ περιλαμβάνει και τον συντελεστή αναλογίας k_B. Επομένως, με την εισαγωγή της έννοιας της εντροπίας του αερίου, αφ' ενός μετράμε την αταξία της ποσότητας του αερίου και αφ' ετέρου κάνουμε εύχρηστο τον ανεξέλεγκτα μεγάλο αριθμό των καταστάσεων του αερίου που μόλις υπολογίσαμε. Υπενθυμίζω επίσης στον αναγνώστη πως η εντροπία είναι εκτατική (ανάλογη του N) μεταβλητή, ώστε δύο λίτρα He έχουν διπλάσια εντροπία απ' ότι το ένα.

Άσκηση 1: Να δειχθεί ότι η εντροπία είναι

$$S = Nk_B\left[\frac{5}{2} - \ln\left(\frac{N}{V}\cdot V_Q\right)\right] \ , \tag{3.77}$$

δηλ. προκύπτει πάλι η εξίσωση Sackur-Tetrode (3.54). Η εντροπία $S = k_B \ln \mathcal{N}(N(3/2)\, k_BT)$ είναι ανάλογη του N, όταν E/ V και N/ V είναι σταθερές, ώστε να μην εμφανίζεται πλεόν το παράδοξο του Gibbs.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άσκηση 2: Να υπολογισθεί και να σχεδιασθεί η πολυσωματιακή πυκνότητα καταστάσεων ρ(Ε) του αερίου. Με ποιά δύναμη του Ε αυξάνει;

3.8. Υπολογισμός του μέσου αριθμού κατάληψης $\langle n_r \rangle$

Ο μέσος αριθμός σωματίων στη μονοσωματιακή κατάσταση $|r\rangle$ δίνεται από την σχέση

$$\langle n_r \rangle = \sum_{\{n_r\}} n_r \, p_{\{n_r\}} \ , \tag{3.78}$$

όπου το άθροισμα εκτείνεται σε όλες τις καταστάσεις των N-σωματίων $\{n_r\}$, ενώ $p_{\{n_r\}}$ είναι η πιθανότητα μιας πολυσωματιακής κατάστασης. Επομένως, στην κανονική κατανομή

$$p_{\{n_r\}} = \frac{\exp[-\beta E_{\{n_r\}}]}{Z} \tag{3.79}$$

με

$$Z = \sum_{\{n_r\}} \exp[-\beta E_{\{n_r\}}] \ , \tag{3.80}$$

για μη διακρίσιμα σωμάτια ($g_{\{n_r\}} = 1$). Από την εξ. (3.5) και (3.79) η (3.78) γράφεται

$$\langle n_r \rangle = \frac{\sum_{\{n_r\}} n_r \, e^{-\beta(n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + \ldots + n_r\varepsilon_r + \ldots)}}{\sum_{\{n_r\}} e^{-\beta(n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + \ldots + n_r\varepsilon_r + \ldots)}} \ . \tag{3.81}$$

Παρατηρούμε ότι

$$\frac{\partial Z}{\partial \varepsilon_r} = -\beta \sum_{\{n_r\}} n_r \exp[-\beta \sum_{n} n_r \, \varepsilon_r] \ , \tag{3.82}$$

ώστε

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\langle n_r \rangle = -\frac{1}{\beta}\,\frac{1}{Z}\,\frac{\partial Z}{\partial \varepsilon_r} \quad \Leftrightarrow$$

$$\boxed{\langle n_r \rangle = -\frac{1}{\beta}\,\frac{\partial \ln Z}{\partial \varepsilon_r}} \quad . \tag{3.83}$$

Είναι εύκολο, στο ίδιο πνεύμα, να υπολογισθεί και η αντίστοιχη τιμή της διασποράς στο μέσο αριθμό κατάληψης $\langle n_r \rangle$

$$\langle (\Delta n_r)^2 \rangle = \langle n_r^2 \rangle - \langle n_r \rangle^2 \ , \tag{3.84}$$

και με δεύτερη παραγώγιση

$$\langle n_r^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2 Z}\,\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \ , \tag{3.85}$$

άρα,

$$\boxed{\langle (\Delta n_r)^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2}\,\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \varepsilon_r^2} = -\frac{1}{\beta}\,\frac{\partial \langle n_r \rangle}{\partial \varepsilon_r}} \quad . \tag{3.86}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ:

Οι καταστάσεις των N-σωματίων ιδανικού αερίου χαρακτηρίζονται από το σύνολο $\{n_r\}$ των αριθμών κατάληψης των μονοσωματιακών καταστάσεων $|r>$, και έχουν ενέργεια

$$E_{\{n_r\}} = \sum_n n_r \varepsilon_r \quad , \tag{3.87}$$

ενώ ο εκφυλισμός της κάθε ενέργειας είναι

$$g_{\{n_r\}} = \frac{N!}{n_1!\, n_2! \ldots} \quad \text{ή} \quad 1 \quad , \tag{3.88}$$

αν τα σωμάτια είναι διακρίσιμα ή μη διακρίσιμα, αντίστοιχα. Η κλασσική συνάρτηση επιμερισμού στην κλασσική στατιστική (διακρίσιμα σωμάτια) είναι

$$Z = z^N , \tag{3.89}$$

όπου z είναι η συνάρτηση επιμερισμού του ενός σωματίου (κεφ. 2), ενώ στην οιονεί-κλασσική στατιστική (μη διακρίσιμα σωμάτια)

$$\boxed{Z = \frac{z^N}{N!}} \quad , \tag{3.90}$$

δηλ. διαιρεμένη με τον παράγοντα N!, που μετράει μεταθέσεις των N σωματίων. Η κλασσική ή οιονεί-κλασσική στατιστική ισχύουν όταν η μέση απόσταση ανά σωμάτιο $a = (V/N)^{1/3}$ είναι πολύ μεγαλύτερη από το μέσο μήκος κύματος De Broglie λ_{DB} ή όταν η θερμοκρασία υπερβαίνει κατά πολύ μια χαρακτηριστική θερμοκρασία. Στην οιονεί-κλασσική στατιστική υπολογίζεται η εντροπία

$$\boxed{S = Nk_B\left[\frac{5}{2} - \ln\left(\frac{N}{V}\cdot V_Q\right)\right]} \quad , \tag{3.91}$$

που είναιγνωστή ως η εξίσωση των Sackur-Tetrode (1911). Η εξ. (3.91) ισχύει για πολλά αέρια και είναι συνεπής με την απαίτηση εκτατικότητας της εντροπίας S.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ:

1. Πως ορίζεται ένα ιδανικό αέριο N μορίων; Ποιά είναι η Χαμιλτονιανή που το περιγράφει; Τι συμβαίνει στην σχετικιστική περίπτωση;

2. Ποιού είδους σωμάτια αντιμετωπίζει η κλασσική στατιστική; Ποιά η οιονεί-κλασσική στατιστική; Σε τι διαφέρει η συνάρτηση επιμερισμού στις δύο στατιστικές;

3. Να εξηγήσετε τι είναι το παράδοξο του Gibbs (που οφείλεται και πως αντιμετωπίζεται;)

4. Ποιές είναι οι συνθήκες ισχύος της κλασσικής και οιονεί-κλασσικής στατιστικής; Ποιά είναι η περιοχή θερμοκρασιών που ισχύουν οι δύο στατιστικές για μόρια (π.χ. He) και ηλεκτρόνια μετάλλων; Γιατί στη δεύτερη περίπτωση απαιτούνται υπερβολικά υψηλές θερμοκρασίες για να έχει νόημα η οιονεί-κλασσική στατιστική;

5. Λαμβάνει υπ' όψιν η οιονεί-κλασσική στατιστική την απαγορευτική αρχή του Pauli (ναι ή όχι και γιατί;)

6. Σε τι διαφέρουν τα μποζόνια από τα φερμιόνια;

7. Να εκτιμήσετε τον ολικό αριθμό καταστάσεων σωματίων ενέργειας μέχρι E για N =1 και N = 2.7 x 10^{22} σωμάτια. Πώς ορίζεται η εντροπία (σχέση αναλογίας) και με τι ισούται ο λόγος των εντροπιών στις δύο περιπτώσεις;

8. Να εκτιμήσετε τον ολικό αριθμό καταστάσεων N-σωματίων ενέργειας μέχρι E στον διδιάστατο χώρο. Ποιά είναι η εξίσωση Sackur-Tetrode σε αυτή την περίπτωση;

9. Ποιές είναι οι μονάδες της Z; Τι μετράει η Z όταν το σύστημα είναι σε θερμοκρασία T;

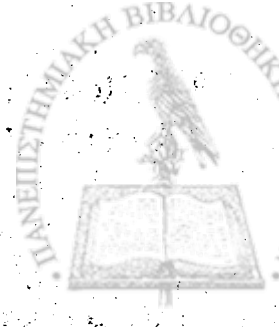
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

10. Να δείξετε πως η συνθήκη (3.65) μπορεί να ληφθεί με τρεις ανεξάρτητου τρόπους:

$\frac{N}{V} \to 0$ (σε σταθερή T ώστε $P \to 0$)

$T \to \infty$ (σε σταθερή πυκνότητα σωματίων $\frac{N}{V}$)

και $h \to 0$ (κλασσική συνθήκη).



ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

1. Ένα σύστημα αποτελείται από 2 μη αλληλεπιδρώντα μόρια. Το κάθε μόριο έχει 3 μικροκαταστάσεις ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 με ενέργειες 0, ε και 2ε (ε>0), αντίστοιχα.

(0). Να υπολογισθεί η συνάρτηση επιμερισμού του ενός σωματίου z.

(i). Να καταμετρηθούν οι επιτρεπτές καταστάσεις του συστήματος των 2 σωματίων όταν $E = 2\varepsilon$, για τις περιπτώσεις των διακρίσιμων σωματίων, μποζονίων και φερμιονίων.

(ii). Να υπολογισθεί η εντροπία S στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας με $E = 2\varepsilon$ για τα τρία είδη σωματίων.

(iii). Να υπολογισθούν όλες οι καταστάσεις στις τρεις περιπτώσεις. Υπάρχει εκφυλισμός E και ποιός είναι στην κάθε περίπτωση; Να υπολογίσετε επίσης και τις συναρτήσεις επιμερισμού $Z_{\Delta IAK}$, $Z_{M\Pi OZ}$, $Z_{\Phi EPM}$ και να δειχθεί ότι $Z_{\Delta IAK} \geq Z_{M\Pi OZ} > Z_{\Phi EPM}$ όταν T>0. Τι συμβαίνει για T = 0;

(iv). Ποιά είναι η πιθανότητα ώστε το σύστημα να έχει ενέργεια $E = 2\varepsilon$ για τα τρία είδη μορίων;

(v). Ποιά είναι η $Z_{MH\text{-}\Delta IAK}$ στην οιονεί-κλασική στατιστική; Κάτω από ποιές προϋποθέσεις η $Z_{MH\text{-}\Delta IAK} = Z_{\Delta IAK}/2!$ προσεγγίζει τέλεια τις $Z_{M\Pi OZ}$ και $Z_{\Phi EPM}$ (ισχύει $Z_{M\Pi OZ} = Z_{\Phi EPM} = Z_{MH\text{-}\Delta IAK}$);

(vi). Ποιός είναι ο λόγος ξ των πιθανοτήτων ώστε τα 2 μόρια να είναι στην ίδια ή σε διαφορετικές μονοσωματιακές καταστάσεις; Τι παρατηρείται;

Λύση:

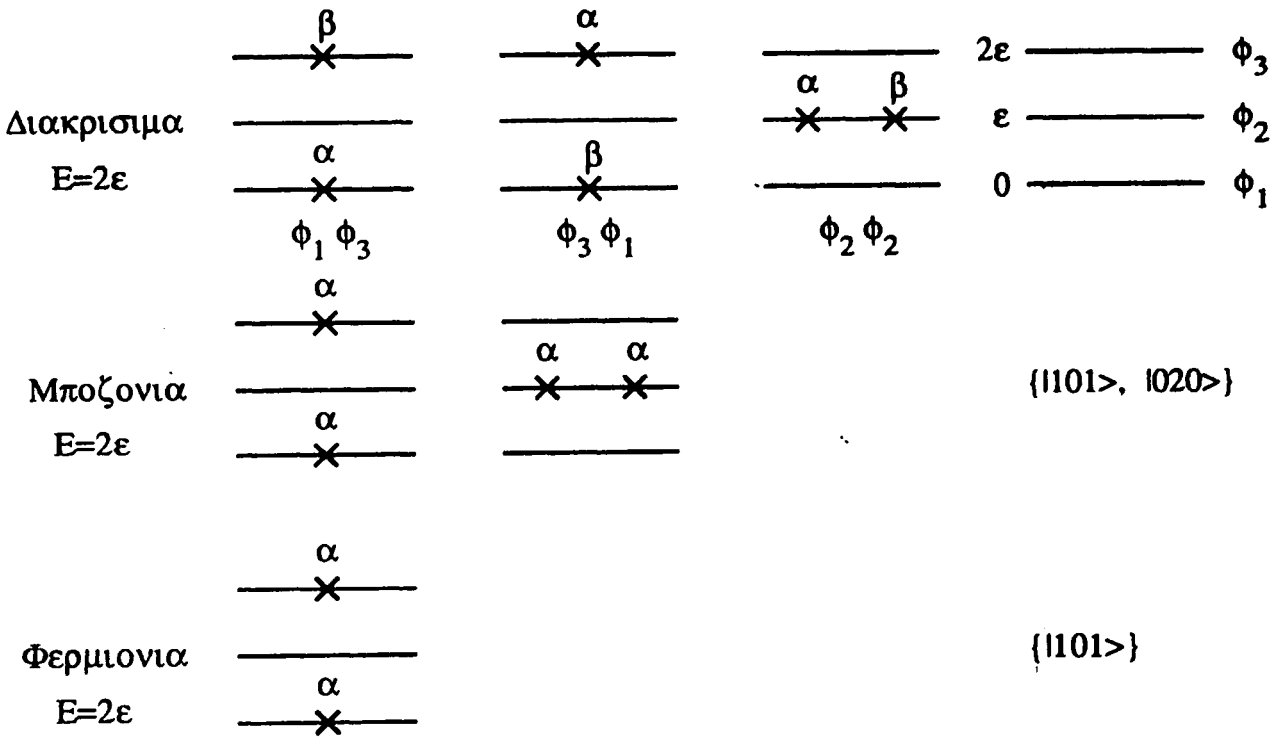
(0). $z = e^{-\beta.0} + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta.2\varepsilon} = 1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon}$

(i). Διακρίσιμα με $E = 2\varepsilon$: $\{\phi_1\phi_3, \phi_3\phi_1, \phi_2\phi_2\}$

μποζόνια με $E = 2\varepsilon$: $\{|101\rangle, |020\rangle\}$

φερμιόνια με $E = 2\varepsilon$, $\{|101\rangle\}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



(ii). $S_{\Delta IAK} = k_B \ln 3$, $S_{M\Pi OZ} = k_B \ln 2$ και $S_{\Phi EPM} = 0$.

(iii). Διακρίσιμα:

καταστάσεις: $\{\phi_1\phi_1, \phi_2\phi_2, \phi_3\phi_3, \phi_1\phi_2, \phi_2\phi_1, \phi_1\phi_3, \phi_3\phi_1, \phi_2\phi_3, \phi_3\phi_2\}$

με ενέργειες: 0 2ε 4ε ε ε 2ε 2ε 3ε 3ε,

ή E = 0, ε, 2ε, 3ε, 4ε με εκφυλισμό g = 1, 2, 3, 2, 1, αντίστοιχα.

Επομένως,

$$Z_{\Delta IAK} = (1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon})^2 = 1 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}.$$

Μποζόνια:

καταστάσεις: { |200>, |110>, |101>, |011>, |020>, |002> }

ενέργειες: 0 ε 2ε 3ε 2ε 4ε ,

άρα E = 0, ε, 2ε, 3ε, 4ε με g = 1, 1, 2, 1, 1, αντίστοιχα, και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$Z_{\text{ΜΠΟΖ}} = 1 + e^{-\beta\varepsilon} + 2e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon} = z\,(1 + e^{-2\beta\varepsilon})$$

Φερμιόνια:

καταστάσεις: { |1110>, |1101>, |1011> }

ενέργειες: $\varepsilon \quad 2\varepsilon \quad 3\varepsilon$,

άρα $E = \varepsilon,\ 2\varepsilon,\ 3\varepsilon$ με $g = 1, 1, 1$ και

$$Z_{\text{ΦΕΡΜ}} = e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} = z\ e^{-\beta\varepsilon}\ .$$

Για $T > 0$ ισχύει $Z_{\text{ΔΙΑΚ}} \geq Z_{\text{ΜΠΟΖ}} > Z_{\text{ΦΕΡΜ}}$ ενώ για $T = 0K$: $Z_{\text{ΔΙΑΚ}} = Z_{\text{ΜΠΟΖ}}$.

(iv). $P^{2\varepsilon}_{\text{ΔΙΑΚ}} = \dfrac{3\,e^{-2\beta\varepsilon}}{Z_{\text{ΔΙΑΚ}}}$, $P^{2\varepsilon}_{\text{ΜΠΟΖ}} = \dfrac{2\,e^{-2\beta\varepsilon}}{Z_{\text{ΜΠΟΖ}}}$ και $P^{2\varepsilon}_{\text{ΦΕΡΜ}} = \dfrac{e^{-2\beta\varepsilon}}{Z_{\text{ΦΕΡΜ}}}$.

(v). Η $Z_{\text{ΜΗ ΔΙΑΚ}} = \dfrac{Z_{\text{ΔΙΑΚ}}}{2!} = \dfrac{1}{2} + e^{-\beta\varepsilon} + \dfrac{3}{2}e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} + \dfrac{e^{-4\beta\varepsilon}}{2}$

δεν προσεγγίζει ικανοποιητικά τις $Z_{\text{ΜΠΟΖ}}$ και $Z_{\text{ΦΕΡΜ}}$.

Ισχύει $Z_{\text{ΜΗ-ΔΙΑΚ}} = Z_{\text{ΜΠΟΖ}} = Z_{\text{ΦΕΡΜ}}$ μόνο όταν εξαιρεθούν οι καταστάσεις δύο μορίων με πυκνοκατειλημμένες στάθμες (στην περίπτωση των διακρίσιμων σωματίων οι $\phi_1\phi_1, \phi_2\phi_2, \phi_3\phi_3$ ώστε :

$$Z_{\text{ΜΗ ΔΙΑΚ}} = \frac{1}{2}\,(2e^{-\beta\varepsilon} + 2e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon})$$

$$= e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} = Z_{\text{ΦΕΡΜ}}\ ,$$

και από τις καταστάσεις των μποζονίων αν εξαιρέσουμε τις {|200>, |020>, |002>}.

(vi). Για διακρίσιμα σωμάτια: $\xi_{\text{ΔΙΑΚ}} = \dfrac{3/9}{6/9} = \dfrac{1}{2}$,

για μποζόνια : $\xi_{\text{ΜΠΟΖ}} = \dfrac{3/6}{3/6} = 1$,

για φερμιόνια: $\xi_{\text{ΦΕΡΜ}} = \dfrac{0/6}{3/3} = 0$,

με $\xi_{\text{ΦΕΡΜ}} < \xi_{\text{ΔΙΑΚ}} < \xi_{\text{ΜΠΟΖ}}$. Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση των μποζονίων υπάρχει μεγαλύτερη σχετική τάση των σωματίων να μαζευτούν στην ίδια μονοσωματιακή κατάσταση, απ' ότι στην περίπτωση της κλασσικής στατιστικής. Προφανώς η σχετική τάση για τα φερμιόνια είναι να βρίσκονται σε ξεχωριστές μονοσωματιακές καταστάσεις, λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

2. Δύο σωμάτια αποτελούν ένα σύστημα, που είναι σε επαφή με λουτρό θερμοκρασίας Τ. Το κάθε σωμάτιο μπορεί να υπάρξει σε μία από 3 ενεργειακές στάθμες: $\varepsilon_r = r\,\varepsilon$, με r = 0, 1 και 2 με την $\varepsilon_o = 0$ διπλά εκφυλισμένη (4 συνολικά καταστάσεις). Αφού καταμετρήσετε προσεκτικά όλους τους συνδυασμούς, να υπολογίσετε τη συνάρτηση επιμερισμού Z και την ενέργεια Ε του συστήματος στις περιπτώσεις: **(i).** Boltzmann (διακρίσιμα), **(ii).** Fermi (φερμιόνια) **(iii).** Bose (μποζόνια). Να συζητήσετε τη συνθήκη ώστε τα σωμάτια Fermi και Bose μπορεί να αντιμετωπισθούν ως διακρίσιμα σωμάτια.

(Απάντηση :

(i). $Z = 4 + 4e^{-\beta\varepsilon} + 5e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}$,

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{2\varepsilon}{Z}\, e^{-\beta\varepsilon}\,(2 + 5e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon}) \ ,$$

16 συνολικά καταστάσεις.

(ii). $Z = 1 + 2e^{-\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon}\,(1 + 2e^{\beta\varepsilon})$,

$$E = \frac{\varepsilon}{Z}\, e^{-\beta\varepsilon}\,(2 + 4e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon}) \ ,$$

6 συνολικά καταστάσεις.

(iii). $Z = 3 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}$,

$$E = \frac{\varepsilon}{Z}\, e^{-\beta\varepsilon}\,(2 + 6e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + 4e^{-3\beta\varepsilon}) \ ,$$

10 συνολικά καταστάσεις.

Για να γίνει ασήμαντη η μη διακρισιμότητα πρέπει $\langle n_r \rangle << 1$ (Boltzmann).)

3. Η μέση κινητική ενέργεια του ατόμου του H_2 σε μια αστρική ατμόσφαιρα είναι 1eV. **(i)** Ποιά είναι η θερμοκρασία σε Kelvin; **(ii)** Ποιός είναι ο λόγος του αριθμού των ατόμων στην $2^{η}$ διεγερμένη στάθμη ($r = 3$, $\varepsilon_r = -\frac{13.6}{r^2}$ eV) ως προς τη βασική (r = 1); **(iii)** Ποιός είναι (ποιοτική εκτίμηση) ο αριθμός των ιονισμένων ατόμων σε σχέση με τον αριθμό στην r = 3;

(Απάντηση : **(i)** $T = \frac{2\varepsilon}{3k_B} = 7.7 \times 10^3 K$, **(ii)** $\frac{n_3}{n_1} \approx 1.33 \times 10^{-8}$,

(iii) ∞, $\frac{n_{ιον}}{n_3} \approx e^{\varepsilon_3/k_B T} \approx 0.1$) .

4. Ν διακρίσιμες μπάλλες να τοποθετηθούν σε ένα αριθμό από κουτιά. Στο πρώτο κουτί μπορούμε να βάλλουμε n_1 μπάλλες, στο δεύτερο n_2, στο τρίτο n_3,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

στο r κουτί n_r μπάλλες. Αν γεμίσουμε όλα τα κουτιά με μπάλλες ώστε $N = \sum_r n_r$ με πόσους τρόπους μπορεί να γίνει αυτό; (**Υπόδειξη:** την πρώτη μπάλλα μπορούμε να την επιλέξουμε με N τρόπους, την δεύτερη με N−1 τρόπους, κ.λ.π. ώστε ο ολικός αριθμός των τρόπων επιλογής των μπαλλών είναι N!, που είναι και ο αριθμός μεταθέσεών τους. Αντίστοιχα ο αριθμός των μεταθέσεων αυτών που είναι στο r κουτί είναι $n_r!$ Επομένως, δείξτε ότι ο ολικός αριθμός τρόπων να γεμίσουμε τα r κουτιά με N μπάλλες είναι

$$\frac{N!}{\prod_r n_r!} \quad \text{με} \quad \sum_r n_r = N \ ).$$

5. Να υπολογίσετε τις θερμοδυναμικές ιδιότητες ιδανικού μονοατομικού αερίου στην οιονεί-κλασσική στατιστική (τις E, S, C_V, P και να δείξετε την καταστατική του εξίσωση). Να επαναληφθούν οι υπολογισμοί στη σχετικιστική περίπτωση. Σε ποιά περιοχή θερμοκρασιών ισχύουν οι ληφθείσες τιμές;

6. Ένα διατομικό μόριο ενδεχομένως εκτελεί μεταφορική, περιστροφική και ταλαντωτική κίνηση. Σε μια πρώτη προσέγγιση η ενέργεια του μορίου είναι:

$$\varepsilon = \varepsilon_\mu + \varepsilon_\pi + \varepsilon_\tau + \varepsilon_e,$$

όπου ε_μ είναι η μεταφορική, ε_π η περιστροφική, ε_τ η ταλαντωτική και ε_e η ηλεκτρική του ενέργεια. Επομένως, η συνάρτηση επιμερισμού του ενός σωματίου γράφεται ως

$$Z = \sum \exp(-\beta(\varepsilon_\mu + \varepsilon_\pi + \varepsilon_\tau + \varepsilon_e))$$

$$= \sum \exp(-\beta\,\varepsilon_\mu) \sum \exp(-\beta\,\varepsilon_\pi) \sum \exp(-\beta\,\varepsilon_\tau) \sum \exp(-\beta\,\varepsilon_e) \ ,$$

και είμαστε ελεύθεροι να κάνουμε ανεξάρτητα τις αθροίσεις, εφ' όσον τα μόρια δεν αλληλεπιδρούν. Άρα,

$$z = z_\mu + z_\pi + z_\tau + z_e,$$

όπου **η μεταφορική** z_μ είναι η γνωστή z που μελετήσαμε στο κεφ. 2

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$z_\mu = V\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \quad , \text{ με } \Theta_\mu = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mk_BV^{2/3}} \quad ,$$

η περιστροφική

$$z_\pi = \sum_{J=0}^{\infty}(2J+1)\exp\left[-\frac{\hbar^2J(J+1)}{2k_BTI}\right], \text{ με } \Theta_\pi = \frac{\hbar^2}{2Ik_B},$$

και η ταλαντωτική

$$z_\tau = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)/\left(1-\exp\left(\frac{-\hbar\omega}{k_BT}\right)\right), \text{ με } \Theta_\tau = \frac{\hbar\omega}{k_B} \quad .$$

Να υπολογίσετε την Z για N πολυατομικά μόρια στην οιονεί κλασσική στατιστική. Αλλάζει η αντίστοιχη καταστατική εξίσωση (ναί ή όχι και γιατί;)

7. Το αέριο HD (υδρίδιο του δευτερίου) έχει $\Theta_\pi = 64K$, $\Theta_\tau = 5518K$ και σημείο βρασμού σε κανονικές συνθήκες 22.1K. Στην περιοχή $T \geq \Theta_\pi$ η μορφή της περιστροφικής συνάρτησης επιμερισμού είναι $z_\pi = \frac{T}{\Theta_\pi}$. Να υπολογισθούν στην ίδια περιοχή οι θερμοδυναμικές ιδιότητες E, C_V και S του διατομικού μορίου.

8. Θεωρείστε ένα μίγμα ιδανικών αερίων A, B και C. Αν τα αέρια θεωρηθούν ανεξάρτητα να υπολογίσετε την συνάρτηση επιμερισμού Z, όταν ο αριθμός των ατόμων είναι N_A, N_B και N_C, αντίστοιχα. Κάνοντας χρήση της εξίσωσης γέφυρας

$$F = -k_BT \ln Z \quad ,$$

να δείξετε ότι για το μίγμα

$$C_V = \frac{3}{2}(N_A + N_B + N_C)\,k_BT\,, \qquad PV = (N_A + N_B + N_C)\,k_BT\,, \quad .$$

που είναι ο γνωστός νόμος του Dalton για τις μερικές πιέσεις. Πότε εμφανίζεται το λογικό παράδοξο του Gibbs;

9. Ένα δοχείο περιέχει ένα χώρισμα που το διαιρεί σε δύο ίσους όγκους V και γεμίζει με N μόρια ενός αερίου στο ένα μισό και N από ένα δεύτερο αέριο στο άλλο. Να δείξετε ότι η συνάρτηση επιμερισμού του ολικού συστήματος είναι:

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$Z = \frac{z_1^N z_2^N}{(N!)^2} \quad , \quad z_i = \frac{V}{V_Q^{(i)}} \, .$$

Πώς τροποποιείται αυτή η έκφραση όταν μετακινείται το χώρισμα; Με χρήση της σχέσης $S = k_B T \, (\partial \ln Z / \partial T)_{V,N} + k_B \ln Z$ να υπολογίσετε την "εντροπία ανάμιξης", δηλ. την αύξηση στην εντροπία όταν αφαιρεθεί το χώρισμα. Να εξηγήσετε γιατί πρέπει να γίνουν τροποποιήσεις στην περιγραφή μας όταν τα δύο αέρια είναι ίδια.

10. Να αντιμετωπισθεί το κλασσικό ιδανικό αέριο με την παρουσία βαρύτητας, ώστε να προστεθεί ο όρος mgh σε κουτί ύψους L και διατομής A.
(i). Να υπολογίσετε την πυκνότητα πιθανότητας ρ(ε,h), όπου ρ(ε,h) dε dh είναι η πιθανότητα ένα άτομο να έχει κινητική ενέργεια στό [ε, ε+dε] και ύψος στο [h,h + dh].
(ii). Να δείξετε ότι η νέα μορφή στο όριο $g \to 0$ μεταπίπτει στην γνωστή.
(iii). Να υπολογίσετε την κατανομή πιθανότητας του ύψους ανεξάρτητα από την ορμή ή την ορίζουσα θέση.

11. Να υπολογίσετε την έκφραση για τη θερμοχωρητικότητα αερίου ατόμων, όπου το καθένα εκτελεί μεταφορική και ηλεκτρονική κίνηση, με ηλεκτρονική συνάρτηση επιμερισμού

$$z_n = g_o + g_1 \exp(-\varepsilon_1 / k_B T),$$

όπου g_1 και g_2 είναι οι εκφυλισμοί. Να δείξετε ότι σε υψηλές και χαμηλές θερμοκρασίες η ηλεκτρική συνεισφορά γίνεται μηδέν. Γιατί συμβαίνει αυτό;

12. Θεωρείστε ένα πλέγμα με N άτομα σπιν 1/2 σε μαγνητικό πεδίο N. Αν τα σπιν έχουν δύο καταστάσεις ενέργειας $-\mu_o H$ για σπιν (↑) και $+\mu_o H$ για σπιν (↓), ενώ το σύστημα είναι σε θερμοκρασία T. Να υπολογίσετε τη συνάρτηση επιμερισμού z για το σύστημα, την Z, την ολική μαγνήτιση $M = \mu_o(n\uparrow - n\downarrow)$ και την εντροπία S ($n\uparrow$ και $n\downarrow$ είναι οι αριθμοί κατάληψης των μονοσωματιακών σταθμών με σπιν ↑ και ↓, αντίστοιχα).

13. Να υπολογίσετε τη συνάρτηση επιμερισμού z για ένα σύστημα N ανεξάρτητων σωματίων σε πεδίο H. Αν το κάθε σωμάτιο έχει μαγνητική ροπή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

mμ κατά μήκος του πεδίου, m = J, J−1,...,−J+1, −J, όπου J είναι ένας ακέραιος και μ σταθερά. Το σύστημα είναι σε θερμοκρασία T.

(i). Να βρείτε τη μέση μαγνήτιση <M> του υλικού.

(ii). Την ασυμπτοτική έκφραση της <M> για μεγάλες T.

14. Θεωρείστε ένα σύστημα N μη-αλληλεπιδρώντων σωματίων (N>>1) στο οποίο η ενέργεια του κάθε σωματίου έχει δύο μόνο διακριτές τιμές 0 και ε (ε > 0). Αν οι αριθμοί κατάληψής τους είναι n_o και n_1, αντίστοιχα, ενώ η ολική ενέργεια του συστήματος είναι E να βρείτε:

(i). Την εντροπία του συστήματος

(ii). Τη θερμοκρασία σαν συνάρτηση της E. Σε ποιά περιοχή τιμών n_o ισχύει T<0;

(iii). Σε ποιά κατεύθυνση ρέει η θερμότητα όταν σύστημα με αρνητική T έλθει σε επαφή με ένα σύστημα θετικής T; Γιατί;

(**Απάντηση:** **(i).** $S = k_B \ln\left(\frac{N!}{n_o! n_1!}\right)$, **(ii).** $n_1/n_o = \exp(-\varepsilon/k_B T)$ και $T = \frac{\varepsilon}{k_B \ln\left(\frac{N\varepsilon - E}{E}\right)}$ ώστε όταν $n_o < N/2$ ισχύει T<0).

15. Ένα ensemble αποτελείται από 18 διακρίσιμα μόρια ενέργειας E = 6ε και σταθερού όγκου, ώστε τα επί μέρους μόρια να μπορούν να καταλάβουν τις στάθμες 0, ε και 2ε με αριθμούς κατάληψης n_o, n_1 και n_2 αντίστοιχα. Να δείξετε ότι οι καταστάσεις των 18 μορίων με ενέργεια E είναι 4 και να υπολογισθεί ο εκφυλισμός της κάθε μιας από αυτές καθώς και η εντροπία της. Ποιά είναι η πιο πιθανή κατανομή για τους n_o/N, n_1/N, n_2/N;

(**Υπόδειξη :** Ο εκφυλισμός είναι $N!/(n_1!\, n_2! \ldots n_r! \ldots)$)

16. Να κατανείμετε τρία διακρίσιμα σωμάτια (α, β, γ) σε 4 εκφυλισμένες μονοσωματιακές καταστάσεις ίδια ενέργειας ε. Να καταγράψετε τις 64 δυνατές διευθετήσεις και να δείξετε πόσες παραμένουν στις περιπτώσεις των μποζονίων και των φερμιονίων. (**Απάντηση :** 20 για μποζόνια και 4 για φερμιόνια).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ BOLTZMANN

4.1. Η κλασσική δυναμική περιγραφή
4.2. Η κλασσική συνάρτηση επιμερισμού Z
4.3. Τα πολυατομικά ιδανικά αέρια και το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας
4.4. Κατανομή μοριακών ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΛΑΣΣΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ BOLTZMANN

4.1. Η κλασσική δυναμική περιγραφή

Η στατιστική φυσική στα πλαίσια της κλασσικής μηχανικής για την περιγραφή του μικρόκοσμου εμφανίζεται με δύο μορφές: την κλασσική στατιστική και στην βελτιωμένη της μορφή την γνωστή και ως οιονεί-κλασσική στατιστική, όπου λαμβάνεται υπ' όψιν η κβαντική ιδιότητα της μη διακρισιμότητας των σωματίων. Η κλασσική στατιστική είναι επίσης γνωστή και ως στατιστική Boltzmann ή στατιστική Maxwell-Boltzmann (MB). Αφετηρία της μελέτης αποτελεί η κλασσική δυναμική περιγραφή των σωματίων μέσω της ενέργειας

$$\mathbf{E = H\ (q,\ p)} \quad , \tag{4.1}$$

που είναι η γνωστή συνάρτηση του Hamilton H βασικής σημασίας στην κλασσική μηχανική. Η H εκφράζεται συναρτήσει των συντεταγμένων των θέσεων

$$q \equiv \{\vec{q}_1\ (x_1, y_1, z_1), \vec{q}_2\ (x_2, y_2, z_2),\ \ldots,\ \vec{q}_N\ (x_N, y_N, z_N)\} \tag{4.2}$$

και ορμών

$$p \equiv \{\vec{p}_1\ (p_{x_1}, p_{y_1}, p_{z_1}), \vec{p}_2\ (p_{x_2}, p_{y_2}, p_{z_2}),\ \ldots,\ \vec{p}_N\ (p_{x_N}, p_{y_N}, p_{z_N})\}, \tag{4.3}$$

που καθορίζουν μία κατάσταση του συστήματος. Το σύστημά μας που αποτελείται από N σημειακά σωμάτια στον d = 3-διάστατο χώρο έχει συνολικά 3 N βαθμούς ελευθερίας ενώ κάθε κατάστασή του περιγράφεται από ένα σημείο στον 6N-διάστατο φασικό χώρο. Είναι προφανές ότι για N = 1 το σωμάτιο κινείται στον τρισδιάστατο χώρο των 3 βαθμών ελευθερίας και περιγράφεται από ένα σημείο στον 6-διάστατο φασικό χώρο των θέσεων $\vec{q}_1\ (x_1, y_1, z_1)$ και των ορμών $\vec{p}_1\ (p_{x_1}, p_{y_1}, p_{z_1})$.

Στην εξίσωση (4.1) υπάρχει έμμεσα και η χρονική εξάρτηση των συντεταγμένων $(p, q)_t \equiv (p(t), q(t))$ αλλά επειδή θα μελετήσουμε συντηρητικά (ή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αυτόνομα) συστήματα που διατηρούν την ενέργεια, ο χρόνος t δεν θα είναι μιά εμφανής μεταβλητή. Ενδιαφέρον παρουσιάζουν, επίσης, και τα μη συντηρητικά σύστήματα όπου η εξάρτηση από τον χρόνο t είναι άμεση. Η κλασσική δυναμική περιγραφή δίνεται από τις εξισώσεις κίνησης του Hamilton

$$\boxed{\frac{d\vec{q}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i}} \quad \text{ή} \quad \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{x_i}}, \quad \frac{dy_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{y_i}}, \quad \frac{dz_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{z_i}} \qquad (4.4)$$

$$\boxed{\frac{d\vec{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i}} \quad \text{ή} \quad \frac{dp_{x_i}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \quad \frac{dp_{y_i}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial y_i}, \quad \frac{dp_{z_i}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial z_i}, \qquad (4.5)$$

$i = 1, 2, \ldots, N$, για τα σύνολα των συντεταγμένων θέσεων και ορμών (εξ. 4.2, 4.3). Μία από τις πιο μεγάλες επιτυχίες της κλασσικής μηχανικής είναι η δυνατότητα να εκφράζει τους νόμους της μέσω μίας και μοναδικής παραμέτρου, της Χαμιλτονιανής. Οι εξ. (4.4) και (4.5) είναι 1ης τάξης διαφορικές εξισώσεις και μπορεί να ολοκληρωθούν στο χρόνο (όταν η αναλυτική επίλυση δεν είναι εφικτή υπάρχουν απλές αριθμητικές τεχνικές, με τις οποίες επιλύονται εισάγοντας ένα χρονικό βήμα Δt). Έτσι σε κάθε χρονική στιγμή t γνωρίζουμε το ακριβές σημείο των συντεταγμένων $(p, q)_t \equiv (x_1(t), y_1(t), z_1(t), x_2(t), y_2(t), z_2(t), \ldots, p_{x_1}(t), p_{y_1}(t), p_{z_1}(t), p_{x_2}(t), p_{y_2}(t), p_{z_2}(t), \ldots)$, του 6N-διάστατου φασικού χώρου που περιγράφει το σύστημα, εφ' όσον φυσικά γνωρίζουμε τις συντεταγμένες για $t = 0$. Επομένως η γνώση των εξισώσεων του Hamilton και των αρχικών συνθηκών $((p, q)_{t=0})$ επιτρέπουν τον υπολογισμό της κλασσικής κατάστασης του συστήματος $((p, q)_t)$ για κάθε t, με όση ακρίβεια το επιθυμούμε.

Άσκηση 1: Να αποδειχθεί ότι η ενέργεια E συντηρητικού συστήματος παραμένει σταθερή για κάθε χρονική στιγμή t:

Λύση:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \left(\frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_{x_i}} \frac{dp_{x_i}}{dt} \right) + \left(\frac{\partial H}{\partial y_i} \frac{dy_i}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_{y_i}} \frac{dp_{y_i}}{dt} \right) \right.$$

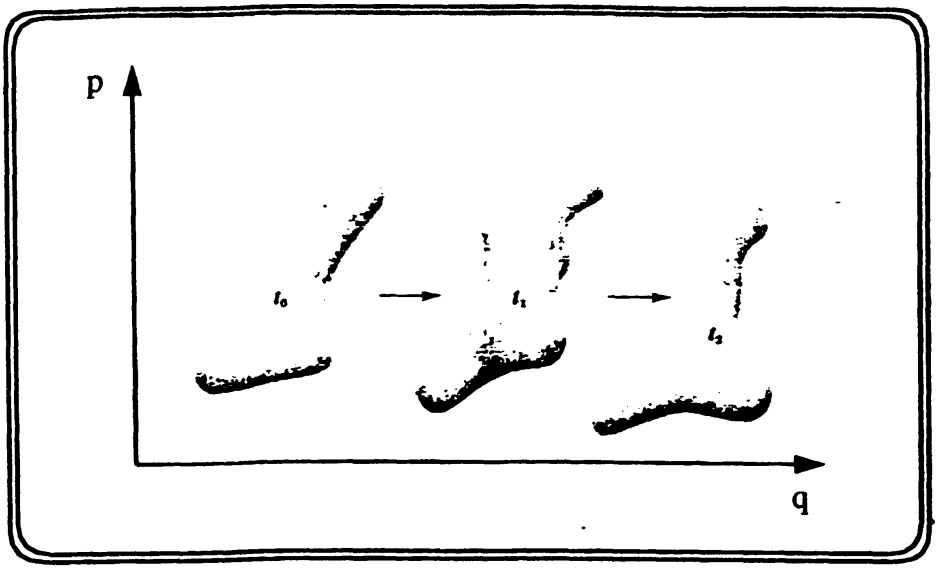
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$+\left(\frac{\partial H}{\partial z_i}\frac{dz_i}{dt}+\frac{\partial H}{\partial p_{z_i}}\frac{dp_{z_i}}{dt}\right)\Bigg\}$$

$$=\sum_{i=1}^{N}\left\{\left(\frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{\partial H}{\partial p_{x_i}}-\frac{\partial H}{\partial p_{x_i}}\frac{\partial H}{\partial x_i}\right)+\left(\frac{\partial H}{\partial y_i}\frac{\partial H}{\partial p_{y_i}}-\frac{\partial H}{\partial p_{y_i}}\frac{\partial H}{\partial y_i}\right)\right.$$

$$\left.+\left(\frac{\partial H}{\partial z_i}\frac{\partial H}{\partial p_{z_i}}-\frac{\partial H}{\partial p_{z_i}}\frac{\partial H}{\partial z_i}\right)\right\}=0 \quad . \tag{4.6}$$

Προφανώς για να καταλήξουμε στο αποτέλεσμα (4.6), που δηλώνει την διατήρηση της ενέργειας σε $\forall t$ χρησιμοποιήσαμε το σύνολο των εξισώσεων Hamilton (4.4) και (4.5). Επιπλέον, οι τρείς παρενθέσεις στο άθροισμα αποτελούν την αγκύλη Poisson, π.χ. για την f με την H, $[f,H] = \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial H}{\partial p_{x_i}}-\frac{\partial f}{\partial p_{x_i}}\frac{\partial H}{\partial x_i}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial y_i}\frac{\partial H}{\partial p_{y_i}}-\frac{\partial f}{\partial p_{y_i}}\frac{\partial H}{\partial y_i}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial z_i}\frac{\partial H}{\partial p_{z_i}}-\frac{\partial f}{\partial p_{z_i}}\frac{\partial H}{\partial z_i}\right)$, ενώ η συνθήκη διατήρησης της f εκφράζεται ως $[f,H] = 0$. Δείτε πως στην εξίσωση (4.6) έχουμε $[H,H] = 0$.



Σχ. 4.1. Ο όγκος του φασικού χώρου διατηρείται σε κάθε χρονική στιγμή t.

Για να επιτύχουμε την σύνδεση της δυναμικής με την θερμοδυναμική είναι χρήσιμη η εισαγωγή του στατιστικού ensemble. Με άλλα λόγια αντί για ένα μόνο δυναμικό σύστημα μπορούμε να θεωρήσουμε μία συλλογή από συστήματα που αντιστοιχούν στην ίδια Χαμιλτονιανή H. Η επιλογή τους

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

βασίζεται στις εξωτερικές συνθήκες (π.χ. απομονωμένο ή σε επαφή με λουτρό) και στην γνώση των αρχικών συνθηκών Α.Σ. Εάν οι Α.Σ. είναι καλά ορισμένες τότε το ensemble είναι συγκεντρωμένο σε ένα σημείο του φασικού χώρου. Εάν όχι τότε καταλαμβάνει μία ευρεία περιοχή και αναπαρίσταται με ένα νέφος σημείων στον φασικό χώρο, με το ρ(q,p) dq dp να δηλώνει την πιθανότητα εύρεσης σε χρόνο t ενός σημείου στον στοιχειώδη όγκο dq dp, ενώ ρ(q,p) είναι η πυκνότητα των σημείων. Μέσω των εξισώσεων του Hamilton (4.4, 4.5) μπορούμε να δείξουμε πως

$$\sum_{i=1}^{N} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{dx_i}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial p_{x_i}} \left(\frac{dp_{x_i}}{dt} \right) \right) + \left(\frac{\partial}{\partial y_i} \left(\frac{dy_i}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial p_{y_i}} \left(\frac{dp_{y_i}}{dt} \right) \right) + \left(\frac{\partial}{\partial z_i} \left(\frac{dz_i}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial p_{z_i}} \left(\frac{dp_{z_i}}{dt} \right) \right) \right\} = 0 \ , \qquad (4.7)$$

που σημαίνει ότι ο όγκος του φασικού χώρου διατηρείται στον χρόνο (θεώρημα Liouville, δείτε το Σχ. 4.1). Από την εξ. (4.7) μπορεί να δειχθεί πως η πυκνότητα του φασικού χώρου ρ(q,p) υπακούει στην γνωστή εξίσωση του Liouville, που μπορεί να γραφεί στην μορφή

$$\frac{\partial \rho(q,p)}{\partial t} = [H, \rho] \ . \qquad (4.8)$$

Άσκηση 2: Να δοθεί η κλασσική δυναμική περιγραφή στο απλό παράδειγμα του μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή (N = 1) με συντεταγμένες (x, p_x) :

Λύση:

Η Χαμιλτονιανή είναι

$$E = H(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \text{σταθ.} \ , \qquad (4.9)$$

όπου m είναι η μάζα, ω η γωνιακή ταχύτητα ($=\sqrt{\frac{K}{m}}$, με K την σταθερά του ελατηρίου). Οι αντίστοιχες εξισώσεις του Hamilton στον διδιάστατο φασικό χώρο είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_x} \tag{4.10}$$

$$\frac{dp_x(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \tag{4.11}$$

και μπορεί να γραφούν, παραγωγίζοντας (μερικώς) την H, ως

$$\dot{x}(t) = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x(t)}{m} \tag{4.12}$$

$$\dot{p}_x(t) = -\frac{\partial H}{\partial x} = m\,\omega^2\, x(t)\,, \tag{4.13}$$

που συμπτύσσονται, παραγωγίζοντας ως προς t την (4.12), στην εξίσωση

$$\boxed{\ddot{x}(t) + \omega^2\, x(t) = 0}\ . \tag{4.14}$$

Η γενική λύση της εξ. (4.14) είναι (κατά τα γνωστά)

$$x(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t) \tag{4.15}$$

$$p_x(t) = m\,\dot{x}(t) = m\omega\,(A\cos(\omega t) - B\sin(\omega t))\ . \tag{4.16}$$

Αν δεχθούμε τις αρχικές συνθήκες (Α.Σ.)

$$x(0) = x_o \qquad \text{και} \qquad p_x(t) = 0\ , \tag{4.17}$$

τότε από την (4.15) προσδιορίζονται αμέσως οι δύο σταθερές

$$x_o = 0 + B \qquad \Rightarrow B = x_o \tag{4.18}$$

και από την (4.16)

$$p_x(0) = 0 = Am\omega \qquad \Rightarrow A = 0\ , \tag{4.19}$$

που υπάρχουν στη γενική λύση (4.15), (4.16). Άρα, με τις δεδομένες Α.Σ.

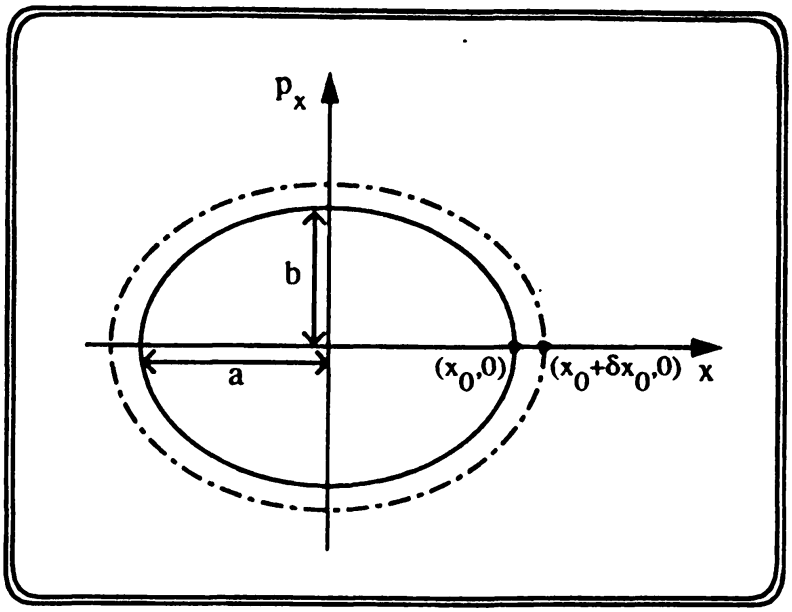
$$x(t) = x_o\cos(\omega t) \tag{4.20}$$

και

$$p_x(t) = -m\omega\, x_o \sin(\omega t), \tag{4.21}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

είναι οι λύσεις των (4.10) και (4.11). Ο φασικός χώρος στο πρόβλημα αυτό φαίνεται στο Σχ. 4.2.



Σχ. 4.2. Ο διδιάστατος φασικός χώρος (x, p_x) στην περίπτωση του μονοδιάστατου απλού αρμονικού ταλαντωτή. Το σημείο με συντεταγμένες $(x_0,0)$ είναι οι Α.Σ. που επιλέχθηκαν (εξ.4.17), ενώ για διάφορες χρονικές στιγμές t το σωμάτιο διαγράφει μιά έλλειψη. Με την διακεκομμένη γραμμή παρίσταται η τροχιά σωματίου με ΑΣ τις $(x_0 + \delta x_0,0)$ για μικρό $\delta x_0 << x_0$. Προφανώς το σωμάτιο έχει, τώρα, μεγαλύτερη ενέργεια Ε.

Η κίνηση του σωματίου για διάφορες χρονικές στιγμές t γίνεται επί της ελλείψεως του σχήματος 4.2 αφού από την εξ. (4.9) προκύπτει η σχέση

$$\frac{x^2}{(2E/m\omega^2)} + \frac{p_x^2}{2mE} = 1\,, \qquad (4.22)$$

με

$$a = \sqrt{2E/m\,\omega^2} \quad \text{και} \quad b = \sqrt{2mE}\,, \qquad (4.23)$$

τις ακτίνες μιας έλλειψης. Είναι, επίσης, εύκολο να υπολογισθεί και το εμβαδόν της έλλειψης

$$\pi\, a\, b = \frac{2\pi\, E}{\omega}\,, \qquad (4.24)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

που είναι ανάλογο της ενέργειας Ε. Προφανώς επειδή η Ε είναι η ίδια για κάθε t, άρα και για $t = 0$, έχουμε από την (4.9) στις Α.Σ. $(x_0, 0)$

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2, \tag{4.25}$$

ενώ για την περίπτωση των Α.Σ. $(x_0 + \delta x_0, 0)$

$$\frac{1}{2} m \omega^2 (x_0 + \delta x_0)^2 \approx \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 + m \omega^2 x_0 \cdot \delta x_0$$

$$= E + \delta E, \qquad \text{όταν } x_0 << \delta x_0. \tag{4.26}$$

Επομένως, μπορούμε να συμπεράνουμε πως ένα μικρό σφάλμα δx_0 στις Α.Σ. συνεπάγεται από την εξ. (4.25) το επίσης μικρό σφάλμα από την σχέση αναλογίας

$$\delta E = m \omega^2 x_0 \cdot \delta x_0$$

$$\propto \sqrt{E} \cdot \delta x_0 , \tag{4.27}$$

στον υπολογισμό της ενέργειας Ε του συστήματος. Παρατηρούμε πως αν η Ε είναι γνωστή με κάποιο σφάλμα δΕ τότε η ελειπτική τροχιά θα αποκτήσει πάχος (Σχ. 4.2)

$$\delta x_0 \propto \frac{\delta E}{\sqrt{E}} , \tag{4.28}$$

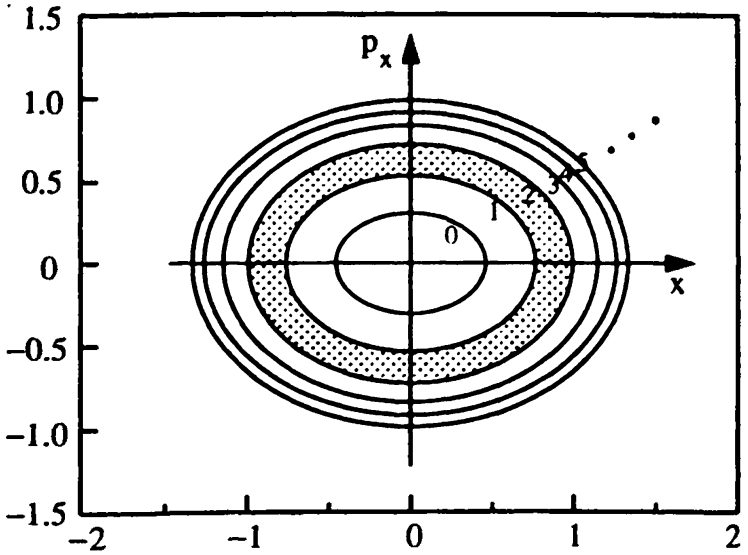
ενώ για κάθε σταθερή τιμή της Ε αντιστοιχεί μία (και μοναδική) ελλειπτική τροχιά.

Απομένει τώρα να επιτύχουμε επαφή με την κβαντική μηχανική του συστήματός μας. Π.χ. στην περίπτωση κβαντικού μονοδιάστατου απλού αρμονικού ταλαντωτή της Άσκησης 2 οι ενέργειες παίρνουν τις κβαντισμένες τιμές

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) , \; n = 0, 1, 2, \ldots , \tag{4.29}$$

όπου $\hbar = h/2\pi$, με h την σταθερά του Planck. Επομένως από κβαντική άποψη υπάρχουν μόνο ορισμένες παραδεκτές ελλειπτικές τροχιές (Σχ. 4.3)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 4.3. Οι κλασσικές ελλειπτικές τροχιές που αντιστοιχούν στις κβαντισμένες τιμές της ενέργειας (εξ. 4.29). Το εμβαδόν μεταξύ δύο ελλείψεων είναι σταθερό και ίσο με h.

Είναι εύκολο να υπολογίσουμε το εμβαδόν μεταξύ δύο διαδοχικών ελλείψεων στο Σχ. 4.3.

$$\frac{2\pi}{\omega} E_{n+1} - \frac{2\pi}{\omega} E_n = \frac{2\pi}{\omega} \hbar\omega(n+1+\frac{1}{2}) - \frac{2\pi}{\omega} \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$$

$$= 2\pi\hbar$$

$$= h \ , \qquad (4.30)$$

που για $n = 2$ δίνεται από το γραμμοσκιασμένο εμβαδό του Σχ.4.3. Άρα, σε κάθε μία κβαντική κατάσταση με ενέργεια E_n αντιστοιχεί "όγκος" του φασικού χώρου h, όπως έχουμε ήδη δείξει στο Κεφ.2. Προφανώς στο κλασσικό όριο $h \to 0$ το φάσμα ενεργειών γίνεται συνεχές (οι ελλείψεις πυκνώνουν) και κάθε ενέργεια E είναι επιτρεπτή, σύμφωνα με την κλασσική μηχανική.

4.2. Κλασσική συνάρτηση επιμερισμού Z

Στην περιγραφή του Κεφ. 4.1. η ολική Χαμιλτονιανή έχει την γενική μορφή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$H = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{N}(p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2 + p_{z_i}^2) + V_N(x_1, y_1, \ldots, z_N)\,, \qquad (4.31)$$

όπου υποθέτουμε μόνο μεταφορική κίνηση των N-σωματίων* και δυναμική ενέργεια $V_N = 0$, εφ' όσον παραδεχθούμε συνθήκες ιδανικού αερίου. Ποιά, όμως, είναι η συνάρτηση επιμερισμού Z για τα N σωμάτια με βάση την κλασσική περιγραφή; Το αποτέλεσμα είναι

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \ldots \int dp\, dq\, e^{-\beta H(p,q)}$$

$$= \frac{1}{N!h^{3N}} \left(\prod_{i=1}^{N} \int d^3\vec{p}_i\, d^3\vec{q}_i\right) e^{-\beta H(p,q)}\,, \qquad (4.32)$$

όπου το πολλαπλό ολοκλήρωμα περιλαμβάνει τις 6N-μεταβλητές του φασικού χώρου (εξ. 4.2 και εξ. 4.3). Για ένα σωμάτιο (N = 1) ισχύει

$$z = \frac{1}{h^3} \int d^3\vec{p}_1\, d^3\vec{q}_1 \exp[-\beta H(\vec{p}_1, \vec{q}_1)]$$

$$= \frac{1}{h^3} \int\int\int\int\int\int dx_1 dy_1 dz_1 dp_{x_1} dp_{y_1} dp_{z_1} \exp[-\beta H(x_1, y_1, z_1, p_{x_1}, p_{y_1}, p_{z_1})], \qquad (4.33)$$

με όρια ολοκλήρωσης των 6 μεταβλητών τα $-\infty$ και $+\infty$.

Στην εξ. (4.32) οδηγηθήκαμε με βάσει τις εξής παραδοχές:

(i). Το άθροισμα στις διακριτές καταστάσεις μέσω της στατιστικής Boltzmann αντικαθίσταται με ολοκλήρωμα στο συνεχές φάσμα τιμών q και p που περιγράφουν τις συντεταγμένες θέσεων και ορμών.

(ii). Το ολοκλήρωμα διαιρείται με N! στα πλαίσια της οιονεί-κλασσικής στατιστικής που βελτιώνει την αμιγώς κλασσική περιγραφή λαμβάνοντας υπ' όψιν και την μη διακρισιμότητα των σωματίων**.

(iii). Ο φασικός χώρος $dx \cdot dp_x$ πρέπει να διαιρεθεί με το h (παρ' όλο που είναι συνεχής), αν θέλουμε να ισχύει η αρχή της απροσδιοριστίας $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$ που δεν επιτρέπει τον ορισμό των x, p_x με ακρίβεια μεγαλύτερη της h. Έτσι, $dx\, dp_x / h$ είναι ο αριθμός των καταστάσεων που αντιστοιχούν στον στοιχειώδη όγκο $dx \cdot dp_x$.

---

* Δεχόμαστε μονοατομικά σωμάτια.

** Είδαμε ότι χωρίς τον παράγοντα N! εμφανίζεται το παράδοξο του Gibbs (Κεφ.3)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(iv). Σε κάθε κβαντική κατάσταση αντιστοιχεί όγκος h^{3N} στον 6N-διάστατο φασικό χώρο του συστήματος των N-σωματίων.

Οι παραπάνω συνθήκες (i)-(iv) είναι απολύτως απαραίτητες για να πάρουμε σωστά αποτελέσματα.

Άσκηση1: Να υπολογισθεί η κλασσική συνάρτηση επιμερισμού για το μονοατομικό ιδανικό αέριο N-σωματίων που κινούνται ελεύθερα σε χώρο όγκου V (ισχύει η εξ. 4.31).

Λύση:

Η κλασσική συνάρτηση επιμερισμού είναι

$$Z = \frac{1}{N!\,h^{3N}} \int \ldots \int dx_1\, dy_1 \ldots dp_{z_N}\, e^{-\beta H}$$

$$= \frac{1}{N!\,h^{3N}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-p^2/2mk_BT]\, dp \right]^{3N} \int \ldots \int dx_1 dy_1 \ldots dz_N\,, \quad (4.34)$$

λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι αποτελείται από ένα 3N-διάστατο ολοκλήρωμα στο χώρο των θέσων και ένα 3N-διάστατο ολοκλήρωμα στο χώρο των ορμών, με το δεύτερο να ανάγεται σε γινόμενο 3N ολοκληρωμάτων Gauss. Το δεύτερο 3N-διαστάσεων ολοκλήρωμα είναι V^N, όπου V είναι ο όγκος του χώρου, άρα

$$Z = \frac{1}{N!\,h^{3N}} \left(\sqrt{\pi 2mk_BT}\right)^{3N} V^N$$

$$= \frac{V^N}{N!} \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3N/2}$$

$$= \frac{z^N}{N!} \quad (4.35)$$

που είναι, το ήδη, γνωστό αποτέλεσμα του Κεφ.3.

Άσκηση 2: Να υπολογισθεί η κλασσική συνάρτηση επιμερισμού για τον μονοατομικό απλό αρμονικό ταλαντωτή.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Λύση:

$$z = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_x\, dx\, \exp[-\beta(p_x^2/2m + \frac{1}{2} m\,\omega^2 x^2)]$$

$$= \frac{1}{h}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dp_x \exp[-(\beta/2m)\, p_x^2]\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dp_x\, \exp[-(\beta\, m\,\omega^2/2)x^2]\right)$$

$$= \frac{1}{h}\sqrt{\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}}\sqrt{\frac{\pi\, 2m}{b}}$$

$$= \frac{2\pi}{h\beta\omega} = \frac{k_B T}{\hbar\omega} . \qquad (4.36)$$

Η εξ. (4.36) προκύπτει από την κβαντική συνάρτηση επιμερισμού

$$z = \sum_r \exp[-\beta\,\hbar\omega\,(r + \frac{1}{2})]$$

$$= \frac{\exp[-\beta\,\hbar\omega/2]}{1 - \exp[-\beta\,\hbar\omega]} , \qquad (4.37)$$

στο όριο $\beta\,\hbar\omega \to 0$. (Δείχνεται εύκολα αν αναπτύξετε τα εκθετικά με τον τύπο $e^{-x} \approx 1 - x$, στο όριο $x \to 0$). Υπολογίζεται επίσης η μέση ενέργεια του ταλαντωτή στο ίδιο όριο

$$\langle\varepsilon\rangle = k_B T , \qquad (4.38)$$

ενώ για σύστημα N-ταλαντωτών

$$z = \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right)^N . \qquad (4.39)$$

Προφανώς για N τρισδιάστατους ταλαντωτές στο κλασσικό όριο

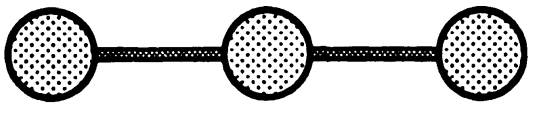
$$z = \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right)^{3N} . \qquad (4.40)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

4.3. Τα πολυατομικά ιδανικά αέρια και το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας.

Το ιδανικό αέριο που περιγράψαμε μέχρι τώρα βασίζεται στην Χαμιλτονιανή Η της εξ. (4.31) με απουσία της δυναμικής ενέργειας των σωματίων. Στην απλοποιημένη αυτή περιγραφή το κάθε σωμάτιο (μόριο) αποτελείται από 1 άτομο στο οποίο αντιστοιχούν, στον συνήθη τρισδιάστατο χώρο, 3 θέσεις και 3 ορμές. Είναι όμως ενδιαφέρον να διερευνήσουμε περαιτέρω το κλασσικό ιδανικό αέριο συμπεριλαμβάνοντας και εσωτερικούς βαθμούς ελευθερίας των μορίων. Π.χ. αν το κάθε μόριο αποτελείται από $s = 5$ άτομα θα υπάρχει και η δυνατότητα στροφών και ταλαντώσεων ως προς την κίνηση του κέντρου μάζας του μορίου. Άρα, το κάθε μόριο μπορεί να περιγραφεί κλασσικά με $3s$ συντεταγμένες θέσεων και $3s$ συντεταγμένες ορμών, που μπορεί να αναχθούν σε 3 συντεταγμένες θέσεων και 3 συντεταγμένες ορμών για το ΚΜ που περιγράφει συνολικά την κίνηση του μορίου. Απομένουν όμως και οι $3s - 3$ συντεταγμένες θέσεων και $3s - 3$ συντεταγμένες ορμών που αφορούν αποκλειστικά εσωτερικούς βαθμούς ελευθερίας του μορίου και περιλαμβάνουν στροφές και ταλαντώσεις ως προς το ΚΜ.

Εδώ είναι απαραίτητη η διάκριση των πολυατομικών μορίων σε δύο είδη:
(i). Γραμμικά μόρια, όπου μόνο 2 βαθμοί ελευθερίας μπορεί να αποδοθούν σε στροφές (αφού στροφές ως προς τον τρίτο άξονα που εκτείνεται το μόριο και υπάρχουν οι ατομικές μάζες δεν αλλάζουν, προφανώς, τις ατομικές θέσεις). Άρα απομένουν $3s - 3 - 2 = 3s - 5$ συντεταγμένες

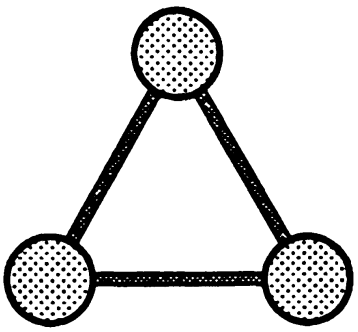


Σχ.4.4. Γραμμικό μόριο.

θέσεων και $3s - 5$ συντεταγμένες ορμών για να περιγράψουν τις ταλαντώσεις ως προς το ΚΜ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(ii). Μη γραμμικά μόρια, όπου οι βαθμοί ελευθερίας των στροφών είναι 3 και επομένως 3 s – 6 είναι οι επιπλέον συντεταγμένες θέσεων και 3 s – 6 οι συντεταγμένες των ορμών.



Σχ. 4.5. Μη γραμμικό μόριο

Θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας (ΘΙΚ): Σε κάθε τετράγωνο θέσης ή ορμής στην κλασσική Χαμιλτονιανή H(p, q) αντιστοιχεί ο όρος $k_B T/2$ στην μέση ενέργεια του συστήματος και η συνεισφορά $R/2$ στην θερμοχωρητικότητα ανά γραμμομόριο.

Απόδειξη:

Θα αποδείξουμε το ΘΙΚ απομονώνοντας έναν τετραγωνικό όρο της Χαμιλτονιανής H μέσω της

$$H(p, q) = H'(p', q') + \frac{p_{x_4}^2}{2m_4} \quad . \tag{4.41}$$

Ο τετραγωνικός όρος που απομονώθηκε μπορεί να αντιστοιχεί π.χ. σε μια στροφή. Το συμπέρασμά μας εξαρτάται μόνο από την παρουσία του τετραγώνου της ορμής και είναι ανεξάρτητο της μάζας, κ.λ.π.

Η μέση τιμή της ενέργειας που οφείλεται στον όρο αυτό υπολογίζεται μέσω της

$$\left\langle \frac{p_{x_4}^2}{2m_4} \right\rangle = \frac{\int \dots \int dp'\, dq'\, e^{-\beta H(p',q')} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{x_4} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_{x_4} \exp[-\beta(p_{x_4}^2/2m_4)] \cdot \frac{p_{x_4}^2}{2m_4}}{\int \dots \int dp'\, dq'\, e^{-\beta H(p',q')} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{x_4} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_{x_4} \exp[-\beta(p_{x_4}^2/2m_4)]}, \tag{4.42}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όπου ο φασικός χώρος διαχωρίστηκε στο (x_4, p_{x_4}) και τις υπόλοιπες συντεταγμένες μέσω της

$$dp\, dq = dp'\, dq' \; dp_{x_4}\, dx_4 \,. \tag{4.43}$$

Στην εξ. (4.42) απλοποιούνται τα ολοκληρώματα ως προς $dp'\, dq'$ και dx_4 στον αριθμητή και τον παρονομαστή ώστε

$$\left\langle \frac{p_{x_4}^2}{2m_4} \right\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dp_{x_4} \exp[-\beta(p_{x_4}^2/2m_4)] \cdot \frac{p_{x_4}^2}{2m_4}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dp_{x_4} \exp[-\beta(p_{x_4}^2/2m_4)]}$$

$$= \frac{\frac{1}{2m_4} \; \frac{1}{2\beta/2m_4} \sqrt{\frac{\pi 2m_4}{\beta}}}{\sqrt{\frac{\pi 2m_4}{\beta}}}$$

$$= \frac{1}{2\beta} = \frac{k_B T}{2} \,, \text{ ο.ε.δ.} \tag{4.44}$$

Το ΘΙΚ αφορά τις περιπτώσεις συντεταγμένων μεταφορικής κίνησης, στροφορμών και ταλαντώσεων, με όρια των συντεταγμένων που εκτείνονται σπό $-\infty$ μέχρι $+\infty$ ώστε η παραπάνω απόδειξη να ισχύει. Οι προβλέψεις του ΘΙΚ για την γραμμοριακή θερμοχωρητικότητα* σε σταθερό όγκο είναι οι εξής:

$$C_V = \frac{3}{2} R, \quad \text{για μονοατομικό} \,, \tag{4.45}$$

$$C_V = \frac{3}{2} R + 2\, \frac{R}{2} + (3s - 5)\, R = (3s - \frac{5}{2})\, R \text{ για γραμμικό} \,, \tag{4.46}$$

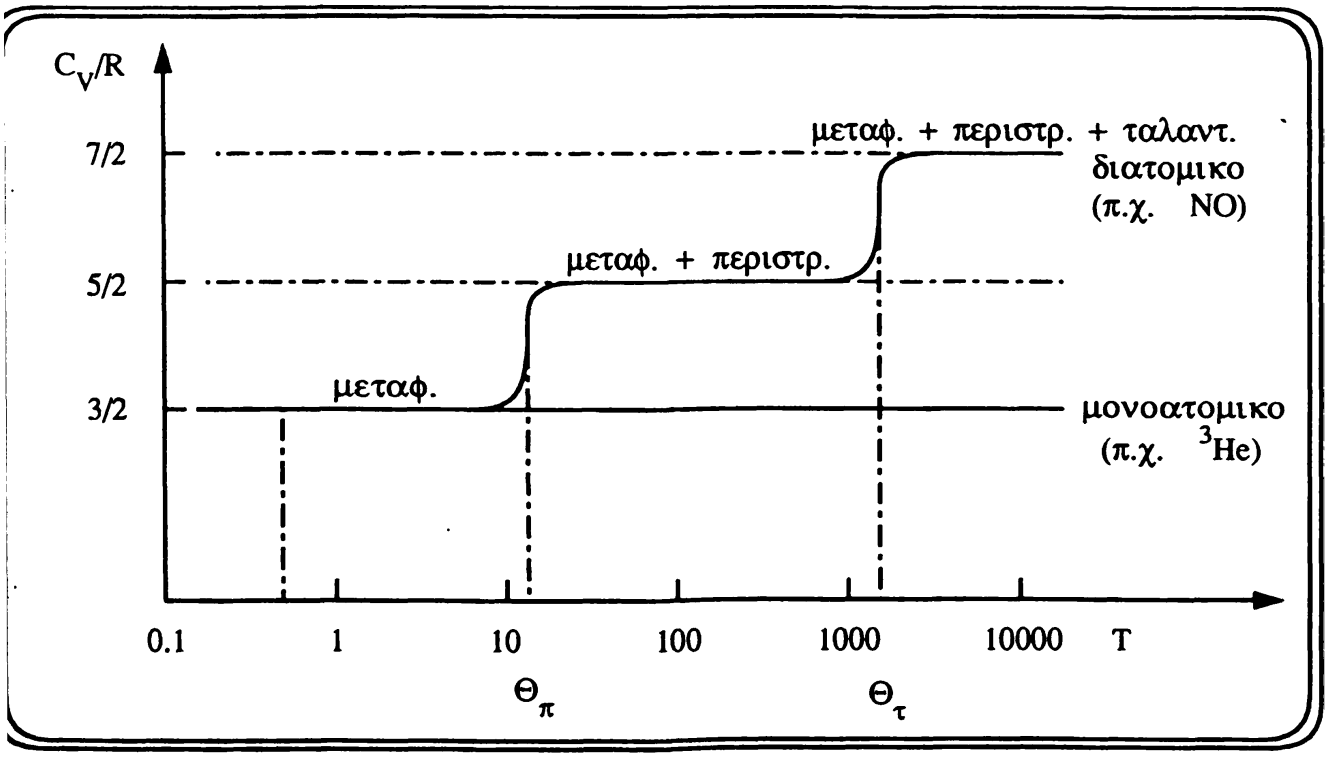
και $$C_V = \frac{3}{2} R + 3\, \frac{R}{2} + (3s - 6)\, R = (3s - 3)\, R \text{ για μη γραμμικό.} \tag{4.47}$$

---

* Η γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα είναι $C_V = N_A \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{k_B T}{2} \right) = \frac{N_A \cdot k_B}{2} = \frac{R}{2}$, όπου R είναι η παγκόσμια σταθερά των αερίων και N/N_A ο αριθμός των γραμμομορίων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Στις παραπάνω σχέσεις συνεισφέρουν οι τρεις τετραγωνικές ορμές του ΚΜ (3R/ 2), οι 2 ή 3 τετραγωνικές ορμές των στροφών για γραμμικά ή μη γραμμικά μόρια, αντίστοιχα, ($2 \cdot \frac{R}{2}$ ή $3 \cdot \frac{R}{2}$), ενώ για κάθε τρόπο ταλάντωσης με τετραγωνική ορμή και τετραγωνική θέση υπάρχει η συνεισφορά R, που δίνει συνολικά (3 s –5) R ή (3 s – 6) R ταλαντωτική συνεισφορά για γραμμικά ή μη μόρια. Δυστυχώς, όμως, οι παραπάνω προβλέψεις για την θερμοχωρητικότητα είναι σχεδόν πάντα λανθασμένες, εκτός από ορισμένες περιπτώσεις μονοατομικών αερίων. Η παρατηρηθείσα ισχυρή εξάρτηση από τη θερμοκρασία των τιμών της θερμοχωρητικότητας στα πολυατομικά μόρια ήταν από τις πρώτες ενδείξεις αποτυχίας της κλασσικής φυσικής.



Σχ.4.6. Η γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα μονοατομικού και διατομικού (απαραιτήτως γραμμικό) μορίων αερίου σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας. Προσέξτε ότι ο άξονας θερμοκρασιών Τ είναι σε λογαριθμική κλίμακα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η συμβολή των διαφόρων ειδών κινήσεων του σωματίου, (μεταφορική του ΚΜ, περιστροφική και ταλαντωτική) στη θερμοχωρητικότητα είναι αθροιστική

$$C_V = C_{V\mu} + C_{V\pi} + C_{V\tau} \quad . \tag{4.48}$$

Η περίπτωση ενός διατομικού μορίου (s = 2) φαίνεται στο Σχ. 4.6. Στην σχέση (4.48) ισχύει ότι (από την εξ. 4.46 για s = 2)

$$C_{V\mu} = \frac{3}{2} R, \; C_{V\pi} = R \quad \text{και} \quad C_{V\tau} = R \; . \tag{4.49}$$

Στην εξ. (4.48) θα πρέπει να προστεθεί και η συνεισφορά C_{Ve} λόγω των ηλεκτρονίων του αερίου. Τυπικές τιμές των χαρακτηριστικών θερμοκρασιών μεταφορικής Θ_μ, περιστροφικής Θ_π και ταλαντωτικής Θ_τ είναι, π.χ. οι

$$\Theta_\mu \approx 3 \text{ K} \; , \quad \Theta_\pi \approx 30 \text{ K} \quad \text{και} \quad \Theta_\tau \approx 2000 \text{ K} \tag{4.50}$$

που εκτιμώνται, κατά περίπτωση, από τις σχέσεις

$$\Theta_\mu = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m k_B V^{2/3}} \; , \; \Theta_\pi = \frac{\hbar^2}{2I k_B} \quad \text{και} \quad \Theta_\tau = \frac{\hbar\omega}{k_B} \; , \tag{4.51}$$

που προκύπτουν από την επίλυση των εξισώσεων ελεύθερου σωματίου σε "κουτί", περιστρεφομένου μορίου ροπής αδρανείας I και του αρμονικού ταλαντωτή στο κλασσικό όριο (ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. I).

4.4. Κατανομή μοριακών ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann (MB)

Ο στοιχειώδης αριθμός μορίων d N με συντεταγμένες στην περιοχή του χώρου των φάσεων μεταξύ p και p + dp, q και q + dq εκτιμάται από το λόγο

$$\frac{dN}{N} = \frac{e^{-\beta H(p,q)} \, dp \, dq}{\int dp \, dq \, e^{-\beta H(p,q)}} \; , \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad . \tag{4.52}$$

Η σχέση (4.52) προέκυψε από την ισότητα της κανονικοποιημένης πιθανότητας για να είναι ένα μόριο στην συγκεκριμένη περιοχή του φασικού χώρου με την συχνότητα εμφάνισης dN/ N. Αν λάβουμε υπ' όψιν μας μόνο την μεταφορική

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κίνηση του ΚΜ (ή μονοατομικά μόρια), όπως κάναμε στα προηγούμενα κεφάλαια,

$$\frac{dN}{N} = \frac{\exp[-(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2mk_BT]\, dp_x\, dp_y\, dp_z}{\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2mk_BT]\, dp_x\, dp_y\, dp_z} \quad , \qquad (4.53)$$

ενώ είναι εύκολο να δούμε πως απλοποιούνται τα 3 ολοκληρώματα στις θέσεις (ως προς dx, dy, dz) .

Είμαστε τώρα σε θέση από την κατανομή των ορμών του σωματίου (εξ. 4.53) να οδηγηθούμε στην κατανομή των ταχυτήτων με την αλλαγή $p_x = mv_x$, κ.λ.π. :

$$\frac{dN}{N} = \frac{\exp[-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/2k_BT]\, dv_x\, dv_y\, dv_z}{\int_{-\infty}^{+\infty}\exp[-mv_x^2/2k_BT]dv_x \int_{-\infty}^{+\infty}\exp[-mv_y^2/2k_BT]dv_y \int_{-\infty}^{+\infty}\exp[-mv_z^2/2k_BT]\, dv_z} \qquad (4.54)$$

Μετά τις ολοκληρώσεις Gauss στον παρονομαστή

$$\boxed{\frac{dN}{N} = \left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2} \exp[-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/2k_BT]\, dv_x\, dv_y\, dv_z} \quad . \qquad (4.55)$$

Η εξ. (4.55) δίνει το ποσοστό μορίων, για ένα κλασσικό ρευστό* σε θερμοκρασία T, που έχουν ταυτόχρονα συνιστώσες ταχύτητας στην περιοχή

v_x μέχρι $v_x + dv_x$

v_y μέχρι $v_y + dv_y$

v_z μέχρι $v_z + dv_z$. (4.56)

Εάν επιθυμούμε τον υπολογισμό της κατανομής της συνιστώσας ταχύτητας σε μια κατεύθυνση, π.χ. την x, ολοκληρώνουμε ως προς dv_y και dv_z, ώστε

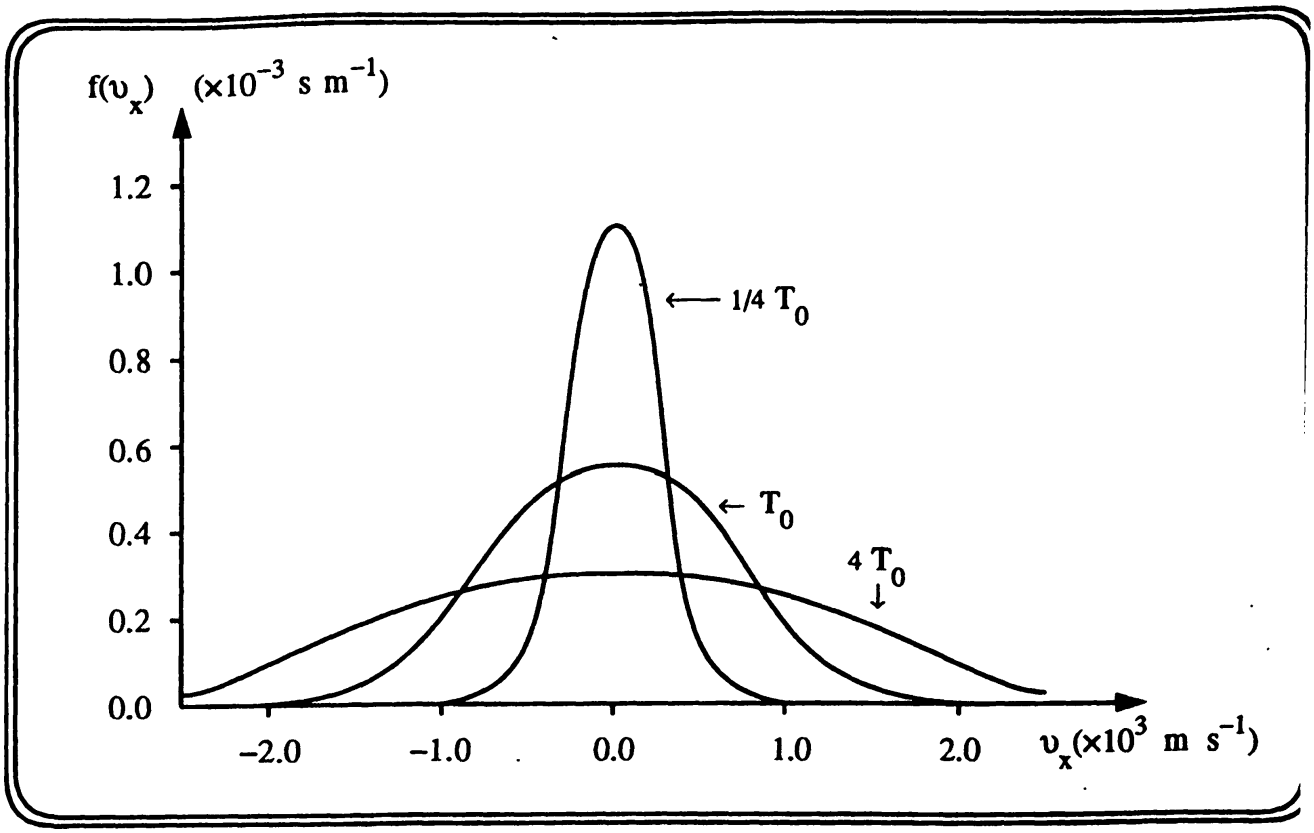
* Η κατανομή ταχυτήτων της εξ. (4.55) είναι μια καλή προσέγγιση ακόμη και στην περίπτωση ασθενών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μορίων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$f(\upsilon_x)\, d\upsilon_x = \frac{dN}{N} = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{1/2} \exp[-m\upsilon_x^2 / 2k_B T]\; d\upsilon_x, \qquad (4.57)$$

ορίζοντας την συνάρτησης πυκνότητας $f(\upsilon_x)$.

Από το Σχ. 4.7. παρατηρούμε πως όλες οι καμπύλες έχουν μέγιστο στη μηδενική τιμή της υ_x (που είναι και η πιο πιθανή) για κάθε θερμοκρασία Τ, ενώ η καμπύλη διευρύνεται καθώς η θερμοκρασία Τ αυξάνει.



Σχ. 4.7. Η κανονικοποιημένη κατανομή πυκνότητας πιθανότητας $f(\upsilon_x)$ (εξ. 4.57) για 3 διαφορετικές θερμοκρασίες $\frac{1}{4}T_0$, T_0 και $4T_0$, με $\left(\frac{k_B T_0}{m}\right)^{1/2} = 750\ \frac{m}{sec}$. Αντιστοιχεί στις ταχύτητες των μορίων του O_2.

Άσκηση 1: Να δείξετε ότι

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\upsilon_x\, f(\upsilon_x) = 1 \qquad (4.58)$$

$$\langle \upsilon_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\upsilon_x\; \upsilon_x\, f(\upsilon_x) = 0 \qquad (4.59)$$

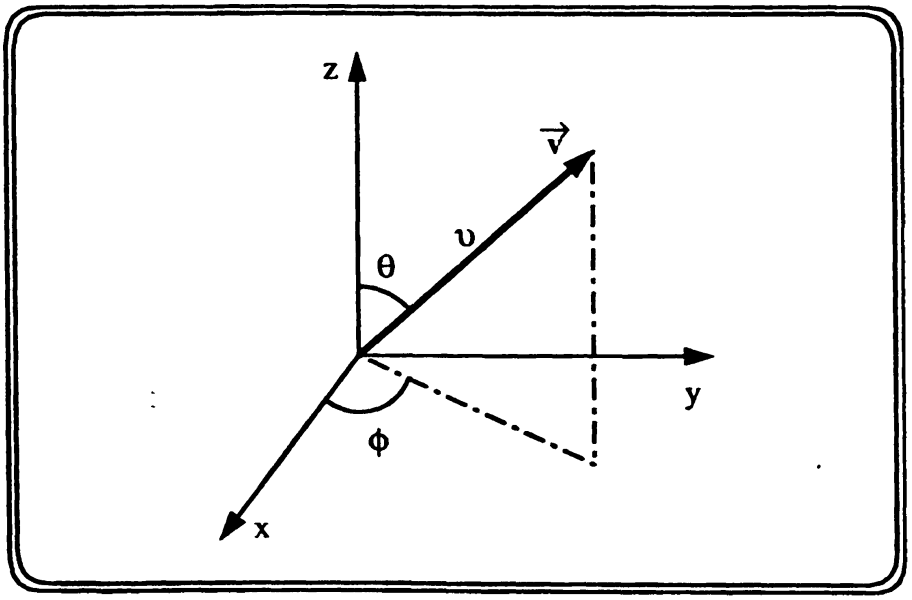
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\langle v_x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dv_x \; v_x^2 \, f(v_x) = \frac{k_B T}{m} \qquad (4.60)$$

Από την εξ. (4.60) προκύπτει ότι η μέση κινητική ενέργεια του μορίου είναι

$$\frac{1}{2} m \langle v_x^2 \rangle = \frac{k_B T}{2} \, , \qquad (4.61)$$

σε συμφωνία με το ΘΙΚ για έναν βαθμό ελευθερίας. Από την ύπαρξη μηδενικής μέσης τιμής $\langle v_x \rangle = 0$ συμπεραίνουμε ότι υπάρχει ίδιος αριθμός μορίων του αερίου που κινείται στις διευθύνσεις x και –x .



Σχ. 4.8. Οι σφαιρικές συντεταγμένες στον χώρο των ταχυτήτων.

Προκειμένου να εκτιμήσουμε την κατανομή του μέτρου των ταχυτήτων επιστρέφουμε στην εξ. (4.55) επιχειρώντας αλλαγή μεταβλητών από τις καρτεσιανές συνιστώσες της ταχύτητας σε σφαιρικές. Αφού

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \, , \qquad (4.62)$$

προκύπτει (Σχ. 4.8) ότι

$$dv_x \, dv_y \, dv_z = v^2 \, dv \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \, . \qquad (4.63)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

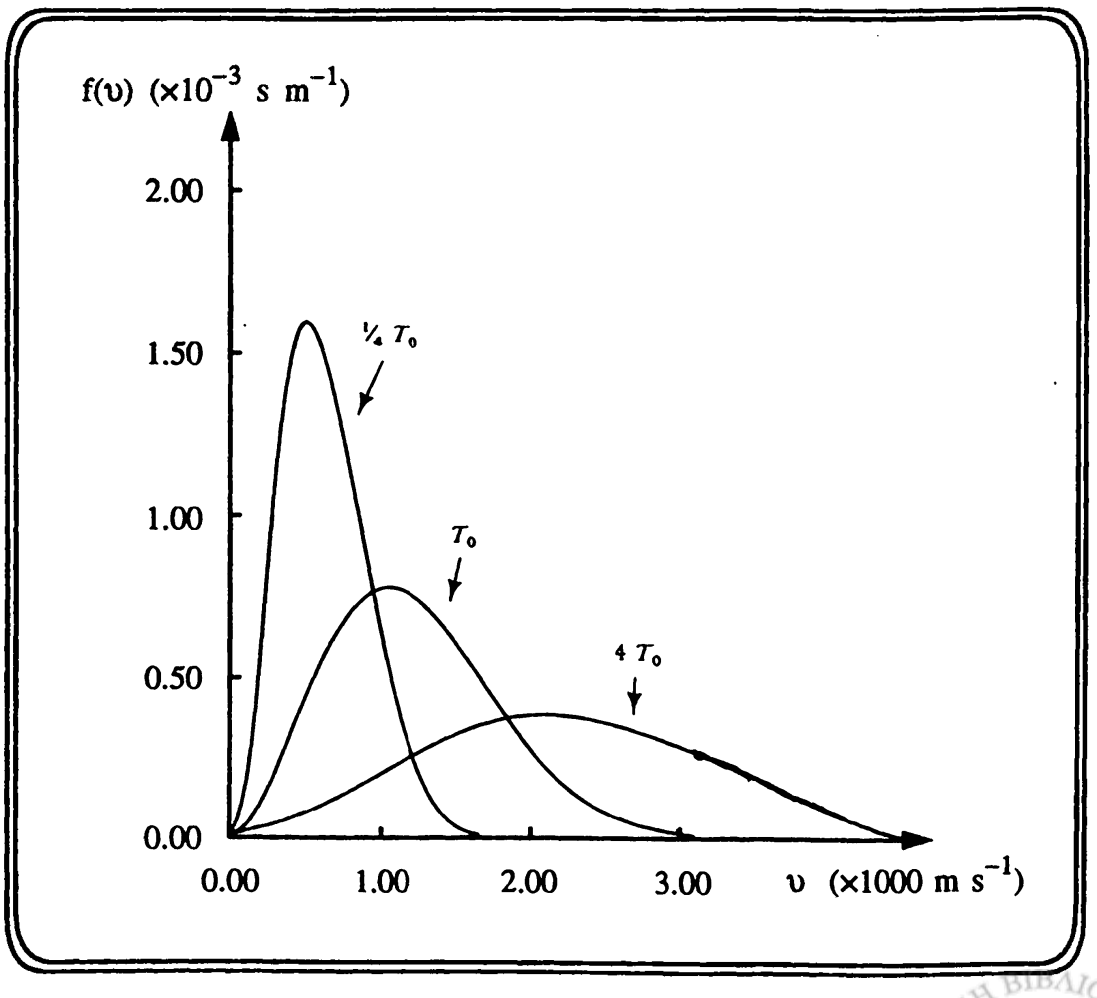
Ολοκληρώνοντας στις γωνίες θ και φ

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta = 2 \quad , \quad \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi \quad , \tag{4.64}$$

από την (4.55) έχουμε την κατανομή του μέτρου της ταχύτητας

$$\boxed{f(\upsilon) = \frac{dN}{N\, d\upsilon} = 4\pi\upsilon^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp[-m\upsilon^2/2k_B T]} \tag{4.65}$$

Η εξ. (4.65) δίνει την κατανομή ταχυτήτων Maxweel-Boltzmann (MB) σε τρισδιάστατο κλασσικό ρευστό. Αποτελεί ένα σημαντικό αποτέλεσμα για τον έλεγχο χημικών αντιδράσεων και φαίνεται, για τις 3 τιμές της θερμοκρασίας T, στο Σχ. 4.9.



Σχ. 4.9. Η κατανομή ταχυτήτων MB σε διαφορετικές T.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Άσκηση 2: Να δείξετε* ότι ισχύει η κανονικοποίηση

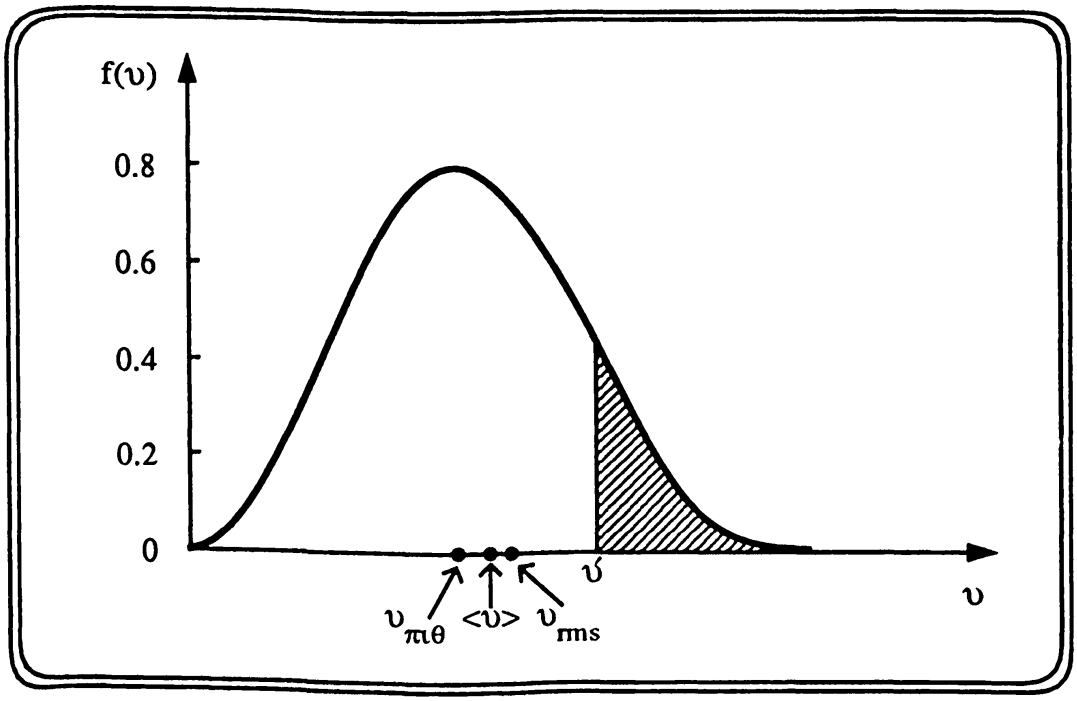
$$\int_0^\infty dv\, f(v)\, dv = 1 \qquad (4.66)$$

και οι

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty dv\, v\, f(v)\, dv = \sqrt{\frac{8k_BT}{\pi m}}\ , \qquad (4.67)$$

$$v_{rms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3k_BT}{m}}\ , \qquad (4.68)$$

$$v_{\pi\iota\theta} = \sqrt{\frac{2k_BT}{m}}\ , \qquad (4.69)$$



Σχ.4.10. Η κατανομή f(υ) με τις τιμές <υ>, v_{rms} και $v_{\pi\iota\theta}$. Το γραμμοσκιασμένο εμβαδό δίνει την πιθανότητα ένα μόριο να έχει ταχύτητα μεγαλύτερη από την τιμή υ'.

για την μέση ταχύτητα <υ>, την ρίζα της μέσης τετραγωνικής ταχύτητας v_{rms} και την πιο πιθανή τιμή της ταχύτητας $v_{\pi\iota\theta}$. Οι τιμές αυτές φαίνονται στο Σχ.

---

* χρησιμοποιήστε τις τεχνικές και τα αποτελέσματα του ΠΑΡ.Α.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

4.10, ενώ παρατηρούμε πως $\upsilon_{\pi\iota\theta} < \langle\upsilon\rangle < \upsilon_{rms}$ με $\upsilon_{\pi\iota\theta} : \langle\upsilon\rangle : \upsilon_{rms} = 1 : 1.128 : 1.225$.

Άσκηση 3: Με την αλλαγή μεταβλητών $y = \upsilon / \upsilon_{\pi\iota\theta}$ να υπολογίσετε το ποσοστό των μορίων με ταχύτητα μεγαλύτερη από την τιμή $\upsilon = \lambda\, \upsilon_{\pi\iota\theta}$

Λύση:

Το ποσοστό των μορίων με ταχύτητες μεγαλύτερες από την τιμή $\lambda\upsilon_{\pi\iota\theta}$ δίνεται από το ολοκλήρωμα

$$F(\lambda\upsilon_{\pi\iota\theta}) = \int_{\lambda\upsilon_{\pi\iota\theta}}^{\infty} d\upsilon\, f(\upsilon) \qquad (4.70)$$

και παρίσταται με το γραμμοσκιασμένο εμβαδό στο Σχ. 4.10. Το ολοκλήρωμα υπολογίζεται ($d\upsilon = \upsilon_{\pi\iota\theta}\, dy$ με την $\upsilon_{\pi\iota\theta}$ από την εξ. 4.69) ως εξής:

$$\int_{\lambda}^{\infty} \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} 4\pi\, y^2\, \upsilon_{\pi\iota\theta}^2 \exp[-m\upsilon_{\pi\iota\theta}^2\, y^2 / 2k_B T]\, \upsilon_{\pi\iota\theta}\, dy$$

$$= 4\pi\, \upsilon_{\pi\iota\theta}^3 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \int_{\lambda}^{\infty} dy\, y^2 \exp[-m\upsilon_{\pi\iota\theta}^2\, y^2 / 2k_B T]$$

$$= 4\pi \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} \int_{\lambda}^{\infty} y^2\, e^{-y^2}\, dy$$

$$= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_{\lambda}^{\infty} y^2\, e^{-y^2}\, dy\ . \qquad (4.71)$$

Με την ολοκλήρωση κατά παράγοντες

$$\int_{\lambda}^{\infty} (dy\ e^{-y^2}\ y)\, y = -\frac{1}{2}\int_{\lambda}^{\infty} d(e^{-y^2})\, y = -\frac{1}{2}\left[y\ e^{-y^2}\right]_{\lambda}^{\infty} + \frac{1}{2}\int_{\lambda}^{\infty} dy\, e^{-y^2}$$

$$= \frac{1}{2}\lambda\ e^{-\lambda^2} + \frac{1}{2}\int_{\lambda}^{\infty} dy\, e^{-y^2}\ . \qquad (4.72)$$

Επομένως,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$F(\lambda v_{\pi\iota\theta}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \lambda\ e^{-\lambda^2} + 1 - \mathrm{erf}\,(\lambda) \qquad (4.73)$$

με την εισαγωγή της συνάρτησης σφάλματος (από το ΠΑΡ.Α)

$$\mathrm{erf}\,(\lambda) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\lambda} dy\, e^{-\lambda^2} \quad . \qquad (4.74)$$

Από έναν πίνακα τιμων της erf (λ) μπορούμε να εκτιμήσουμε τα αντίστοιχα ποσοστά:

$$F(0.2\, v_{\pi\iota\theta}) = 0.9941 \quad \text{ή } 99.4\ \%$$

$$F(v_{\pi\iota\theta}) = 0.5724 \quad \text{ή } 57.2\ \%$$

$$F(2\, v_{\pi\iota\theta}) = 0.0460 \quad \text{ή } 4.6\ \%$$

$$F(5\, v_{\pi\iota\theta}) = 8\times10^{-11} \quad \text{ή } 8\times10^{-9}\ \% \quad . \qquad (4.75)$$

Από την εξ. (4.68) με την εισαγωγή του μοριακού βάρους $M = N_A/m$ του αερίου και την αντικατάσταση των σταθερών η πιθανή ταχύτητα εκφράζεται και ως:

$$v_{\pi\iota\theta} = 129 \sqrt{\frac{T}{M}} \quad (\sigma\varepsilon\ \frac{m}{sec}) \qquad (4.76)$$

Παράδειγμα: Για μόρια H_2 (M = 2) σε T = 300K (θερμοκρασία δωματίου)

$$v_{\pi\iota\theta} \approx 1600\ m/\ sec\ , \qquad (4.77)$$

ενώ για τα βαρύτερα μόρια του O_2 (M = 32) προκύπτει η χαμηλότερη τιμή

$$v_{\pi\iota\theta} \approx 400\ m/\ sec\ . \qquad (4.78)$$

Άσκηση 4: Πλανήτης περιβάλλεται από ισόθερμη ατμόσφαιρα με θερμοκρασία T. Με την κατανομή Boltzmann να δείξετε ότι η πιθανότητα ένα μόριο μάζας m να έχει κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας μεγαλύτερη από την τιμή υ είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_a^{\infty} dx\ e^{-x^2} \quad , \tag{4.79}$$

με $a = mv^2/2k_BT$. Αν $g(r)$ είναι η επιτάχυνση της βαρύτητας σε σημείο απόστασης r από το κέντρο του πλανήτη να δείξετε ότι το ποσοστό των μορίων με κατακόρυφη συνιστώσα της ταχύτητας ικανή για να αποδράσουν από τον πλανήτη είναι

$$\left(\frac{k_BT}{4\pi\, mg(r)\, r}\right)^{1/2} \exp[-m\, g(r)\, r/k_BT] \, . \tag{4.80}$$

Να υποθέσετε ότι $m\, g(r)\, r >> k_BT$, και να αγνοηθούν οι οριζόντιες συνιστώσες της ταχύτητας. Δίνεται επίσης ότι $\int_a^{\infty} dz\ e^{-z^2} \approx e^{-a^2}/2a$, όταν ο a είναι μεγάλος αριθμός.

Παρουσιάζει ενδιαφέρον η παρατήρηση πως υπάρχει μια χαρακτηριστική τιμή της ταχύτητας των μορίων του αέρα της γης, η ταχύτητα διαφυγής

$$v_\delta = G\frac{Mm}{r} \approx 11000\ \mathrm{m/sec} \, , \tag{4.81}$$

όπου G είναι η σταθερά της βαρύτητας, M η μάζα της γης και r η απόσταση μορίου-γης. Τα μόρια του αέρα (ή μιας σφαίρας που φεύγει από το πιστόλι μας) που υπερβαίνουν την τιμή v_δ εγκαταλείπουν για πάντα την γη, αν αγνοήσουμε ενδεχόμενες μειώσεις της ταχύτητας λόγω τριβής του αέρα. Με έναν υπολογισμό ανάλογο με αυτόν στις Ασκ. 3 και 4 προκύπτει πως το ποσοστό μορίων με v μεγαλύτερη της v_δ είναι $F(v_\delta) \approx 10^{-300}$. Μια εξωφρενικά χαμηλή τιμή που μας εξασφαλίζει από το ενδεχόμενο να χαθεί η ατμόσφαιρα της γης. Υπάρχουν αστρικά σώματα με v_δ μικρότερη από την τιμή της γης, ενώ για ορισμένα άλλα είναι ακόμη μεγαλύτερη. Π.χ. για τη σελήνη η βαρυτική ενέργεια είναι 20 φορές μικρότερη από αυτή της γης και το αντίστοιχο ποσοστό μορίων της ατμόσφαιρας της σελήνης που ξεπερνάει την αντίστοιχη $v_\delta^{\sigma\varepsilon\lambda}$ είναι δραματικά μεγαλύτερο ($F(v_\delta^{\sigma\varepsilon\lambda}) \approx 10^{-17}$). Αυτό σχετίζεται βέβαια με το γεγονός ότι η σελήνη δεν έχει ατμόσφαιρα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Αν υποθέσουμε ότι υπάρχει ένα αστρικό σώμα πολύ μεγάλης μάζας και μικρών διαστάσεων για το οποίο η υ_δ είναι τόσο υψηλή ώστε να υπερβαίνει ακόμη και την ταχύτητα του φωτός c = 300 000 km/ sec, ό,τι κι αν προσπαθήσεις να στείλεις έξω από αυτό το σώμα (ακόμη και φως) θα επιστρέψει ξανά πίσω. Επομένως κάθε μήνυμα που στέλνεται από αυτό όπως π.χ. άνετα το στέλνεις με φως από τη γη, επιστρέφει πίσω και αν βρεθείς εκεί είσαι καταδικασμένος να μείνεις παγιδευμένος για πάντα! Το σώμα αυτό ονομάζεται μαύρη τρύπα και έχει ταχύτητα διαφυγής υ_δ^{MT} μεγαλύτερη από την ταχύτητα των φωτονίων c.

Οι μαύρες τρύπες σχετίζονται με πολλές πηγές ακτινοβολίας στο κέντρο γαλαξιών και άλλα οιονεί-αστρικά σώματα (quasars). Προφανώς η ακτινοβολία δεν έρχεται από τη μαύρη τρύπα, που δεν μπορεί να εκπέμψει ο,τιδήποτε, αλλά από τις περιβάλλουσες περιοχές. Συμπεραίνουμε, λοιπόν, πως οι μαύρες τρύπες δεν είναι ευχάριστα αστρικά μέρη, π.χ. για να κάνουμε τις διακοπές μας. Στα πλαίσια της κβαντικής θεωρίας της βαρύτητας ο S. Hawking πρότεινε θεωρίες και έκανε υπολογισμούς για την θερμοδυναμική των μαύρων τρυπών. Σήμερα είναι γνωστό πως οι μαύρες τρύπες ερμηνεύονται στα πλαίσια της θερμοδυναμικής και της στατιστικής φυσικής* .

* Σε μια εφημερίδα γράφει επιφυλλίδες ένας "κακομούτσουνος" δημοσιογράφος με το όνομα "μαύρη τρύπα". Τα γραπτά της "μαύρης τρύπας" τα χαρακτηρίζει εκτός από το χαμηλό επίπεδο χιούμορ, η πιστή προσήλωση σε "μαύρα εκδοτικά συμφέροντα".

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ:

Η κλασσική συνάρτηση επιμερισμού υπολογίζεται από τη σχέση

$$\boxed{Z = \frac{1}{N!\, h^{3N}} \int dp\, dq\, e^{-\beta H(p,q)}} \quad , \qquad (4.82)$$

με την κλασσική Χαμιλτονιανή H , όπου το πολλαπλό ολοκλήρωμα γίνεται στις 6N-μεταβλητές θέσεων και ορμών του φασικού χώρου των N-σωματίων.

Το ΘΙΚ προβλέπει έναν όρο $k_B T/2$ στη μέση ενέργεια για κάθε όρο στην H που περιλαμβάνει το τετράγωνο θέσης ή ορμής, ενώ η αντίστοιχη συνεισφορά στην γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα είναι $R/2$.

Η κατανομή του μέτρου των ταχυτήτων για τα μόρια ιδανικού αερίου είναι

$$\boxed{f(\upsilon) = 4\pi\upsilon^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp[-m\upsilon^2/2k_B T]} \quad , \quad 0 \le \upsilon \le \infty \; . \qquad (4.83)$$

Από την $f(\upsilon)$ μέσω του ολοκληρώματος $\int_{\upsilon}^{\infty} f(\upsilon')\, d\upsilon'$ επιτυγχάνεται ο υπολογισμός του ποσοστού μορίων με ταχύτητες μεγαλύτερης μιας ορισμένης τιμής υ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ:

1. Να ορίσετε τον φασικό χώρο ενός σωματίου που κινείται σε χώρο d διαστάσεων. Πως τροποποιείται για N σωμάτια;

2. Να επιλύσετε την εξίσωση $\ddot{\theta}(t) + \omega_o^2\, \theta(t) = 0$ στην περίπτωση που η συντεταγμένη θέσης είναι η γωνία του απλού γραμμικού εκκρεμούς θ(t) και η αντίστοιχη συζυγής ορμή είναι $\dot{\theta}(t)$. Πώς ορίζεται η αντίστοιχη συνάρτηση επιμερισμού z και με τι ισούται; $\omega_o^2 = g/l$, όπου l είναι το μήκος του εκκρεμούς και g η επιτάχυνση της βαρύτητας.

3. Σε τι διαφέρουν τα συντηρητικά από τα μη συντηρητικά κλασσικά συστήματα;

4. Τι είναι το ενεργειακό φάσμα και σε τι διαφέρει στην κλασσική, οιονεί-κλασσική και κβαντική περιγραφή; (Χρησιμοποιείστε το παράδειγμα του απλού αρμονικού ταλαντωτή).

5. Μια κλασσική κατάσταση συστήματος N σωματίων με τι αντιστοιχείται στον χώρο των φάσεων. Μια κβαντική κατάσταση;

6. Τι περιγράφει μια τροχιά στον χώρο των φάσεων; Αν ένα πλήθος αρχικών συνθηκών καταλαμβάνει έναν συγκεκριμένο φασικό όγκο πώς θα μεταβληθεί ο όγκος αυτός μετά από χρόνο t; Ποιό θεώρημα ισχύει σε αυτήν την περίπτωση;

7. Πώς συμβάλλουν τα διάφορα είδη κινήσεων ενός σωματίου ιδανικού αερίου στην συνάρτηση επιμερισμού Z, την ελεύθερη ενέργεια F, την ενέργεια E και τη γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα C_V;

8. Να διατυπώσετε το ΘΙΚ της ενέργειας. Ποιές είναι οι συνέπειές του στον υπολογισμό της C_V; Πότε ισχύει;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

9. Ποιά είναι η συνεισφορά της μεταφορικής, της περιστροφικής και της ταλαντωτικής κίνησης στην θερμοχωρητικότητα ενός μορίου ιδανικού αερίου;

10. Να δώσετε τη γραφική παράσταση της $C_V(T)$ στην περίπτωση μονοατομικού και διατομικού μορίου ιδανικού αερίου. Σε τι αντιστοιχούν οι χαρακτηριστικές τιμές θερμοκρασίας Θ_μ, Θ_π και Θ_τ;

11. Από τι εξαρτάται η πιο πιθανή ταχύτητα μορίων ιδανικού αερίου σε θερμοκρασία Τ; Πώς συγκρίνεται με τη μέση ταχύτητα και την τετραγωνική ριζα της μέσης τιμής του τετραγώνου της ταχύτητας;

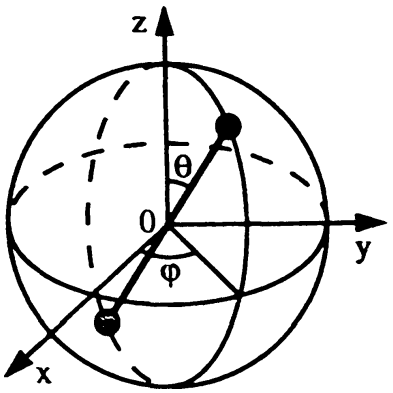
12. Ποιές οι συνέπειες της ταχύτητας διαφυγής στην κίνηση των μορίων του αέρα και των φωτονίων: **(i)** στη γη, **(ii)** στη σελήνη και **(iii)** σε μια μαύρη τρύπα;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

1. Η περιστροφική κίνηση διατομικού μορίου ΑΑ προσδιορίζεται από δύο γωνιακές μεταβλητές θ και φ και τις αντίστοιχες κανονικές συζυγείς ορμές p_θ και p_φ. Θεωρώντας ότι η κινητική ενέργεια του μορίου είναι

$$\varepsilon_\pi = \frac{1}{2}\, p_\theta^2 + \frac{1}{2I\sin^2\theta}\, p_\varphi^2$$



να υπολογίσετε την κλασσική συνάρτηση επιμερισμού z, την εντροπία s και τη θερμοχωρητικότητα c_V. Τι τιμές παίρνει η z και τι συμβαίνει όταν $T < \Theta_\pi = \hbar^2/2Ik_B$;

(**Απάντηση :**

$$z(T) = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{+\infty} dp_\theta \int_{-\infty}^{+\infty} dp_\varphi \exp\left[-\frac{1}{k_BT}\left(\frac{p_\theta^2}{2I} + \frac{1}{2I\sin^2\theta}\, p_\varphi^2\right)\right]$$

$$= \frac{2Ik_BT}{\hbar^2} = \frac{T}{\Theta_\pi}\,.$$

Όταν $T < \Theta_\pi \Rightarrow z < 1$, το ενεργειακό φάσμα δεν είναι, προφανώς, πυκνό και ο κλασσικός τύπος δεν ισχύει. Επιπλέον,

$$f = -k_BT\ln(2Ik_BT/\hbar^2)\,,\ s = k_B + k_B\ln(2Ik_BT/\hbar^2) \ \text{ και } c_V = k_B.\ )$$

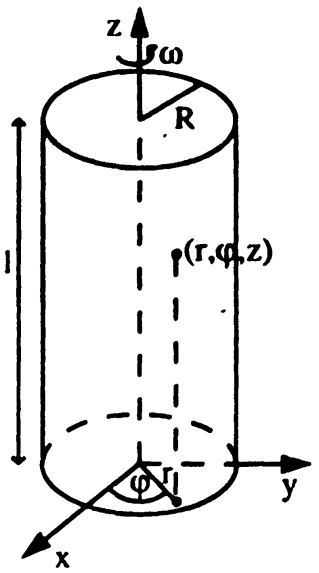
2. Ένα κλειστό κυλινδρικό δοχείο με βάση ακτίνας R και ύψος l περιστρέφεται με σταθερή γωνιακή ταχύτητα ω γύρω από τον κεντρικό του άξονα που είναι κάθετος προς τη βάση. Αν το δοχείο περιέχει κλασσικό ιδανικό αέριο N διακρίσιμων σωματίων, το σύστημα είναι σε θερμοκρασία T, το αέριο ισορροπεί στα τοιχώματα του δοχείου, ενώ το κάθε μόριο έχει δυναμική ενέργεια $\varepsilon_\varphi(r)$ με $-\frac{\partial\varepsilon_\varphi(r)}{\partial r} = m\omega^2 r$, όπου r είναι η απόσταση του μορίου από τον κατακόρυφο άξονα, να υπολογισθεί η συνάρτηση επιμερισμού z του ενός μορίου και η Z για τα N σωμάτια. Επίσης, να υπολογισθούν οι πιέσεις

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$P_{\text{πώματος}} = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,R,\omega}$$

και

$$P_{\text{περιμ.}} = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,l,\omega} .$$



(**Απάντηση:** $z = 2\pi l \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{k_BT}{m\omega^2}\left[\exp\left(\frac{m\omega^2R^2}{2k_BT}\right)-1\right]$, $Z = z^N$ λόγω διακρισιμότητας, άρα,

$$P_{\text{πώματος}} = \frac{Nk_BT}{\pi R^2}\left(\frac{\partial \ln z}{\partial l}\right)_{T,R,\omega} = \frac{Nk_BT}{V},$$

$$P_{\text{περιμ.}} = \frac{Nk_BT}{\pi l}\left(\frac{\partial \ln z}{\partial R^2}\right)_{T,l,\omega} = \frac{Nk_BT}{\pi l}\,\frac{\frac{m\omega^2}{2k_BT}\exp\left[\frac{m\omega^2R^2}{2k_BT}\right]}{\exp\left[\frac{m\omega^2R^2}{2k_BT}\right]-1} \quad).$$

3. Να δείξετε, από τον ορισμό κανονικής συνάρτησης επιμερισμού

$$z = \sum_r e^{-\beta\varepsilon_r}$$

και τον τύπο

$$Z = \frac{z^N}{N!} ,$$

αν $\varepsilon_r = \varepsilon_\mu + \varepsilon_{\varepsilon\sigma}$, όπου ε_r είναι η ενέργεια λόγω μεταφορικής κίνησης του ΚΜ και $\varepsilon_{\varepsilon\sigma}$ η ενέργεια που οφείλεται σε εσωτερικούς βαθμούς ελευθερίας, ότι

$$z = z_\mu\, z_{\varepsilon\sigma} \quad , \; z_\mu = \frac{V}{\lambda^3} .$$

(i). Να δείξετε ότι η καταστατική εξίσωση του ιδανικού αερίου λαμβάνεται ανεξάρτητα από τις λεπτομέρειες της ενέργειες $\varepsilon_{\varepsilon\sigma}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(ii). Να δείξετε, επίσης, ότι ο νόμος των ιδανικών αερίων προκύπτει ανεξάρτητα από τη μορφή της $z_{\varepsilon\sigma}$ μέσω της $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}$ όπου F είναι η ελεύθερη ενέργεια Helmholtz.

(iii). Να δείξετε πως για την ενέργεια, την εντροπία, την θερμοχωρητικότητα σε σταθερό όγκο και το χημικό δυναμικό οι προσθετικοί όροι είναι

$$E_{\varepsilon\sigma} = \frac{Nk_BT^2}{z_{\varepsilon\sigma}} \frac{\partial}{\partial T} z_{\varepsilon\sigma}$$

$$S_{\varepsilon\sigma} = \frac{E_{\varepsilon\sigma}}{T} + Nk_B \ln z_{\varepsilon\sigma}$$

$$(C_V) = -\left(\frac{\partial E_{\varepsilon\sigma}}{\partial T}\right)_V = \frac{2Nk_BT(\partial z_{\varepsilon\sigma}/\partial T)}{z_{\varepsilon\sigma}} + \frac{Nk_BT^2(\partial^2 z_{\varepsilon\sigma}/\partial T^2)}{z_{\varepsilon\sigma}}$$

$$- \frac{Nk_BT^2[(\partial z_{\varepsilon\sigma}/\partial T)]^2}{z_{\varepsilon\sigma}^2}$$

$$\mu_{\varepsilon\sigma} = -k_BT \ln z_{\varepsilon\sigma} .$$

4. Αν γραφεί η εσωτερική ενέργεια ενός μορίου με το άθροισμα

$$\varepsilon_{\varepsilon\sigma} = \varepsilon_\pi + \varepsilon_\tau + \varepsilon_e + \varepsilon_{\pi\upsilon\rho.}$$

να δείξετε ότι

$$z_{\varepsilon\sigma} = z_\pi \cdot z_\tau \cdot z_e \cdot z_{\pi\upsilon\rho.}$$

5. Στην περίπτωση διατομικών μορίων υπάρχει μόνο ένας τρόπος ταλάντωσης που σχετίζεται με τον κβαντικό απλό αρμονικό ταλαντωτή με ενέργειες

$$\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\,\hbar\,\omega, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

και κυκλική συχνότητα

$$\omega = \sqrt{K/\mu}\ ,$$

με K την σταθερά του ελατηρίου και μ την ανηγμένη μάζα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \ .$$

Η ταλαντωτική συνάρτηση επιμερισμού εκφράζεται συναρτήσει της χαρακτηριστικής θερμοκρασίας $\Theta_\tau = \hbar\,\omega / k_B$

$$z_\tau = \frac{e^{-\Theta_\tau / 2T}}{1 - e^{-\Theta_\tau / T}} \ .$$

Να δείξετε ότι για N μόρια υπάρχουν οι παρακάτω εκφράσεις

$$E_\tau = Nk_B \left(\frac{\Theta_\tau}{2} + \frac{\Theta_\tau}{e^{\Theta_\tau / T} - 1} \right) ,$$

$$\frac{S_\tau}{Nk_B} = \frac{\Theta_\tau / T}{e^{\Theta_\tau / T} - 1} - \ln \left(1 - e^{-\Theta_\tau / T}\right) ,$$

$$\frac{(C_V)_\tau}{Nk_B} = \left(\frac{\Theta_\tau}{T} \right)^2 \frac{e^{\Theta_\tau / T}}{(e^{\Theta_\tau / T} - 1)^2} \ .$$

Επιπλέον, να δείξετε ότι $E_\tau \to Nk_BT$ και $(C_V)_\tau \to Nk_B$ σύμφωνα με το ΘΙΚ όταν $\Theta_\tau / T << 1$. (Χρησιμοποιείστε τα αναπτύγματα μικρού x : $e^x = 1+x+x^2/2 + ...$, $(1+x)^{-1} = 1 - x$, για $x << 1$).

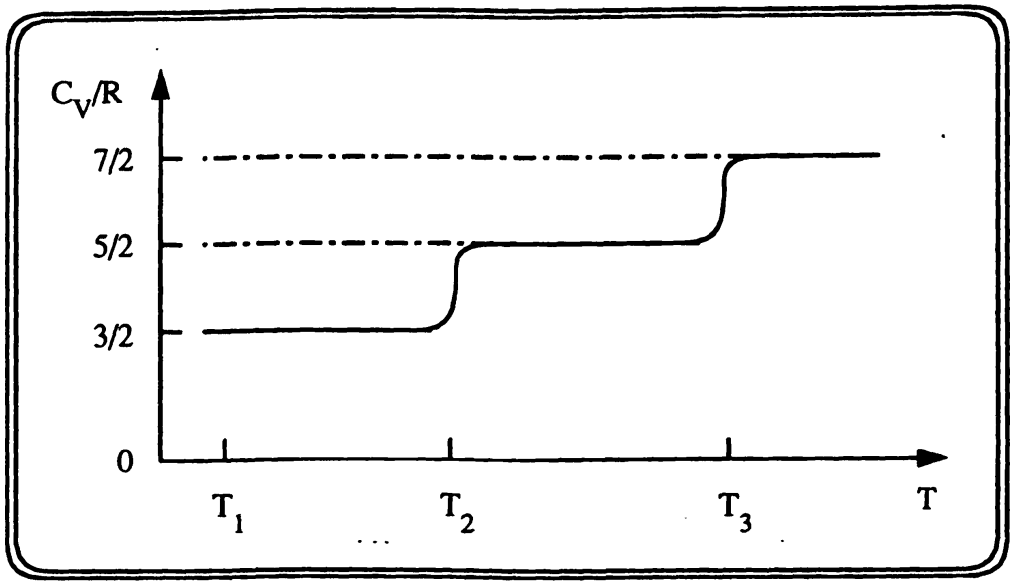
6. Η περιστροφική κίνηση ενός μορίου επιτρέπει τον υπολογισμό της συνάρτησης επιμερισμού

$$z_\pi = \frac{T}{\Theta_\pi} \left(1 + \frac{\Theta_\pi}{3T} + \frac{1}{15} \left(\frac{\Theta_\pi}{T} \right)^2 + ... \right) ,$$

όπου $\Theta_\pi = \dfrac{\hbar^2}{2Ik_B}$ είναι η χαρακτηριστική θερμοκρασία της περιστροφικής κίνησης. Να υπολογίσετε τις θερμοδυναμικές ποσότητες E_π, S_π και $\dfrac{(C_V)_\pi}{Nk_B}$ (για το αέριο των N μορίων) που οφείλονται στην περιστροφή.

7. Τα μόρια αερίου αποτελούνται από δύο διαφορετικά άτομα μηδενικού σπιν. Μετρήσεις της γραμμομοριακής θερμοχωρητικότητας του αερίου έδωσαν το σχήμα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



(i). Που οφείλονται τα αποτελέσματα στις περιοχές $T_3<T$, $T_2<T<T_3$, $T_1<T<T_2$, $T<T_1$;

(ii). Να υπολογίσετε την συνεισφορά λόγω περιστροφικής κίνησης στην θερμοχωρητικότητα του αερίου σε 20, 100 και 300K. Το αντίστοιχο ενεργειακό φάσμα έχει τις δύο χαμηλότερες στάθμες με ενεργειακή απόσταση k_BT' με $T' = 64K$.

(**Απάντηση :** **(i).** Μεταφορική, περιστροφική και ταλαντωτική για $T_3<T$ και $C_V = \frac{7}{2}R$, χωρίς την ταλαντωτική για $T_2<T<T_3$ και $C_V = \frac{5}{2}R$, μόνο με την μεταφορική για $T_1<T<T_2$ και $C_V = \frac{3}{2}R$. Για $T<T_1$ συμβαίνει μιά μετάβαση φάσης και το αέριο παύει να υπάρχει.

(ii) $T = 20K$: Θεωρούμε μόνο τις δύο χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες

$$<\varepsilon> = \frac{3k_BT'e^{-T'/T}}{1+3e^{-T'/T}}\ ,\ C_V = N\frac{d<\varepsilon>}{dT} = 3R\left(\frac{T'}{T}\right)^2\frac{e^{-T'/T}}{(1+3e^{-T'/T})^2} = 0.1R.$$

$T = 100K$: Θεωρούμε όλες τις ενεργειακές στάθμες και $C_V = R$) .

8. Να δείξετε την κατανομή ενεργειών MB ξεκινώντας από την έκφραση για την κατανομή ταχυτήτων. Πότε παύει να ισχύει;

9. Να δείξετε ότι για το ιδανικό αέριο με $E = N\frac{3}{2}k_BT$ ισχύει η σχέση $PV = \frac{2}{3}E$,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

μέσω των $Z = \frac{z^N}{N!}$, F και $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}$. Η σχέση αυτή είναι γενική ώστε να ισχύει και για κβαντικά σωμάτια ακόμη και για T = 0 όπου η ενέργεια E δεν είναι μηδέν (όπως αναμένεται από κλασσική άποψη). Να υπολογίσετε επίσης την Z στην ακραία σχετικιστική περίπτωση όπου ε = cp, πάλι μέσω της z και των F και P. Είναι ίδια η σχέση; (**Απάντηση:** $PV = \frac{1}{3}E$).

10. Ένα κυβικό δοχείο πλευράς L = 20 cm περιέχει διατομικό H_2 σε θερμοκρασία T = 300K. Κάθε μόριο H_2 αποτελείται από δύο άτομα H μάζας $m = 1.66 \times 10^{-24}$ gr έκαστο και απόσταση 10^{-8} cm μεταξύ τους. Να υπολογίσετε τη μέση ταχύτητα <υ> των μορίων και τις γραμμομοριακές θερμοχωρητικότητες C_P και C_V, όταν το αέριο μπορεί να θεωρηθεί ως ιδανικό ενώ αγνοούνται οι βαθμοί ελευθερίας που οφείλονται στις ταλαντώσεις.

11. Με χρήση της οιονεί-κλασσικής στατιστικής (MB) σε ένα σύστημα N μη αλληλεπιδρώντων κβατικών ταλαντωτών, θερμοκρασίας T, με τιμές της ενέργειας για τον ένα ταλαντωτή

$$\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\frac{\gamma}{V}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \ ,$$

να βρείτε (και να σχεδιάσετε) τις E και C_V συναρτήσει της θερμοκρασίας T, να βρείτε την καταστατική εξίσωση του συστήματος καθώς και το ποσοστό των μορίων που καταλαμβάνουν την n-οστή στάθμη.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΑΘΗΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

Η ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ

5.1 Η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού Z

5.2 Φερμιόνια

5.3 Μποζόνια

5.4 Στατιστικές Fermi, Bose και Boltzmann

5.5 Θερμοδυναμικές συναρτήσεις στο μεγαλοκανονικό ensemble

5.6 Το κλασσικό αέριο. Μια ακόμη (τελευταία) επίσκεψη

5.7. Κβαντικές διορθώσεις στην καταστατική εξίσωση $PV=Nk_BT$

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ

5.1. Η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού Z

Είδαμε πως η κανονική συναρτήση επιμερισμού Z(N) για το ιδανικό αέριο N-σωματίων υπολογίζεται για μη διακρίσιμα σωμάτια μόνο στο όριο της οιονεί-κλασικής προσέγγισης, που ισχύει όταν η θερμοκρασία T είναι υψηλή. Παρ' όλο όμως που στα περισσότερα αέρια χαμηλής πυκνότητας, που δικαιολογείται η παράλειψη της δυναμικής ενέργειας, ισχύει η οιονεί-κλασική προσέγγιση υπάρχουν και πολλές περιπτώσεις που αυτό δεν συμβαίνει. Τέτοια παραδείγματα είναι χαρακτηριστικά: τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας στα μέταλλα, τα φωτόνια, το υγρό ^{3}He, το υγρό ^{4}He, το εσωτερικό αστέρων νετρονίων και λευκών νάνων, η πυρηνική ύλη, κ.λ.π. Σε αυτές τις περιπτώσεις είναι απαραίτητος ο πλήρης υπολογισμός της συνάρτησης επιμερισμού Z(N) χωρίς να καταφύγουμε στο οιονεί-κλασσικό όριο.

Δυστυχώς όμως ο ακριβής υπολογισμός της Z(N) για μη διακρίσιμα (κβαντικά) σωμάτια στο κανονικό ensemble δεν είναι είναι εφικτός. Το άθροισμα στην Z(N) γίνεται ως προς το σύνολο των δυνατών αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ (δηλ. σε όλες τις μονοσωματιακές καταστάσεις $|r\rangle$). Το πρόβλημα εκδηλώνεται, κυρίως, λόγω του περιορισμού $N = \sum_r n_r$, με τον οποίο πρέπει να γίνουν τα αθροίσματα ως προς τους αριθμούς n_r που δηλώνουν τους δείκτες κατάληψης των μονοσωματιακών καταστάσεων $|r\rangle$. Αν η κατάληψη μιας κατάστασης δεν είναι επιτρεπτή, όπως π.χ. συμβαίνει στην περίπτωση των φερμιονίων λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli, το σωμάτιο πρέπει, αναγκαστικά, να καταλάβει μια άλλη (επιτρεπτή) κατάσταση. Επομένως οι μονοσωματιακές καταστάσεις $|r\rangle$ που μπορεί να καταλάβει το σωμάτιο δεν είναι πλέον στατιστικά ανεξάρτητες μεταξύ τους. Με άλλα λόγια, δεν επιτρέπεται κατά τον υπολογισμό της Z το άθροισμα ως προς το σύνολο των δυνατών αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ να γίνει ξεχωριστά για κάθε n_r, αφού οι αριθμοί n_r για διαφορετικές καταστάσεις $|r\rangle$ δεν μπορούν να τρέξουν,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ανεξαρτήτως ο ένας από τον άλλο, στις ίδιες τιμές γιατί πρέπει να ικανοποιούν τη συνθήκη $N = \sum_r n_r$. Επομένως, η μη ανεξαρτησία των μονοσωματιακών καταστάσεων $|r>$ στην κβαντική στατιστική δεν επιτρέπει να γίνει το άθροισμα στον υπολογισμό της Z.

Στην περίπτωση αυτή ενδείκνυται η χρήση του μεγαλο (ή μακρο)κανονικού ensemble (Κεφ. 1.3) όπου δεν είναι ο πλέον αριθμός των σωματίων N αλλά το χημικό δυναμικό μ που διατηρείται σταθερό. Στο Κεφ. 1.3 είδαμε πως υπολογίζεται η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού $\boldsymbol{\mathcal{Z}}$ με την εισαγωγή της συνθήκης $N = \sum_r n_r$, που ορίζει μέσω του αντίστοιχου πολλαπλασιαστή Lagrange το χημικό δυναμικό μ. Επομένως, απαλλαγμένοι από κάθε περιορισμό στις τιμές που παίρνει ο ολικός αριθμός σωματίων N επιτρέπεται, τώρα, να θεωρήσουμε τις διαφορετικές κβαντικές μονοσωματιακές καταστάσεις $|r>$ ως στατιστικά ανεξάρτητες, απλώς, αγνοώντας τυχόν επιπλέον σωμάτια σε κάθε κατάσταση $|r>$. Με άλλα λόγια μπορούμε να επιδιώξουμε τον υπολογισμό της μεγαλοκανονικής συνάρτησης επιμερισμού $\boldsymbol{\mathcal{Z}}$ ξεχωρίζοντας το άθροισμα στο σύνολο αθροισμάτων για κάθε δυνατό αριθμό κατάληψης n_r και επικεντρώνοντας την προσοχή μας στον υπολογισμό μιας μόνο κατάστασης.

Στο Κεφ. 1.3. είδαμε πως στο κανονικό ensemble η πιθανότητα μιας κατάστασης (N,n) σε σταθερή θερμοκρασία T, σταθερό όγκο V και με αριθμό σωματίων N είναι $p_n \sim \exp(-\beta E_n)$, ενώ η κανονική συνάρτηση επιμερισμού είναι $Z = \sum_n \exp(-\beta E_n)$*. Από φυσική σκοπιά το κανονικό ensemble αντιστοιχεί σε ένα σύστημα N σωματίων σε όγκο V (π.χ. ένα "κουτί"), που τοποθετείται σε ένα λουτρό (π.χ. στην μπανιέρα μας) επιτρέποντας μέσω των τοιχωμάτων του ανταλλαγή θερμότητας εξασφαλίζοντας σταθερή θερμοκρασία T. Επιπλέον, η εξίσωση γέφυρας επτρέπει τον υπολογισμό της ελεύθερης ενέργειας $F = -k_B T \ln Z$ που έχει ελάχιστο με σταθερές T, V και N στην κατάσταση ισορροπίας. Στο μεγαλοκανονικό ensemble, αντίθετα, όχι μόνον η θερμοκρασία T αλλά και το χημικό δυναμικό μ παραμένουν σταθερές ποσότητες, ενώ το σύστημα είναι πάλι σε λουτρό θερμότητας αλλά με ιδεατά τοιχώματα που επιτρέπουν την ανταλλαγή όχι μόνο ενέργειας αλλά και σωματίων. Η πιθανότητα να βρεθεί το

* E_n είναι η ενέργεια των N σωματίων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

σύστημα με αριθμό σωματίων N στην πολυσωματιακή κατάσταση Ψ_{Nn} (Η $\Psi_{Nn} = E_{Nn}\Psi_{Nn}$) με ενέργεια των N-σωματίων E_{Nn}, είναι

$$p_{Nn} = \frac{\exp[-\beta\,(E_{Nn} - \mu\, N)]}{Z} \quad . \tag{5.1}$$

Η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού προκύπτει από την κανονικοποίηση,

$$\mathcal{Z} = \sum_{N} \sum_{n} \exp\,[\,-\beta(E_{Nn} - N\mu)] \quad , \tag{5.2}$$

που εκφράζει το άθροισμα σε όλες τις δυνατές καταστάσεις Ψ_{Nn} του συστήματος με $\Omega = F - \mu N = -k_B T \ln \mathcal{Z}$ το μεγαλοκανονικό δυναμικό. Στο μεγαλοκανονικό ensemble οι T, V και μ παραμένουν σταθερές ενώ μεταβάλλονται ο αριθμός N και η ενέργεια E. Το μεγαλοκανονικό ensemble ήταν μέχρι πρόσφατα μάλλον χωρίς ιδιαίτερη πρακτική χρησιμότητα. Στην συνέχεια, όμως, θα το χρησιμοποιήσουμε για να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα του κβαντικού ιδανικού αερίου.

Επιστρέφοντας στο κανονικό ensemble η κανονική συνάρτηση επιμερισμού Z με σταθερό αριθμό σωματίων N γράφεται ως το άθροισμα $Z(N) = \sum_{\{n_r\}} \exp\,(-\beta E_{\{n_r\}})$*, σε όλα τα δυνατά σύνολα αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ στις μονοσωματιακές καταστάσεις (ενός σωματίου) $|r\rangle$, με

$$E_{\{n_r\}} = \sum_{r} n_r\, \varepsilon_r = n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + \ldots\ldots + n_r\varepsilon_r + \ldots \quad \text{και} \quad \sum_{n} n_r = N \quad . \tag{5.3}$$

Η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού (εξ. 5.2) μπορεί να γραφεί και με το άθροισμα ως προς N

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} Z(N)\, e^{\beta\mu N} \quad , \tag{5.4}$$

---

* **Προσέξτε:** είναι ειδικής μορφής άθροισμα αφού οι $\{n_r\}$ δεν είναι ελεύθεροι να πάρουν οποιαδήποτε τιμή, αλλά πρέπει να τηρείται η συνθήκη $\sum_{n} n_r = N$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ενώ για τον μέσο αριθμό σωματίων <N> και τις αντίστοιχες διακυμάνσεις $<(\Delta N)^2>$ ισχύουν οι σχέσεις

$$<N> = \frac{\partial(\ln Z)}{\partial(\beta\mu)} = k_B T \frac{\partial(\ln Z)}{\partial\mu} \qquad (5.5)$$

$$<(\Delta N)^2> = -(k_B T)^2 \cdot \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial\mu^2} \quad . \qquad (5.6)$$

Οι εξ. (5.5) και (5.6) είναι ανάλογες των ήδη γνωστών σχέσεων για την μέση ενέργεια <E> και την διασπορά της $<(\Delta E)^2>$ στο κανονικό ensemble. Είναι επίσης γνωστό ότι για ένα μακροσκοπικό σύστημα οι σχετικές διακυμάνσεις της ενέργειας γύρω από την μέση ενέργεια <E> είναι πολύ μικρές. Στο Κεφ. 1.3 δείξαμε πως και οι διακυμάνσεις του αριθμού σωματίων N γύρω από τον μέσο αριθμό <N> είναι επίσης πολύ μικρές στο θερμοδυναμικό όριο. Οδηγούμεθα, λοιπόν, στο συμπερασμα πως δεν αναμένεται να μεταβληθούν οι φυσικές ιδιότητες ενός συστήματος όταν αυτό μετακινηθεί από το λουτρό ενέργειας και σωματίων. Επομένως, για ένα μακροσκοπικό σύστημα δεν υπάρχει διαφορά αν ο υπολογισμός των μέσων τιμών γίνει στο κλειστό (απομονωμένο) σύστημα ή σε σύστημα με θερμική επαφή (ανταλλαγή ενέργειας) ή θερμική και διαχυτική επαφή (ανταλλαγή ενέργειας και σωματίων) με λουτρό. Μας δίνεται, λοιπόν, η δυνατότητα ελευθερίας επιλογής του στατιστικού ensemble στο θερμοδυναμικό όριο και αφού η συνθήκη σταθερού αριθμού σωματίων N μας δημιουργεί προβλήματα στον υπολογισμό της Z επιλέγουμε την χρήση του μεγαλοκανονικού ensemble και υπολογίζουμε την μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού $\mathcal{Z}$.

Είδαμε πως μπορεί να υπολογισθεί η $\mathcal{Z}$ από την εξ. (5.2) αν αθροίσουμε ως προς όλες τις κβαντικές καταστάσεις (των N-σωματίων), κρατώντας σταθερό τον αριθμό N, και στην συνέχεια επαναλάβουμε την άθροιση σε όλες τις τιμές του N, από μηδέν μέχρι άπειρο. Ισοδύναμος, όμως, αν τα σωμάτια είναι κβαντικά (μη διακρίσιμα) όπως στην περίπτωσή μας, είναι και ο τρόπος άθροισης ως προς όλους τους αριθμούς κατάληψης n_r με την συνθήκη $\sum_r n_r = N$ και μετά ως προς N. Βέβαια, με αυτούς τους τρόπους δεν κερδίζουμε τίποτα, αφού πρέπει πρώτα να υπολογισθεί το άθροισμα για την Z με την απαραίτητη συνθήκη που μας δυσκολεύει. Στο μεγαλοκανονικό ensemble τα δύο αυτά

βήματα άθροισης μπορούμε να τα συμπτύξουμε σε ένα, με άθροιση ως προς όλα τα δυνατά σύνολα $\{n_r\}$ χωρίς την διατήρηση της συνθήκης. Το σημαντικό πλεονέκτημα είναι ότι τώρα η συνθήκη σταθερού $\sum_r n_r = N$ ικανοποιείται αυτομάτως, αφού ο N μεταβάλλεται. Άρα, από την εξ. (5.4)

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \left[\sum_{\{n_r\}} e^{-\beta E_{\{n_r\}}} \right] e^{\beta\mu N}$$

$$= \sum_{\{n_r\}} \exp\left[-\sum_r \beta(\varepsilon_r - \mu)\, n_r \right], \qquad (5.7)$$

όπου $E_{\{n_r\}} = n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + \ldots + n_r\varepsilon_r + \ldots$ είναι η ενέργεια των πολλών σωματίων συναρτήσει του συνόλου των αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ και των ενεργειών $\{\varepsilon_r\}$ στις μονοσωματιακές καταστάσεις $|r\rangle$. Η άθροιση στο πρώτο μέλος της εξ. (5.7) γίνεται πρώτα με την συνθήκη σταθερού N και μετά άθροιση ως προς N, ενώ το δεύτερο μέλος προέκυψε από την αντικατάσταση των αθροισμάτων $\sum_r n_r = N$ και $E_{\{n_r\}} = \sum_r n_r \varepsilon_r$ και δηλώνει την απουσία περιορισμών στα σύνολα των $\{n_r\}$. Επιπλέον, στο μεγαλοκανονικό ensemble η πιθανότητα εύρεσης n_r σωματίων στην μονοσωματιακή κατάσταση, που ορίζεται από το r, είναι από την εξ. (5.7) ανάλογη του $\exp[-\beta(\varepsilon_r - \mu)\, n_r]$, αφού αυτή η κατάσταση αφορά n_r σωμάτια με συνολική ενέργεια $\varepsilon_r n_r$, όπου ε_r είναι η ενέργεια ενός σωματίου ($\equiv \hbar^2k^2/2m$) ορμής $\hbar\vec{k}$ στην κατάσταση r που χαρακτηρίζεται από το κυματάνυσμα $\vec{k}$.

Εδώ θα πρέπει να αναφερθεί το θεμελιώδες αποτέλεσμα της κβαντικής μηχανικής ότι τα (μη διακρίσιμα) κβαντικά σωμάτια διακρίνονται, εν τούτοις, σε δύο είδη: σε μποζόνια και σε φερμιόνια. Σωμάτια με μηδέν ή ακέραιο σπιν είναι μποζόνια ενώ με ημιακέραιο σπιν είναι φερμιόνια. Όταν αυτά αποτελούνται από περισσότερα του ενός επιμέρους σωμάτια τότε λαμβάνουμε υπ' όψιν το συνολικό σπιν, π.χ. το ^{4}He αποτελείται από 2 ηλεκτρόνια, 2 πρωτόνια και 2 νετρόνια (το καθένα με σπιν $\frac{1}{2}$) με αποτέλεσμα άρτιο συνολικό αριθμό σωματίων σπιν $\frac{1}{2}$, και δίνει σωμάτια με ακέραιο συνολικό σπίν και



επομένως μποζόνια, ενώ το άτομο του ^3He με ένα νετρόνιο λιγώτερο έχει ημιακέραιο σπιν και είναι προφανώς φερμιόνιο. Τα αποτελέσματα αυτά της κβαντικής μηχανικής για τους αριθμούς κατάληψης στην περίπτωση των μη αλληλεπιδρώντων σωματίων δίνουν την δυνατότητα σε κάθε μονοσωματιακή κατάσταση να καταληφθεί από οποιονδήποτε ακέραιο αριθμό μποζονίων του ίδιου τύπου (στο Κεφ. 7 θα δούμε πως στην συμπύκνωση Bose-Einstein ο αριθμός αυτός μπορεί να γίνει και άπειρος), συμπεριλαμβανομένου και του μηδενός, ενώ για φερμιόνια του ίδιου τύπου ο αντίστοιχος αριθμός κατάληψης είναι 0 ή 1. Τα μποζόνια είναι, κατά μια έννοια, πιό "δημοκρατικά" γιατί δεν τα πειράζει να μοιράζονται την ίδια κατάσταση με άλλα παρόμοια σωμάτια ενώ τα "αριστοκρατικά" φερμιόνια καταλαμβάνουν επιλεκτικά, από ένα, την κάθε μονοσωματιακή κατάσταση. Επομένως, οι αθροίσεις στην εξ. (5.7) πρέπει να γίνουν με άνω όρια τα $X = \infty$ και 1 για μποζόνια και φερμιόνια, αντίστοιχα.

Το άθροισμα ως προς όλα τα δυνατά σύνολα κατάληψης $\{n_r\}$ στην εξ. (5.7) είναι τώρα εφικτό, επειδή το εκθετικό του αθροίσματος ισούται απλώς με το γινόμενο των εκθετικών

$$\exp\left[-\sum_r \beta(\varepsilon_r - \mu)\, n_r\right] = \prod_r \exp\left[-\beta(\varepsilon_r - \mu)\, n_r\right], \qquad (5.8)$$

αφού οι αριθμοί n_r μεταβάλλονται πλέον ανεξάρτητα για κάθε μονοσωματιακή κατάσταση $|r>$ λόγω του μεταβλητού ολικού αριθμού σωματίων N. Άρα, η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού είναι

$$Z = \sum_{\{n_r\}}^{X} \exp\left[-\sum_r \beta(\varepsilon_r - \mu)\, n_r\right]$$

$$= \prod_r \sum_{n_r=0}^{X} \exp\left[-\beta(\varepsilon_r - \mu)\, n_r\right]$$

$$= \sum_{n_1=0}^{X} [e^{-\beta(\varepsilon_1-\mu)}]^{n_1} \sum_{n_2=0}^{X} [e^{-\beta(\varepsilon_2-\mu)}]^{n_2} \sum_{n_3=0}^{X} [e^{-\beta(\varepsilon_3-\mu)}]^{n_3} \ldots \qquad (5.9)$$

και συνοπτικά



$$\boxed{\mathcal{Z} = \prod_{r} \sum_{n_r=0}^{X} [e^{-\beta(\varepsilon_r-\mu)}]^{n_r}} \quad . \qquad (5.10)$$

Σημείωση: Είδαμε στον υπολογισμό της $\mathcal{Z}$ πως το άθροισμα ως προς το σύνολο των αριθμών κατάληψης $\{n_r\}$ μπορεί να αντικατασταθεί με το γινόμενο απλών αθροισμάτων ως προς n_r στις στατιστικά ανεξάρτητες καταστάσεις $|r>$. Αυτό οφείλεται αποκλειστικά, στην χρήση του μεγαλοκανονικού ensemble που με την παρουσία του χημικού δυναμικού μ προϋποθέτει μεταβλητό αριθμό σωματίων N. Στην περίπτωση του υπολογισμού της κανονικής συνάρτησης επιμερισμού Z των N μη διακρίσιμων σωματίων

$$Z(N) = \sum_{\{n_r\}}^{X} [e^{-\beta\varepsilon_1}]^{n_1} \; [e^{-\beta\varepsilon_2}]^{n_2} \; [e^{-\beta\varepsilon_3}]^{n_3} \; \ldots$$

$$\neq \sum_{n_1=0}^{X} [e^{-\beta\varepsilon_1}]^{n_1} \sum_{n_2=0}^{X} [e^{-\beta\varepsilon_2}]^{n_2} \sum_{n_3=0}^{X} [e^{-\beta\varepsilon_3}]^{n_3} \; \ldots \; , \qquad (5.11)$$

επειδή τα αθροίσματα ως προς n_r για όλες τις μονοσωματιακές καταστάσεις $|r>$ στην εξ. (5.11) **δεν είναι ανεξάρτητα** λόγω του περιορισμού $\sum_r n_r = N$. Η εξ. (5.11) ισχύει ως ισότητα όταν η ε_r αντικατασταθεί από το $(\varepsilon_r - \mu)$, οπότε και η Z αντικαθίσταται από την μεγαλοκανονική $\mathcal{Z}$.

Παράδειγμα: N=2 σωμάτια μπορούν να καταλάβουν τρεις μονοσωματιακές καταστάσεις |1>, |2>, |3> με ενέργειες ε_1 και ε_2 και ε_3, αντίστοιχα. Να υπολογισθεί η κανονική συνάρτηση επιμερισμού Z των δύο σωματίων στην περίπτωση που αυτά είναι (i) μποζόνια και (ii) φερμιόνια, αφού προηγηθεί η καταγραφή όλων των δισωματιακών καταστάσεων και των ενεργειών τους.

(i). Γιά τα μποζόνια διακρίνουμε συνολικά 6 δισωματιακές καταστάσεις με σύνολα δεικτών κατάληψης {2,0,0}, {0,2,0}, {0,0,2}, {1,1,0}, {0,1,1} και {1,0,1} με ενέργειες $2\varepsilon_1$, $2\varepsilon_2$, $2\varepsilon_3$, $\varepsilon_1+\varepsilon_2$, $\varepsilon_2+\varepsilon_3$, $\varepsilon_1+\varepsilon_3$, αντίστοιχα. Επομένως, προκύπτει το ακριβές αποτέλεσμα :

$$Z(2)_{\mu\pi o\zeta} = \exp(-\beta 2\varepsilon_1) + \exp(-\beta 2\varepsilon_2) + \exp(-\beta 2\varepsilon_3)$$
$$+ \exp(-\beta\varepsilon_1 - \beta\varepsilon_2) + \exp(-\beta\varepsilon_2 - \beta\varepsilon_3) + \exp(-\beta\varepsilon_1 - \beta\varepsilon_3).$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(ii). Γιά τα φερμιόνια λαμβάνοντας υπ' όψιν και την απαγορευτική αρχή του Pauli διακρίνουμε συνολικά μόνο 3 δισωματιακές καταστάσεις με σύνολα δεικτών κατάληψης {1,1,0}, {0,1,1}, {1,0,1} και ενέργειες $\varepsilon_1+\varepsilon_2$, $\varepsilon_2+\varepsilon_3$, $\varepsilon_1+\varepsilon_3$, αντίστοιχα. Επομένως, έχουμε

$$Z(2)_{\text{φερμ}} = \exp(-\beta\varepsilon_1-\beta\varepsilon_2) + \exp(-\beta\varepsilon_2-\beta\varepsilon_3) + \exp(-\beta\varepsilon_1-\beta\varepsilon_3).$$

Παρατηρείσετε ότι τα αποτελέσματα αυτά δεν μπορούν να εξαχθούν εύκολα από την εξ. (5.11). Πρέπει να προσδιορισθούν οι τιμές που πρέπει να λάβουν οι n_1, n_2, n_3 ώστε να ικανοποιείται και η απαραίτητη συνθήκη $n_1 + n_2 + n_3 = 2$. Ένας τέτοιος υπολογισμός ασφαλώς δυσκολεύει για μεγαλύτερο N. Στο δεύτερο μέλος της εξ. (5.11) αν αφήσουμε ελεύθερα τα αθροίσματα ως προς n_1, n_2, n_3

$$\sum_{n_1=0}^{2} [e^{-\beta\varepsilon_1}]^{n_1} \sum_{n_2=0}^{2} [e^{-\beta\varepsilon_2}]^{n_2} \sum_{n_3=0}^{2} [e^{-\beta\varepsilon_3}]^{n_3}$$

$$= [1 + e^{-\beta\varepsilon_1} + e^{-2\beta\varepsilon_1}]\,[1 + e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-2\beta\varepsilon_2}][1 + e^{-\beta\varepsilon_3} + e^{-2\beta\varepsilon_3}], \quad (5.12)$$

και παρατηρούμε πως υπάρχουν 27 συνολικά όροι. Θα πρέπει να μειωθούν στους 6, αν τηρηθεί η υποχρεωτική συνθήκη σταθερού συνολικού αριθμού $n_1 + n_2 + n_3 = 2$ ώστε να πάρουμε την κανονική $Z(2)_{\text{μποζ}}$. Για την $Z(2)_{\text{φερμ}}$ που λαμβάνει υπ' όψιν και την απαγορευτική αρχή του Pauli έχουμε μια περαιτέρω μείωση σε 3 όρους. Σε αυτή την περίπτωση η οιονεί-κλασσική στατιστική Boltzmann δίνει το αποτέλεσμα $Z = \frac{1}{2!} z^2 = [\, e^{-\beta\varepsilon_1} + e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-\beta\varepsilon_3}]^2/2$ που περιλαμβάνει 9 όρους. Βέβαια, και η οιονεί κλασσική στατιστική απέχει πολύ από το ακριβές κβαντικό αποτέλεσμα, αφού ισχύει μόνο για μεγάλες τιμές της θερμοκρασίας και αριθμό σωματίων N. Από τα παραπάνω είναι προφανές πως αν δεν διατηρηθεί η συνθήκη σταθερού N, με άρση του περιορισμού $\sum_r n_r = N$, ο υπολογισμός πρέπει να γίνει για αυθαίρετο αριθμό σωματίων N κι όχι μόνο για N=2, εισάγοντας το σταθερό χημικό δυναμικό μ στο μεγαλοκανονικό ensemble μέσω της Z.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

5.2. Φερμιόνια

Για τα φερμιόνια η απαγορευτικη αρχή του Pauli επιτρέπει μόνον δύο τιμές, τις $n_r = 0$ και 1, στο άθροισμα ως προς n_r. Άρα, αφού κάνουμε το άθροισμα με X=1 στην εξ. (5.10) παίρνουμε εύκολα το γινόμενο, ώστε

$$Z_{\varphi\varepsilon\rho\mu} = \prod_r \{1 + \exp[-\beta(\varepsilon_r - \mu)]\} \qquad (5.13)$$

και λογαριθμίζοντας

$$\ln Z_{\varphi\varepsilon\rho\mu} = \sum_r \ln\left(1 + \exp[-\beta(\varepsilon_r - \mu)]\right). \qquad (5.14)$$

Ο αντίστοιχος μέσος αριθμός κατάληψης της μονοσωματιακής κατάστασης $|r\rangle$ είναι

$$\langle n_r\rangle_{\varphi\varepsilon\rho\mu} = \frac{\sum_{n_r} n_r [e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}]^{n_r}}{\sum_{n_r} [-\beta(\varepsilon_r - \mu)]^{n_r}}, \qquad (5.15)$$

αφού είδαμε παραπάνω πως η πιθανότητα κατάληψής της από n_r σωμάτια είναι ανάλογη του εκθετικού παράγοντα $[e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}]^{n_r}$, ενώ στον παρονομαστή υπάρχει η κανονικοποίηση των πιθανοτήτων. Από την εξ. (5.15) προκύπτει το αποτέλεσμα

$$\langle n_r\rangle_{\varphi\varepsilon\rho\mu} = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} + 1}. \qquad (5.16)$$

5.3. Μποζόνια

Για τα μποζόνια το άθροισμα ως προς n_r εκτείνεται από το 0 μέχρι το άπειρο (∞) και αποτελεί μία άπειρη γεωμετρική πρόοδο $\sum_n x^n$ που δίνει αθροιζόμενη ακριβώς $(1-x)^{-1}$. Άρα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$Z_{\mu\pi o\varsigma} = \prod_{r} \left\{ 1 - \exp\left[-\beta(\varepsilon_r - \mu)\right] \right\}^{-1} \qquad (5.17)$$

και λογαριθμίζοντας

$$\ln Z_{\mu\pi o\varsigma} = -\sum_{r} \ln\left(1 - \exp\left[-\beta(\varepsilon_r - \mu)\right]\right). \qquad (5.18)$$

Για να υπολογίσουμε τον μέσο αριθμό κατάληψης $<n_r>_{\mu\pi o\varsigma}$, που δίνεται από τον λόγο $\sum_{n=0}^{\infty} n\, x^n / \sum_{n=0}^{\infty} x^n$ με $x = \exp\left[-\beta(\varepsilon-\mu)\right]$, χρησιμοποιούμε το μαθηματικό κόλπο

$$\sum_{n=0}^{\infty} n\, x^n = x \frac{d}{dx} \sum_{n} x^n = x \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{1-x}\right) = \frac{x}{(1-x)^2} \qquad (5.19)$$

και το αποτέλεσμα $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$. Άρα,

$$<n_r>_{\mu\pi o\varsigma} = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} - 1} \,. \qquad (5.20)$$

5.4. Στατιστικές Fermi, Bose και Boltzmann

Οι παραπάνω εκφράσεις της κβαντικής στατιστικής που ελήφθησαν για φερμιόνια και μποζόνια συμπτύσσονται ως εξής:

$$\boxed{\ln Z_{\substack{\text{φερμ} \\ \text{μποζ}}} = \pm \sum_{r} \ln\left(1 \pm \exp\left[-\beta(\varepsilon_r - \mu)\right]\right)} \qquad (5.21)$$

και

$$\boxed{<n_r>_{\substack{\text{φερμ} \\ \text{μποζ}}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} \pm 1}}\,, \qquad (5.22)$$

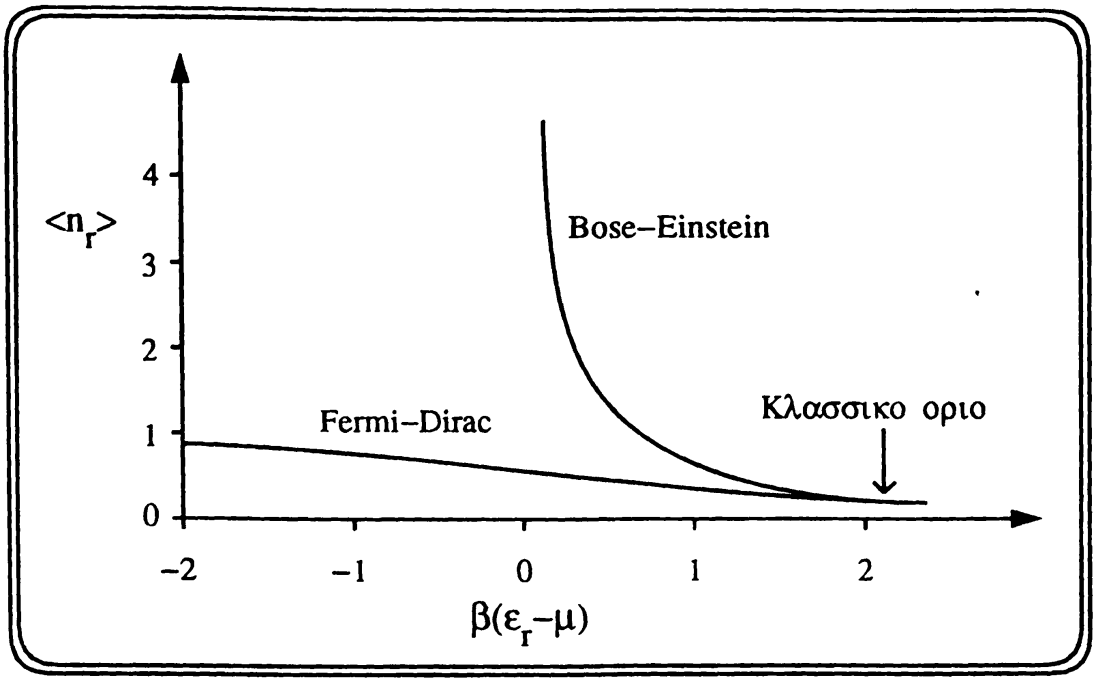
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με τα άνω πρόσημα για φερμιόνια και τα κάτω για μποζόνια, αντίστοιχα. Επομένως οι στατιστικές Fermi-Dirac (ή απλώς Fermi) και Bose-Einstein (ή απλώς Bose) διαφέρουν στις προηγούμενες εκφράσεις μόνο ως προς ένα πρόσημο, η Fermi με το + και η Bose με το −.

Για μικρό $e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}$ (ή $e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} >> 1$) τα ± 1 στις εκφράσεις στον παρανομαστή για τους μέσους αριθμούς κατάληψης $<n_r>$ είναι πολύ μικρά σε σχέση με τον όρο $e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)}$ και μπορούν να θεωρηθούν ίσα με το μηδέν. Αυτό συμβαίνει στο κλασσικό όριο υψηλής T (χαμηλού β) και η στατιστική που προκύπτει είναι η Maxwell-Boltzmann (ή απλώς Boltzmann). Η μέση τιμή του αριθμού κατάληψης είναι

$$\boxed{<n_r>_{Boltz} = e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}} \qquad (5.23)$$

και ειναι προφανές ότι στο όριο αυτό (στατιστική Boltzmann) δεν υπάρχει διαφορά μεταξύ των στατιστικών Bose και Einstein, ενώ αγνοείται η κβαντική υφή των σωματίων. Από την εξ. (3.65) η οιονεί-κλασσική προσέγγιση ισχύει όταν $T >> T_0$ και το χημικό δυναμικό μ είναι αρνητικό και μεγάλο. Η οιονεί-κλασσική συνθήκη ισοδυναμεί με τα όρια $\beta\mu \to -\infty$ και $\beta(\varepsilon_r - \mu) \to \infty$, αφού οι



Σχ. 5.1. Σύγκριση μέσων αριθμών κατάληψης $<n_r>$ των μονοσωματιακών καταστάσεων ενέργειας ε_r στις στατιστικές Fermi και Bose. Στο όριο μεγάλου $\beta(\varepsilon_r - \mu)$ οι δύο στατιστικές συμπίπτουν με το αποτέλεσμα της στατιστικής Boltzmann (εξ. 5.23).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

τιμές της μονοσωματιακής ενέργειας ε_r είναι θετικές(Σχ. 5.1).

Είναι προφανές από το Σχ. (5.1) ότι για τα φερμιόνια ο $<n_r>$ κυμαίνεται στο διάστημα μεταξύ 0 και 1 ενώ για τα μποζόνια μπορεί να λάβει αυθαίρετα υψηλές (θετικές βέβαια) τιμές. Παρατηρούμε ότι στο οιονεί-κλασσικό όριο (δεξιό μέρος της καμπύλης του Σχ. 5.1.) οι τρεις στατιστικές συμπίπτουν.

Άσκηση: Να δείξετε πως ισχύει η σχέση $<n_r> = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial(\ln Z)}{\partial(\varepsilon_r)}$. Με χρήση της να αποδείξετε τα αποτελέσματα για τους μέσους αριθμούς κατάληψης των στατιστικών Fermi, Bose και Boltzmann (εξ. 5.22, 5.23).

5.5. Θερμοδυναμικές συναρτήσεις στο μεγαλοκανονικό ensemble

Η θερμοδυναμική σχέση για την μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας $dE = TdS - PdV$, που ισχύει για μία αντιστρεπτή διαδικασία με σταθερό αριθμό σωματίων N, όταν μας ενδιαφέρουν και οι μεταβολές του αριθμού N (π.χ. στην εξάχνωση ενός υγρού) γίνεται

$$dE = TdS - PdV + \mu dN, \tag{5.24}$$

όπου $E = E(S,V,N)$, με τις S, V και N εκτατικές μεταβλητές. Ο όρος μdN δίνει την αλλαγή στην ενέργεια λόγω μεταβολής του αριθμού των σωματίων N, άρα

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V}, \tag{5.25}$$

που ορίζεται ως η αλλαγή στην εσωτερική ενέργεια όταν ένα σωμάτιο προστίθεται στο σύστημα, με σταθερές τις V και S. Η σταθερότητα της εντροπίας S κάνει μάλλον δύσχρηστη την προηγούμενη σχέση που μπορεί να βρεθεί και από την ελεύθερη ενέργεια Helmholtz $F = E - TS$, που είναι η ενέργεια του συστήματος σε πεπερασμένη θερμοκρασία T, μέσω της

$$\begin{aligned} dF &= dE - TdS - SdT \\ &= -PdV + \mu dN - SdT \quad , \end{aligned} \tag{5.26}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ώστε $F = F(V, N, T)$ με

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} \qquad (5.27)$$

Στο κανονικό ensemble η χρήση της $F = -k_B T \ln Z$ δίνει

$$\mu = -k_B T \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial N}\right)_{T,V} . \qquad (5.28)$$

Από την ελεύθερη ενέργεια Gibbs $G \equiv E + PV - TS$ προκύπτει η νέα διαφορική σχέση

$$dG = dE + PdV + VdP - TdS - SdT$$

$$= VdP - SdT + \mu dN . \qquad (5.29)$$

Επειδή όλα τα σωμάτια είναι ισοδύναμα η $G(T, P, N)$ πρέπει να είναι εκτατική (δηλ. ανάλογη του N) μεταβλητή, ώστε να ισχύει η σχέση

$$G(T,P,N) = N \cdot G'(T,P) , \qquad (5.30)$$

όπου η συνάρτηση G' είναι ανεξάρτητη του N. Επειδή από την εξ. (5.29) και λόγω της εξ. (5.30)

$$\mu = \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{P,T} = G'(T,P) = \frac{G(T,P,N)}{N} , \qquad (5.31)$$

που επιτρέπει τον ορισμό του χημικού δυναμικού μ ως την ελεύθερη ενέργεια Gibbs ανά σωμάτιο του συστήματος.

Η ελεύθερη ενέργεια Gibbs ορίζεται (από την εξ. 5.30) και ως

$$G = E + PV - TS = \mu N , \qquad (5.32)$$

και το μεγαλοκανονικό δυναμικό

$$\Omega = E - TS - \mu N = -PV . \qquad (5.33)$$

Αντίστοιχα, η εντροπία S στο μεγαλοκανονικό ensemble είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$S = -k_B \sum_N \sum_n p_{N,n} [\beta \mu N - \beta E_{N,n} - \ln Z]$$

$$= \frac{E}{T} - \frac{\mu N}{T} + k_B \ln Z \quad , \tag{5.34}$$

όπου οι θερμοδυναμικές μεταβλητές E και N αντικαθιστούν στο μακροσκοπικό σύστημα τις μέσες τιμές της ενέργειας και του αριθμού σωματίων, αντίστοιχα. Από την έκφραση για την S και το ορισμό της G (εξ. 5.32, 5.33)

$$\Omega = E - TS - G, \tag{5.35}$$

άρα

$$G = E - TS - \Omega \quad , \tag{5.36}$$

απ' όπου προκύπτει η νέα "εξίσωση γέφυρας"

$$\Omega = -PV = -k_B T \ln Z \quad . \tag{5.37}$$

Η πίεση P, ο μέσος αριθμός σωματίων N, η εντροπία S και η μέση ενέργεια E (παραλείπουμε και εδώ τα σύμβολα της μέσης τιμής < >) δίνονται από τις σχέσεις που προκύπτουν από την $d\Omega = dE - TdS - SdT - \mu dN - Nd\mu = (TdS - PdV + \mu dN) - TdS - SdT - \mu dN - Nd\mu = -PdV - SdT - Nd\mu$, ώστε και με χρήση της εξ. (5.21) :

♦ $$P = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right)_{\mu,T} = k_B T \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{\mu,T}$$

$$= -\sum_r \frac{d\varepsilon_r}{dV} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} \pm 1} \quad . \tag{5.38}$$

♦ $$N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{V,T} = k_B T \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \mu}\right)_{V,T}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \sum_{r} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} \pm 1} \quad . \qquad (5.39)$$

- $$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} = k_B \ln Z + k_B T \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_{V,\mu}$$

$$= \frac{E}{T} - \frac{\mu N}{T} + k_B \ln Z$$

$$= \frac{E}{T} - \frac{\mu N}{T} \pm k_B \sum_{r} \ln\left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}\right) . \qquad (5.40)$$

- $$E = \mu N - PV + TS$$

$$= k_B T \mu \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \mu}\right)_{V,T} - k_B T \ln Z + k_B T \ln Z + k_B T^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_{V,\mu}$$

$$= k_B T \mu \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \mu}\right)_{V,T} + k_B T^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_{V,\mu}$$

$$= \sum_{r} \varepsilon_r \left(\exp\left[\beta(\varepsilon_r - \mu)\right] \pm 1\right)^{-1} . \qquad (5.41)$$

Με τις παραπάνω σχέσεις για την πίεση P, τον ολικό αριθμό σωματίων N, την εντροπία S και την ενέργεια E (5.38, 5.39, 5.40, 5.41) παρατηρούμε πως το πρόβλημα ανάγεται σε αυτό του ενός σωματίου και απομένουν πλεόν να γίνουν οι αθροίσεις σε όλες τις μονοσωματιακές καταστάσεις με δείκτη r.

Από τον τύπο (5.39) για την μέση τιμή του N προκύπτει

$$N = \sum_{r} \langle n_r \rangle \quad , \qquad (5.42)$$

ενώ για την μέση ενέργεια (εξ. 5.41)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$E = \sum_r \langle n_r \rangle \varepsilon_r \,. \qquad (5.43)$$

όπου χρησιμοποήσαμε το γεγονός πως η μέση ή παρατηρήσιμη, τιμή ισοδυναμεί με την ενέργεια της κατάστασης ενός σωματίου πολλαπλασιασμένη επί τον μέσο αριθμό των σωματίων στην κατάσταση αυτή και στην συνέχεια άθροισμα σε όλες τις καταστάσεις. Επίσης η πίεση P (εξ. 5.38) με χρήση της σχέσης για την μονοσωματιακή τιμή της ενέργειας (Κεφ. 2.5.) $\varepsilon_r = \frac{\sigma\tau\alpha\theta.}{V^{2/3}}$, αφού $\frac{d\varepsilon_r}{dV} = -\frac{2\varepsilon_r}{3V}$, δίνεται από την

$$P = -\sum_r \langle n_r \rangle \frac{d\varepsilon_r}{dV}$$

$$= \frac{2}{3} \sum_r \langle n_r \rangle \frac{\varepsilon_r}{V}$$

$$= \frac{2}{3} \frac{E}{V} \,, \qquad (5.44)$$

ένα αποτέλεσμα που το συναντήσαμε και αλλού και έχει ισχύ τόσο στην κλασσική όσο και την κβαντική στατιστική του ιδανικού αερίου.

5.6. Το κλασσικό αέριο. Μιά ακόμη (τελευταία) επίσκεψη

Θα υπολογίσουμε τώρα τις ιδιότητες του κλασσικού ιδανικού αερίου κβαντομηχανικά (στο μεγαλοκανονικό ensemble) και μετά θα πάρουμε το κλασσικό όριο. Η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού είναι

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{n_r\}} \exp\left[-\beta \sum_r (\varepsilon_r - \mu)\, n_r\right] = \left(\sum_{n_1=0}^{X} e^{-\beta(\varepsilon_1-\mu)n_1} \right) \left(\sum_{n_2=0}^{X} e^{-\beta(\varepsilon_2-\mu)n_2} \right) \ldots, \qquad (5.45)$$

όπου το πολλαπλό άθροισμα δηλώνει ανεξάρτητες αθροίσεις σε όλα τα n_r, για όλες τις καταστάσεις r, και σε τιμές συνεπείς με την κατάλληλη στατιστική. Το

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

πλεονέκτημα του μεγαλοκανονικού ensemble είναι η απουσία περιορισμών στις αθροίσεις ως προς n_r (ενώ στο κανονικό ensemble είδαμε πως η συνθήκη $\sum_r n_r = N$ δημιουργεί προβλήματα που εκφράζονται από την αδυναμία μας να μετατρέψουμε το πρόβλημα σε ανεξάρτητα αθροίσματα ως προς n_r). Η Z γράφεται με το γινόμενο

$$Z = \prod_r z_r \ldots, \tag{5.46}$$

με

$$z_r = \sum_{n_r} \exp\left[-\beta(\varepsilon_r - \mu)\, n_r\right] . \tag{5.47}$$

Το κλασσικό όριο, αφού το χημικό δυναμικό είναι αρνητικό και μεγάλο, αντιστοιχεί στο $\beta\mu \to -\infty$. Όταν $\beta\mu \to -\infty$ το εκθετικό $e^{\beta\mu}$ είναι πολύ μικρό και το $e^{\beta(\varepsilon-\mu)}$ είναι πολύ μεγάλο, αφού η ενέργεια $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ δεν είναι ποτέ αρνητική. Επομένως στην κατανομή Boltzmann ο μέσος αριθμός κατάληψης στην μονοσωματιακή κατάσταση κατάσταση $|r>$ είναι (εξ. 5.23)

$$<n_r> = e^{\beta\mu} e^{-\beta\varepsilon_r} << 1 \quad , \tag{5.48}$$

Αν ορίσουμε την ποσότητα

$$\lambda = e^{\beta\mu} \quad , \tag{5.49}$$

στο παραπάνω όριο ισχύει $\lambda << 1$. Επομένως, με αντικατάσταση στην εξ. (5.47), στην πρώτη τάξη ως προς λ, έχουμε

$$z_r = \sum_{n_r} \exp\left[-\beta\,(\varepsilon_r - \mu)\, n_r\right] \approx 1 + \lambda\, e^{-\beta\varepsilon_r} \quad , \tag{5.50}$$

ανεξάρτητα από το είδος της στατιστικής των σωματίων. Άρα,

$$\Omega = -k_B T \ln Z$$

$$= -k_B T \sum_r \ln z_r$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \sum_r \Omega_r \ , \qquad (5.51)$$

όπου $\Omega_r = -k_B T \ln z_r = -k_B T \ln [1 + \lambda e^{-\beta\varepsilon_r}]$. Από το ανάπτυγμα μικρού x: $\ln(1+x) = x - x^2/2 + \ldots$, στην πρώτη τάξη ως προς λ, προκύπτει

$$\Omega_r = -k_B T \ \lambda e^{-\beta\varepsilon_r} \qquad (5.52)$$

και

$$\boxed{\Omega = -k_B T \lambda \sum_r e^{-\beta\varepsilon_r}} \ . \qquad (5.53)$$

Ο μέσος αριθμός σωματίων δίνεται από την εξ. (5.5) και την (5.53)

$$N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = \lambda \sum_r e^{-\beta\varepsilon_r} = -\frac{\Omega}{k_B T} \qquad (5.54)$$

ενώ ο μέσος αριθμός κατάληψης της μονοσωματιακής στάθμης $|r\rangle$ είναι

$$\langle n_r \rangle = -\frac{\partial\Omega_r}{\partial\mu} = \lambda e^{-\beta\varepsilon_r} \ . \qquad (5.55)$$

Επομένως, από τις (εξ. 5.54) και (5.55) προκύπτει η εξ. 5.42 που δηλώνει

$\sum_r \langle n_r \rangle = N$. Επιπλέον, από τις σχέσεις $\Omega = -k_B T N$ και $\Omega = -PV$ έπεται η

$$\boxed{P V = N k_B T} \ , \qquad (5.56)$$

που είναι ο γνωστός νόμος των ιδανικών αερίων. Η εξ. (5.56) αν συνδυασθεί με την σχέση για την ενέργεια E (εξ. 5.44) προκύπτει, επίσης, το γνωστό θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας ΘΙΚ.

Στην προσέγγιση αυτή συναρτήσει της κανονικής συνάρτησης επιμερισμού z (του ενός σωματίου)

$$N = \lambda \ z = \lambda \frac{V}{V_Q} \ , \qquad (5.57)$$

απ' όπου

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\lambda = \frac{N}{V} \cdot V_Q \qquad (5.58)$$

με $\frac{N}{V}$ την πυκνότητα σωματίων του αερίου (σωμάτια ανά μονάδα όγκου).

Από τα παραπάνω το κλασσικό όριο μπορεί να διατυπωθεί και ως

$$\lambda << 1\,, \quad \frac{N}{V} V_Q << 1 \qquad (5.59)$$

ή

$$V_Q << \frac{V}{N} \Leftrightarrow \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{3/2} << \frac{V}{N}$$

$$\Leftrightarrow T >> \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = N^{2/3} \frac{4}{\pi} \Theta_\mu\,, \qquad (5.60)$$

όπου $\Theta_\mu = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mk_B V^{2/3}}$ είναι η χαρακτηριστική θερμοκρασία λόγω μεταφορικής κίνησης. Στο όριο αυτό η πυκνότητα σωματίων $\frac{N}{V}$ τείνει στο μηδέν για σταθερή Τ, ενώ η θερμοκρασία Τ τείνει στο άπειρο για σταθερή πυκνότητα σωματίων $\frac{N}{V}$. Ισοδύναμα, το κλασσικό όριο λαμβάνεται όταν η κβαντομηχανική σταθερά h τείνει στο μηδέν, δηλ. έχουμε απουσία της κβαντικής μηχανικής.

Αφού θυμηθούμε από το Κεφ. 3. (εξ. 3.66) ότι $V_Q \sim \lambda_{DB}^3$ και $V/N = a^3$, όπου λ_{DB} είναι το μέσο θερμικό μήκος κύματος De Broglie και a η απόσταση μεταξύ των σωματίων, προκύπτει ότι η κλασσική προσέγγιση ισχύει όταν

$$\lambda_{DB} << a, \qquad (5.61)$$

δηλ. μήκος κύματος λ_{DB} είναι μικρότερο από την απόσταση μεταξύ των σωματίων a.

Παράδειγμα 1: Για τον αέρα $a \sim 30\mathring{A}$ και $\lambda_{DB} \sim 0.2A$ ενώ για τα ηλεκτρόνια των μετάλλων $a \sim 3\mathring{A}$ και $\lambda_{DB} \sim 30A$. Επομένως, σύμφωνα με την συνθήκη (εξ. 5.61) ο αέρας μπορεί να θεωρηθεί προσεγγιστικά ως ιδανικό αέριο ενώ η

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

αγωγιμότητα των μετάλλων είναι αδύνατον να ερμηνευθεί χωρίς την κβαντική μηχανική (Κεφ. 6).

Στο κλασσικό όριο αυτό η ελεύθερη ενέργεια Helmholtz F προκύπτει από την ελεύθερη ενέργεια Gibbs G μέσω

$$G = \mu N = E - TS + PV = F + PV = F - \Omega$$

$$\Leftrightarrow \quad F = \mu N + \Omega \quad . \tag{5.62}$$

Έτσι με χρήση και της $\Omega = -N/\beta$ από την εξ. (5.54) η παραπάνω έκφραση για την F γίνεται

$$F = -\frac{N}{\beta}(1 - \beta\mu)$$

$$= -\frac{N}{\beta}(1 - \ln[\frac{N}{V}V_Q]) = -k_BT\,N + k_BT\,N \ln(\frac{N}{V}V_Q)\,. \tag{5.63}$$

Άρα η εντροπία δίνεται από την σχέση

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V}$$

$$= Nk_B[1 - \ln(\frac{N}{V}V_Q)] - N\,k_BT\,\frac{\partial}{\partial T}\ln(\frac{N}{V}V_Q)\,, \tag{5.64}$$

όπου V_Q είναι ο κβαντικός όγκος. Μετά την παραγώγιση ως προς T προκύπτει πάλι η

$$\boxed{\frac{S}{Nk_B} = \frac{5}{2} - \ln(\frac{N}{V}V_Q)} \quad , \tag{5.65}$$

γνωστή και ως εξίσωση Sackur-Tetrode (που την είδαμε και στην εξ. 3.54). Αφού $E = F + T\,S$ έχουμε για την μέση ενέργεια

$$E = -k_BT\,N + k_BT\,N \ln(\frac{N}{V}V_Q) + \frac{5}{2}\,Nk_BT - Nk_BT \ln(\frac{N}{V}V_Q)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \frac{3}{2} N k_B T , \qquad (5.66)$$

σε συμφωνία με το πολύ γνωστό θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας (ΘΙΚ).

Από τα παραπάνω παρατηρούμε ότι στις ποσότητες μ και S υπάρχει η κβαντική μηχανική, ακόμη και στο οιονεί-κλασσικό όριο, ενώ οι P και E είναι αγνές κλασσικές ποσότητες. Επομένως, χωρίς την κβαντική μόνο μερικώς είναι κατανοητό το κλασσικό ιδανικό αέριο. Μόλις αρχίσουμε να μετρούμε τις καταστάσεις, όπως απαιτείται π.χ. στην περίπτωση της εντροπίας, υπεισέρχονται κβαντικά φαινόμενα.

Παράδειγμα 2: Ακόμη και χωρίς την κβαντική στατιστική, μόνο με την καταστατική εξίσωση $PV=N k_B T$ και την ενέργεια (5.66), έχουμε για την εντροπία (εξ. 5.65):

$$\frac{S}{Nk_B} = \ln (\sigma\tau\alpha\theta_1 \, V \, T^{3/2} / N)$$

$$= \ln (\sigma\tau\alpha\theta_2 \, V \, E^{3/2} / N^{5/2})$$

$$= \ln (\sigma\tau\alpha\theta_3 \, T^{5/2} / P) \ . \qquad (5.67)$$

Έτσι, π.χ. στην αδιαβατική εκτόνωση όπου S/N = σταθ. η πίεση μεταβάλλεται από την τρίτη σχέση της εξ. (5.67) ως $P \sim T^{5/2}$ ενώ προκύπτουν από την εξ. (5.67) και οι γνωστές (ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι) θερμοδυναμικές σχέσεις

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{3}{2} N k_B \quad , \qquad C_P = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{P,N} = \frac{5}{2} N k_B \ ,$$

$$C_P - C_V = N k_B = R \ . \qquad (5.68)$$

Άλλα παραδείγματα μπορούν να δοθούν στην περίπτωση των μιγμάτων αερίων, όπου από την εξ. (5.67) μπορεί να υπολογισθεί και η αύξηση στην εντροπία που προκύπτει λόγω ανάμιξης των αερίων (εξ. 3.21). Αναφέρουμε, επίσης, πως το αποτέλεσμα για την πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων ε

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

του ενός ελεύθερου σωματίου σε κουτί όγκου V, που μελετήθηκε ήδη στο Κεφ. 2, είναι προσεγγιστικό και ισχύει μόνο στο όριο υψηλής T όπου η ε μπορεί να θεωρηθεί ως οιονεί-συνεχής μεταβλητή. Για τα αέρια (κλασσικό και Fermi) το λάθος για τις χαμηλές στάθμες δεν είναι σημαντικό, αφού η κατάληψη σε αυτά δεν είναι μεγαλύτερη του ενός σωματίου για κάθε κατάσταση. Επομένως, σχεδόν για κάθε θερμοκρασία T ικανοποιείται η συνθήκη $T>>\Theta_\mu$ και ισχύει η εξίσωση για την ρ(ε) που λάβαμε (εξ. 2.28) στο Κεφ. 2. Το πρόβλημα προκύπτει μόνο για την στατιστική Bose όπου σε χαμηλές T οι χαμηλές ενεργειακές στάθμες εποικίζονται σημαντικά και εμφανίζεται το στο φαινόμενο της συμπύκνωσης Bose-Einstein(Κεφ. 7).

Άσκηση 1: Να υπολογισθεί το χημικό δυναμικού μ(T) μονοατομικών σωματίων με σπίν s στην κλασσική στατιστική (Boltzmann ή Maxwell-Boltzmann ή MB).

Λύση:

Υπολογίζεται από την συνθήκη σταθερού μέσου αριθμού σωματίων N (για $T>>\Theta_\mu$ οι διακρίσεις μεταξύ στατιστικών Fermi και Bose δεν ισχύουν)

$$N = \sum_r [e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} \pm 1]^{-1}$$

$$= \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\, [e^{\beta(\varepsilon - \mu)} \pm 1]^{-1}\, d\varepsilon$$

$$= \frac{2\,(2s+1)\,V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2}\, [e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \pm 1]^{-1}\, d\varepsilon\,, \qquad (5.69)$$

όπου λαμβάνεται υπ' όψιν και ο εκφυλισμός 2s +1 των μονοσωματιακών καταστάσεων λόγω του σπίν s. Στό όριο της οιονεί-κλασσικής στατιστικής αγνοείται ο παράγοντας ± 1, άρα,

$$N = \frac{2\,(2s+1)\,V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2}\, e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\, d\varepsilon\,, \qquad (5.70)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και με την αλλαγή των μεταβλητών

$$\beta\,\varepsilon = x, \quad \beta\, d\varepsilon = dx \tag{5.71}$$

το ολοκλήρωμα υπολογίζεται επακριβώς (ΠΑΡΑΡΤ. Α)

$$\int_0^\infty \varepsilon^{1/2}\, e^{-\beta\varepsilon}\, d\varepsilon = \frac{1}{\beta^{3/2}} \int_0^\infty dx\, e^{-x}\, x^{1/2} = \frac{\Gamma(3/2)}{\beta^{3/2}} \,. \tag{5.72}$$

Επομένως,

$$N = \frac{2\,(2s+1)\,V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\beta\mu} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2}\, e^{-\beta\varepsilon}\, d\varepsilon$$

$$= \frac{2\,(2s+1)\,V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\beta\mu}\, \frac{\Gamma(3/2)}{\beta^{3/2}} \,,$$

$$= \frac{2\,(2s+1)\,V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\beta\mu}\, \frac{\sqrt{\pi}}{2} \,. \tag{5.73}$$

Επιλύοντας ως προς μ(T)

$$\boxed{\mu(T) = -k_BT \ln\left[\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot (2s+1)\,\frac{V}{N}\right]} \,. \tag{5.74}$$

Από την έκφραση (εξ. 2.37) για την συνάρτηση επιμερισμού του ενός σωματίου z το χημικό δυναμικό γράφεται

$$\mu(T) = -k_BT \ln\frac{z}{N} = -k_BT \ln\frac{1}{V_Q\frac{N}{V}} \,, \tag{5.75}$$

απ' όπου παρατηρούμε πως στα πλαίσια της οιονεί-κλασσικής συνθήκης απαιτείται μεγάλη z και μικρός αριθμός σωματίων N (z>>N), και αφού η z μετράει καταστάσεις, σημαίνει πολλές καταστάσεις και λίγα σωμάτια (αραιά εποικισμένες). Το χημικό δυναμικό στην οιονεί-κλασσική έκφραση της εξ. (5.74) είναι μεγάλο και αρνητικό.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

5.7. Κβαντικές διορθώσεις στην καταστατική εξίσωση $PV = N k_B T$

Οι αριθμοί κατάληψης στα αέρια Fermi(+) και Bose(−) αντίστοιχα οδηγούν στην εξίσωση

$$N = \sum_r \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} \pm 1} \quad , \tag{5.76}$$

για τον μέσο αριθμό σωματίων N (παραλείποντας τις < >). Εάν θεωρήσουμε την μονοσωματιακή πυκνότητα καταστάσεων ρ(ε) και συμπεριλάβουμε και το σπιν s

$$N = \frac{2}{\sqrt{\pi}} V (2s + 1) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} \pm 1} \quad , \tag{5.77}$$

με την αλλαγή μεταβλητών βε=x υπολογίζουμε την πυκνότητα του αερίου (αριθμός μορίων ανά μονάδα όγκου) N/V

$$\frac{N}{V} = \frac{2(2s + 1)}{\sqrt{\pi}\, V_Q} \int_0^\infty dx \; \frac{x^{1/2}}{e^{x - \beta\mu} \pm 1} \, , \tag{5.78}$$

με τον κβαντικό όγκο $V_Q = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T} \right)^{3/2}$.

Για το μεγαλοκανονικό δυναμικό $\Omega = -k_B T \ln Z$ και την πίεση P προκύπτουν (βε = x) αντίστοιχα οι σχέσεις:

$$\Omega = \mp k_B T \int_0^\infty d\varepsilon \, \rho(\varepsilon) \ln \left[1 \, e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}\right]$$

$$= \mp \frac{2(2s+1)}{\sqrt{\pi}} k_B T \frac{V}{V_Q} \int_0^\infty dx \; x^{1/2} \ln \left[1 \pm e^{\beta\mu - x}\right] \, . \tag{5.79}$$

και αφού $\Omega = - P V$

$$P = - \frac{\Omega}{V} = \frac{2}{3} \frac{2(2s + 1)}{\sqrt{\pi}} \frac{k_B T}{V_Q} \int_0^\infty dx \; \frac{x^{3/2}}{e^{x - \beta\mu} \pm 1} \, . \tag{5.80}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Παρατηρείστε πως το πρόσημο $\pm$ αναιρείται τώρα με το $\mp$. Στην τελευταία σχέση οδηγούμεθα αφού έχει προηγηθεί μια ολοκλήρωση κατά παράγοντες.

$$\int_0^\infty dx\ x^{1/2} \ln [1 \pm e^{\beta\mu - x}] = \frac{2}{3} \int_0^\infty dx^{3/2} \cdot \ln [1 \pm e^{\beta\mu - x}] , \qquad (5.81)$$

στην εξ. (5.79). Άρα,

$$PV = \frac{2}{3} E , \qquad (5.82)$$

με

$$E = (2s + 1) \sum_r \varepsilon_r \langle n_r \rangle$$

$$= \frac{2(2s + 1)V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}\, d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} \pm 1} \qquad (5.83)$$

και με $\beta\varepsilon = x$, $V_Q = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T} \right)^{3/2}$

$$E = \frac{2(2s + 1)}{\sqrt{\pi}} k_B T \frac{V}{V_Q} \int_0^\infty dx\ \frac{x^{3/2}}{e^{x - \beta\mu} \pm 1} . \qquad (5.84)$$

Η σχέση $PV = \frac{2}{3} E$ ισχύει για την κλασσική αλλά και την κβαντική μηχανική, με την προϋπόθεση ότι δεν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματίων ενώ είναι απαραίτητη και η τετραγωνική σχέση διασποράς $\varepsilon \sim k^2$, ώστε η $\rho(\varepsilon)$ να αυξάνει με τον νόμο $\varepsilon^{1/2}$.

Είμαστε σε θέση τώρα να υπολογίσουμε τις κβαντικές διορθώσεις στην $PV = Nk_BT$ σε υψηλές T : Στο όριο αυτό ισχύει ότι

$$\lambda = e^{\beta\mu} << 1 , \qquad (5.85)$$

που ισοδυναμεί με $\beta\mu \to -\infty$. Μπορούμε, επομένως, να αναπτύξουμε τους παρανομαστές του ολοκληρώματος στην εξ. (5.84)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\int_0^\infty dx \; \frac{x^{3/2}}{e^{x-\beta\mu} \pm 1} = \int_0^\infty dx \; x^{3/2} \, e^{-x+\beta\mu} \; \{ 1 \mp e^{\beta\mu - x} + e^{2(\beta\mu - x)} \pm \dots \} \quad (5.86)$$

και με τα ολοκληρώματα του ΠΑΡΑΡΤ.Α

$$\int_0^\infty dx \; x^{n-1} \, e^{-mx} = \frac{\Gamma(n)}{m^n} \quad , \qquad (5.87)$$

άρα

$$\int_0^\infty dx \; \frac{x^{3/2}}{e^{x-\beta\mu} \pm 1} = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \; e^{\beta\mu} \; \{ 1 \mp \frac{e^{\beta\mu}}{2^{5/2}} + \frac{e^{2\beta\mu}}{3^{5/2}} \mp \dots \} \qquad (5.88)$$

ώστε

$$P = \frac{(2s+1) \, k_B T}{V_Q} \, e^{\beta\mu} \; \{ 1 \mp \frac{e^{\beta\mu}}{2^{5/2}} + \frac{e^{2\beta\mu}}{3^{5/2}} \mp \dots \} \qquad (5.89)$$

και

$$\frac{N}{V} = \frac{(2s+1) \, e^{\beta\mu}}{V_Q} \; \{ 1 \mp \frac{e^{\beta\mu}}{2^{3/2}} + \frac{e^{2\beta\mu}}{3^{3/2}} \mp \dots \} \, . \qquad (5.90)$$

Στην πρώτη τάξη ως προς λ $\left(\lambda = e^{\beta\mu} = V_Q \cdot \frac{N}{V} \frac{1}{(2s+1)} \right)$

$$\frac{N}{V} \approx \frac{(2s+1) \, e^{\beta\mu}}{V_Q} \left(1 \mp \frac{\frac{N}{V} V_Q}{2^{3/2} (2s+1)} \right)$$

$$\Leftrightarrow \frac{(2s+1) \, e^{\beta\mu}}{V_Q} \approx \frac{N}{V} \frac{1}{1 \mp \frac{V_Q \cdot \frac{N}{V}}{2^{3/2} (2s+1)}}$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{(2s+1) \, e^{\beta\mu}}{V_Q} \approx \frac{N}{V} \left(1 \pm \frac{\frac{N}{V} V_Q}{2^{3/2} (2s+1)} \right) \, . \qquad (5.91)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Στην εξ. (5.91) λάβαμε υπ' όψιν το ανάπτυγμα μικρού x: $(1\pm x)^{-1} = 1 \mp x$. Με αντικατάσταση στην έκφραση (εξ. 5.90) για την πίεση P

$$\frac{P}{\frac{N}{V}k_BT} \approx \left(1 \pm \frac{\frac{N}{V}V_Q}{2^{3/2}(2s+1)}\right)\left(1 \mp \frac{e^{\beta\mu}}{2^{5/2}} + \frac{e^{2\beta\mu}}{3^{5/2}} \mp \dots\right) . \qquad (5.92)$$

Στην πρώτη προσέγγιση για το $e^{\beta\mu}$ από την εξ. (5.91) προκύπτει

$$\frac{P}{\frac{N}{V}k_BT} \approx 1 \pm \frac{1}{2^{3/2}} \frac{\frac{N}{V}V_Q}{(2s+1)} \mp \frac{e^{\beta\mu}}{2^{5/2}}$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{\frac{P}{N k_BT} \approx 1 \pm \frac{1}{2^{5/2}} \frac{\frac{N}{V}V_Q}{(2s+1)}} , \qquad (5.93)$$

ή

$$PV = N k_BT \pm \frac{N^2 k_BT V_Q}{2^{5/2}(2s+1)V} . \qquad (5.94)$$

Με το παραπάνω αποτέλεσμα εισάγονται διορθώσεις στην καταστατική εξίσωση $PV=Nk_BT$. Μπορεί να συγκριθεί με "αναπτύγματα ισχυρότητας" παρουσία αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σωματίων. Προκύπτει πως τα κβαντικά φαινόμενα σε υψηλές θερμοκρασίες T έχουν ρόλο παρόμοιο με αυτό των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σωματίων και είναι απωθητικές για τα φερμιόνια, αφού η πίεση P αυξάνει, και ελκτικές για τα μποζόνια αφού η πίεση P μειώνεται.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ:

Ο μέσος αριθμός κατάληψης των μονοσωματιακών καταστάσεων r στην στατιστική Fermi-Dirac(FD) και Bose-Einstein(BE) είναι

$$\boxed{\langle n_r \rangle_{\substack{\text{φερμ} \\ \text{μπος}}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} \pm 1}} \quad , \tag{5.95}$$

με το άνω πρόσημο (+) για σωμάτια ημιακέραιου σπιν φερμιόνια και το κάτω (−) για σωμάτια ακέραιου ή μηδενικού σπιν μποζόνια, αντίστοιχα. Στο οιονεί-κλασσικό όριο υψηλής Τ προκύπτει η στατιστική Maxwell-Boltzmann (MB) ή απλώς Boltzmann με μέση τιμή του αριθμού κατάληψης

$$\boxed{\langle n_r \rangle_{\text{Boltz}} = e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}} \quad . \tag{5.96}$$

Οι σχέσεις (5.95) και (5.96) λαμβάνονται στο μεγαλοκανονικό ensemble (κατανομή Gibbs) που επιτρέπει στον ολικό αριθμό των σωματίων N να λάβει οποιανδήποτε τιμή, διατηρώντας σταθερή την τιμή του χημικού δυναμικού μ. Η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού είναι το γινόμενο

$$\boxed{Z = \prod_r \sum_{n_r=0}^{X} [e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}]^{n_r}} \quad , \tag{5.97}$$

των μεγαλοκανονικών συναρτήσεων για κάθε κατάσταση, που σημαίνει ότι τα σωμάτια καταλαμβάνουν, ανεξαρτήτως το ένα από το άλλο, τις μονοσωματιακές καταστάσεις με ενέργεια $\varepsilon_r - \mu$ που μετρείται από το χημικό δυναμικό μ. Από την εξ. (5.97) υπολογίζονται οι μέσοι αριθμοί κατάληψης (εξ. 5.95, 5.96), και οι υπόλοιπες θερμοδυναμικές ποσότητες, π.χ. ο μέσος αριθμός σωματίων

$$\boxed{\langle N \rangle = k_B T \frac{\partial(\ln Z)}{\partial \mu}} \quad . \tag{5.98}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ:

1. Να περιγράψετε τις στατιστικές Fermi-Dirac (FD), Bose-Einstein (BE) και Maxwell-Boltzmann(MB). Σε τι είδους σωμάτια αναφέρονται και πώς αντιμετωπίζουν το πρόβλημα της μη διακρισιμότητας των σωματίων;

2. Να απαντήσετε στο ερώτημα: γιατί η διάκριση μεταξύ των στατιστικών FD, BE, και MB παύει να είναι σημαντική στο όριο υψηλής θερμοκρασίας T; (Μην αναφέρετε απλώς τους τύπους και προσπαθείστε να δώσετε μια απάντηση που να βασίζεται στη φυσική).

3. Γιατί αναγκαζόμαστε να χρησιμοποιήσουμε το μεγαλοκανονικό ensembe στην περίπτωση της κβαντικής στατιστικής; Επηρεάζει η επιλογή του στατιστικού ensemble στο θερμοδυναμικό όριο;

4. Γιατί στις περιπτώσεις του φωνονικού αερίου (3N ανεξάρτητοι αρμονικοί ταλαντωτές που περιγράφουν τις ταλαντώσεις του κρυστάλλου) δεν απαιτείται η χρήση του μεγαλοκανονικού ensembe;

5. Να σχεδιάσετε την κατανομή σωματίων στην στατιστική MB συναρτήσει της μονοσωματιδιακής ενέργειας ε. Ποιά καμπύλη αντιστοιχεί σε μια υψηλότερη τιμή της T; Να επαναλάβετε το ίδιο σχήμα για την FD.

6. Πώς υπολογίζεται, τουλάχιστον δυνητικά, το χημικό δυναμικό στις περιπτώσεις των στατιστικών FD, BE και MB;

7. Στον αέρα $a = (V/N)^{1/3} \approx 30$ Å και $\lambda_{DB} \approx 0.2$Å ενώ για το αέριο ηλεκτρονίων $a \approx 3$ Å και $\lambda_{DB} \approx 30$ Å. Σε ποιά από τις δύο περιπτώσεις είναι απαραίτητη η κβαντική περιγραφή;

8. Πώς ορίζεται η "κβαντική συγκέντρωση" N/V_Q στο οιονεί-κλασσικό όριο; Πώς εκφράζεται στο ίδιο όριο το χημικό δυναμικό μ;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

9. Πώς ορίζεται το όριο κλασσικής στατιστικής (i) για σταθερές T και V_Q, (ii) για σταθερή πυκνότητα σωματίων N/V, (iii) για σταθερές N/ V και T;

10. Να αποδείξετε τις σχέσεις

$$\langle N\rangle = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V} \quad \text{και} \quad \langle(\Delta N)^2\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial\langle N\rangle}{\partial\mu} \ .$$

11. Είναι η Ω εκτατική μεταβλητή; Το χημικό δυναμικό μ;

12. Γιατί προτιμούμε τον ορισμό του χημικού δυναμικού από τον τύπο (5.27), μέσω της ελεύθερης ενέργειας F (σε σταθερή T), και όχι μέσω της ενέργειας E σε σταθερή S που χρησιμοποίησε ο Gibbs;

13. Τι έννοια έχει το αρνητικό χημικό δυναμικό (από τον τύπο $\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V}$, όπου $F = E - TS$);

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

1. Για τις κατανομές FD, BE και MB η εντροπία μπορεί να εκφρασθεί ως συνάρτηση του αντίστοιχου μέσου αριθμού κατάληψης $\langle n_r \rangle$

$$S = -k_B \sum_r [\langle n_r \rangle \ln \langle n_r \rangle + (1 - \langle n_r \rangle) \ln (1 - \langle n_r \rangle)] \quad \text{(FD)}$$

$$= -k_B \sum_r [\langle n_r \rangle \ln \langle n_r \rangle - (1 + \langle n_r \rangle) \ln (1 + \langle n_r \rangle)] \quad \text{(BE)}$$

$$= -k_B \sum_r \langle n_r \rangle \ln \frac{\langle n_r \rangle}{e} \quad . \quad \text{(MB)}$$

(i). Να αποδείξετε μέσω του ορισμού της εντροπίας από το άθροισμα

$$S = -k_B \sum_r \sum_{n_r=0}^{X} P_{n_r} \ln P_{n_r} \quad , \qquad X = 1 \text{ για φερμιόνια}$$

$$X = \infty \text{ για μποζόνια}$$

(ii). Επίσης το ίδιο αποτέλεσμα να δειχθεί μέσω της σχέσης $S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{\mu,T}$ και $\Omega = -k_B T \ln Z$. .

Λύση:

(ii). $\Omega = -k_B T \ln Z_{FD} = -k_B T \sum_r \ln [1 + e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}]$ στην FD.

$$S_{FD} = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{\mu,T} = k_B \sum_r \ln [1 + e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}] + k_B T \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_r \ln [1 + e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}]$$

$$= -k_B \sum_r \ln [1 + e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}]^{-1} - k_B \sum_r \frac{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} + 1}$$

$$= -k_B \sum_r \left[\ln (1 - \langle n_r \rangle) + \frac{\ln \frac{\langle n_r \rangle}{1 - \langle n_r \rangle}}{\frac{1}{\langle n_r \rangle}} \right]$$

$$= -k_B \sum_r [\langle n_r \rangle \ln \langle n_r \rangle + (1 - \langle n_r \rangle) \ln (1 - \langle n_r \rangle)] ,$$

αφού από την $\langle n_r \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} + 1}$ προκύπτει ότι $(1 - \langle n_r \rangle)^{-1} = 1 + e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Για την BE $\langle n_r \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} - 1} \Rightarrow 1 - e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)} = (1 + \langle n_r \rangle)^{-1}$

ενώ $\Omega = -k_B T \ln Z_{BE} = +k_B T \sum_r \ln [1 - e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}]$

και η απόδειξη προχωράει ανάλογα με την περίπτωση FD για την εύρεση της S_{BE}. Για την MB ισχύει

$$\langle n_r \rangle = e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)} << 1.$$

Επομένως αν από την FD λάβω το όριο $\langle n_r \rangle \to 0$ αντικαθιστώντας: $1 - \langle n_r \rangle = 1$ και $\ln(1 - \langle n_r \rangle) \approx - \langle n_r \rangle$

$$S_{MB} = -k_B \sum_r \langle n_r \rangle \ln \frac{\langle n_r \rangle}{e} \quad .$$

2. Να υπολογισθούν οι σχετικές διακυμάνσεις στον μέσο αριθμό σωματίων $\sqrt{\langle (\Delta n_r)^2 \rangle} / \langle n_r \rangle$ περίπτωσεις των στατιστικών FD, BE και MB.

(**Απάντηση:** Με χρήση της σχέσης $\langle (\Delta n_r)^2 \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle n_r \rangle}{\partial \varepsilon_r}$ προκύπτουν οι σχετικές διακυμάνσεις

$$\sqrt{\frac{1}{\langle n_r \rangle} - 1} \qquad \text{FD}$$

$$\sqrt{\frac{1}{\langle n_r \rangle} + 1} \qquad \text{BE}$$

$$\sqrt{\frac{1}{\langle n_r \rangle}} \; . \qquad \text{MB)}$$

3. Να υπολογισθούν οι σχετικές διακυμάνσεις στον αντίστοιχο μέσο αριθμό σωματίων N στις περιπτώσεις των στατιστικών FD, BE και MB. Τι παρατηρείται;

(**Απάντηση:** $\langle N \rangle = \sum_r n_r = N$

$$\langle N^2 \rangle = \sum_r \langle n_r^2 \rangle + \sum_r \sum_{r'} \langle n_r \rangle \langle n_{r'} \rangle \; ,$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\frac{\sqrt{<(\Delta N)^2>}}{<N>} = \frac{1}{N}\sqrt{\sum_r <(\Delta n_r)^2>} \quad .$$

Επομένως

$$\frac{\sqrt{<(\Delta N)^2>}}{<N>} = \frac{1}{\sqrt{N}} \to 0, \text{ για } N \to \infty \qquad \text{FD}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_r <n_r>(<n_r>+1) \qquad \text{BE}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \to 0, \; N \to \infty \qquad \text{MB)}$$

4. (i). Να ορίσετε τις βασικές υποθέσεις των στατιστικών MB και FD.

(ii). Να σχεδιάσετε (σαν συνάρτηση της ενέργειας ενός σωματίου ε) την ενεργειακή κατανομή συστήματος σωματίων ιδανικού αερίου, που υπακούουν στη στατιστική MB. Να επαναλάβετε στο ίδιο σχήμα την καμπύλη που αντιστοιχεί σε μια υψηλότερη θερμοκρασία T. Ποιές είναι οι αντίστοιχες καμπύλες στην περίπτωση της στατιστικής FD;

5. Να δείξετε ότι $\lambda = e^{\beta\mu} = \frac{N}{V} V_Q$ για ιδανικό αέριο στο όριο $\lambda << 1$ όπου μ είναι το χημικό δυναμικό και V_Q ο κβαντικός όγκος. Να υπολογίσετε επίσης τη διασπορά $<(\Delta N)^2>$ και την $\sqrt{<(\Delta N)^2>}/<N>$.

6. Να δείξετε ότι με μια κατάλληλα ορισμένη παράμετρο λ η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού μπορεί να πάρει τη μορφή

$$\mathcal{Z} = \sum_N \lambda^N Z(N) \; ,$$

όπου Z(N) είναι η κανονική συνάρτηση επιμερισμού των N σωματίων. Να υπολογίσετε την $\mathcal{Z}$ για ένα αέριο μη αλληλεπιδρώντων παρόμοιων σωματίων και στη συνέχεια να υπολογίσετε το μέσο αριθμό κατάληψης $<n_r>$ μιας μονοσωματιακής κατάστασης $|r>$ με ενέργεια ε_r. Θεωρώντας την $\ln \mathcal{Z}$ ή με άλλο τρόπο να δείξετε ότι στην οιονεί κλασσική προσέγγιση για το σύστημα ισχύει η σχέση

$$Z(N) = \frac{z^N}{N!} \; .$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

7. Θεωρείστε ένα σύστημα δύο ατόμων με το καθένα να έχει 3 καταστάσεις με ενέργειες 0, ε και 2ε σε επαφή με λουτρό θερμοκρασίας Τ. Να γράψετε την κανονική συνάρτηση επιμερισμού Z όταν

(i). Ισχύει η κλασσική στατιστική και τα σωμάτια είναι διακρίσιμα,

(ii). Ισχύει η κλασσική στατιστική και τα σωμάτια είναι μη διακρίσιμα,

(iii). Ισχύει η στατιστική FD,

(iv). Ισχύει η στατιστική BE.

(Απάντηση: (i) $Z = z^2$, $z = 1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon}$

(ii) $Z = \frac{z^2}{2}$

(iii) $Z = z\, e^{-\beta\varepsilon}$,

(iv) $Z = z\,(1 + e^{-2\beta\varepsilon})$).

8. Θεωρείστε ένα σύστημα δύο σωματίων που μπορεί να καταλάβουν μια από 4 μονοσωματιακές καταστάσεις, οι δύο με ενέργεια 0, και οι άλλες δύο με ενέργεια ε και 2ε, αντίστοιχα, ενώ το σύστημα είναι σε θερμική ισορροπία σε θερμοκρασία Τ. Να καταγράψετε τις καταστάσεις και να υπολογίσετε τη συνάρτηση επιμερισμού Z και την ενέργεια E όταν

(i). Ισχύει η κλασσική στατιστική και τα σωμάτια είναι διακρίσιμα,

(ii). Ισχύει η κλασσική στατιστική και τα σωμάτια είναι μη διακρίσιμα,

(iii). Ισχύει η στατιστική FD,

(iv). Ισχύει η στατιστική BE.

(Απάντηση. (i) $Z = 4 + 4e^{-\beta\varepsilon} + 5e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon} = z^2$,

$z = 2 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon}$

$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{2\varepsilon}{Z}\, e^{-\beta\varepsilon}\,(2 + 5e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon})$

(ii) $Z = \frac{z^2}{2!}$

(iii) $Z = 1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon}\ (1 + 2e^{\beta\varepsilon})$

(iv) $Z = 3 + 2e^{-\beta\varepsilon} + 3e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}$).

9. Ν διακρίσιμα σωμάτια που δεν αλληλεπιδρούν υπακούουν στη στατιστική MB και το καθένα μπορεί να βρεθεί σε 3 στάθμες με ενέργειες $-\varepsilon$, 0 και ε, ενώ το σύστημα είναι σε θερμική ισορροπία με λουτρό θερμοκρασίας Τ. Να υπολογισθούν:

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(i). Η εντροπία του συστήματος για T=OK, **(ii).** Η μέγιστη δυνατή εντροπία, **(iii).** Η ελάχιστη δυνατή ενέργεια, **(iv)** η Z, **(v)** η πιο πιθανή ενέργεια όταν N>>1, και **(vi)** η τιμή του $\int_0^\infty \frac{C(T)}{T}\, dT$.

(Απάντηση:
(i) $S(0) = 0$, (ii) $S_{max} = Nk_B \ln 3$, (iii) $-N\varepsilon$, (iv) $Z = z^N$, $z = e^{\beta\varepsilon} + 1 + e^{-\beta\varepsilon}$,
(v) $2N\varepsilon\, e^{\beta\varepsilon} / (1 + 2\cosh(\beta\varepsilon)$, (vi) $Nk_B \ln 3$).

10. Να δείξετε ότι η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού είναι

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} Z(N)\, \lambda^N \quad ,$$

με Z την κανονική επιμερισμού και $\lambda = e^{\beta\mu}$. Επίσης, να δειχθεί ο τύπος

$$\langle N \rangle = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln \mathcal{Z}.$$

Γιατί είναι χρήσιμη η σχέση στην οποία καταλήξαμε;

11. Ένα σύστημα μπορεί να μην παρουσιάζει κατάληψη με ενέργεια μηδέν ή να παρουσιάζει κατάληψη από ένα σωμάτιο σε μία από δύο καταστάσεις με ενέργεια μηδέν και ε αντίστοιχα. Να δείξετε ότι η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού για το σύστημα είναι

$$\mathcal{Z} = 1 + \lambda + \lambda\, e^{-\beta\varepsilon} \quad \text{με} \quad \lambda = e^{\beta\mu} \quad .$$

(Παρατηρείστε ότι συμπεριλαμβάνεται και η N=0 σαν ειδική περίπτωση του μεταβλητού αριθμού σωματίων N). Να δείξετε ότι η μέση θερμική κατάληψη για το σύστημα είναι

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(\lambda + \lambda\, e^{-\beta\varepsilon} \right) \quad ,$$

ενώ της κατάστασης με ενέργεια ε είναι

$$\langle n(\varepsilon) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \lambda\, e^{-\beta\varepsilon} \quad .$$

Αν οι μονοσωματιακές καταστάσεις ενέργειας 0 και ε μπορούν να καταληφθούν ταυτόχρονα από ένα σωμάτιο η καθεμία να δείξετε ότι

$$\mathcal{Z} = 1 + \lambda + \lambda\, e^{-\beta\varepsilon} + \lambda^2\, e^{-\beta\varepsilon} \quad .$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

ΤΟ ΑΕΡΙΟ FERMI

6.1 Ένα παράδειγμα αερίου Fermi
6.2 Το αέριο Fermi σε θερμοκρασία $T = 0$
6.3 Το εκφυλισμένο αέριο Fermi ($k_B T << \varepsilon_F$, $\beta\mu \to +\infty$)
6.4 Η θερμοχωρητικότητα του ηλεκτρονικού αερίου
6.5 Αναπτύγματα Sommerfeld (μικρής-T)
6.6 Οι ιδιότητες του ηλεκτρονικού αερίου
ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΤΟ ΑΕΡΙΟ FERMI

6.1. Ένα παράδειγμα αερίου Fermi

Το βασικό παράδειγμα αερίου Fermi είναι το αέριο των ελεύθερων ηλεκτρονίων στα στερεά. Στα στερεά τα ηλεκτρόνια των εξωτερικών κυρίως φλοιών των ατόμων ονομάζονται ηλεκτρόνια αγωγιμότητας. Αυτά αποχωρίζονται τα άτομα και αποτελούν ένα αέριο Fermi. Η συμπεριφορά αυτών των ηλεκτρονίων είναι υπεύθυνη για τις περισσότερες ιδιότητες των κρυστάλλων, όπως την θερμοχωρητικότητα και την ηλεκτρική ή θερμική αγωγιμότητα. Επιπλέον, στα μέταλλα (αγωγοί), στα διηλεκτρικά (μονωτές) και στους ημιαγωγούς τα ηλεκτρόνια έχουν διαφορετική συμπεριφορά και είναι υπεύθυνα για την μεγάλη αγωγιμότητα των μετάλλων και την μικρή αγωγιμότητα των διηλεκτρικών. Θα μελετήσουμε, στην συνέχεια, το ηλεκτρονικό αέριο ως ένα αέριο Fermi, αγνοώντας τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων. Η μελέτη αυτή αποτελεί μια εφαρμογή της κβαντικής στατιστικής Fermi-Dirac και θα μας επιλύσει προβλήματα όπως αυτό της θερμοχωρικότητας σε χαμηλές θερμοκρασίες, που αδυνατεί να εξηγήσει το παλαιότερο μοντέλο του Drude που βασίζεται στην κλασσική κινητική θεωρία των αερίων. Πρέπει, επίσης, να αναφερθεί πως σημαντικός είναι ο ρόλος των βαριών ιόντων, που αποτελούνται από τον πυρήνα των ατόμων με όλη την μάζα και τα δέσμια ηλεκτρόνια, κυρίως στην μείωση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ηλεκτρονίων. Τα ιόντα ταλαντώνονται γύρω από τις θέσεις του κρυσταλλικού πλέγματος με μικρού πλάτους ταλαντώσεις σε σχέση με την απόσταση μεταξύ τους. Η συνεισφορά των ταλαντώσεων στην θερμοχωρητικότητα μελετήθηκε, π.χ. με την θεωρία Debye(ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι). Τα ηλεκτρόνια διαδραματίζουν, όμως, τον βασικό ρόλο στις ιδιότητες των στερεών, με ενέργειες της τάξης του eV, ενώ το ενεργειακό εύρος των ταλαντωτικών διεγέρσεων του πλέγματος (φωνονίων) είναι πολύ μικρότερο (0.01eV), λόγω της βαρύτερης μάζας των ιόντων.

Συνοψίζοντας, το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων βασίζεται σε ασθενώς δεσμευμένα ηλεκτρόνια που περιπλανώνται ελεύθερα στο μέταλλο.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Αν εφαρμοσθεί διαφορά δυναμικού πεδίου τα ηλεκτρόνια δημιουργούν το ηλεκτρικό ρεύμα. Επισημαίνουμε ότι κινούνται σχεδόν ελεύθερα, αποφεύγοντας τις συγκρούσεις με τα άλλα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας και τους βαριούς πυρήνες με μέσο μήκος ελεύθερης διαδρομής l ≈1 cm! Η κλασσική στατιστική Boltzmann έχει, περιέργως, επιτυχία στην ερμηνεία του νόμου του Ohm για την διέλευση του ρεύματος και την αγωγιμότητα ηλεκτρική και θερμική. Όμως, αποτυγχάνει στην ερμηνεία της θερμοχωρητικότητας όπως και για την παραμαγνητική επιδεκτικότητα, όπου είναι απαραίτητη η κβαντική στατιστική Fermi. Θα πρέπει, επίσης, να μην λησμονούμε ότι τα ηλεκτρόνια από κβαντική άποψη είναι και κύματα (όπως οι ακτίνες X) και δεν πρέπει, επομένως, να μας εκπλήσσει η διαπερατότητα της συμπυκνωμένης ύλης από τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας. Επισημαίνεται ότι για T = 0 τα βαριά ιόντα επιτρέπουν στα ηλεκτρόνια να διαδίδονται ελεύθερα ως κύματα ενώ και οι συγκρούσεις μεταξύ ηλεκτρονίων απαγορεύονται, λόγω της αρχής του Pauli που δεν αφήνει περιθώρια επιτρεπτών καταστάσεων μετά την σκέδαση. Το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων στα πλαίσια της κβαντικής στατιστικής εξηγεί αρκετές από τις ιδιότητες, π.χ. των μετάλλων. Αδυνατεί, όμως, να ερμηνεύσει την στοιχειώδη διάκριση των στερεών σε μέταλλα, μονωτές και ημιαγωγούς. Στην περίπτωση αυτή πρέπει να ληφθεί υπ' όψιν και το κρυσταλλικό πλέγμα με την περιοδικότητα που παρουσιάζει, να γίνει χρήση του θεωρήματος Bloch, κ.λ.π.

6.2. Το αέριο Fermi σε θερμοκρασία T = 0

Στις χαμηλές T δεν ισχύει, προφανώς, ο κλασικός νόμος ισοκατανομής των ενεργειών που προβλέπει μηδενική τιμή (ανάλογη της T)για T = 0K για την ενέργεια των φερμιονίων. Ο μέσος αριθμός κατάληψης των μονοσωματιακών καταστάσεων (τροχιακών) ενέργειας ε στην περίπτωση των φερμιονίων (εξ. 5.16) δίνεται από την συνάρτηση Fermi $f(\varepsilon) = \langle n(\varepsilon) \rangle$ με

$$\langle n(\varepsilon) \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \quad . \tag{6.1}$$

Επειδή στην εξ. (6.1) ο παρανομαστής δεν μπορεί να απειρίζεται και αφού η ενέργεια $\varepsilon = p^2/2m$ μεταβάλλεται από 0 μέχρι το ∞, το χημικό δυναμικό μ για

$T = 0$ είναι, απαραιτήτως, θετικό ($\mu(0) \geq 0$). Για $T = 0$ ($\beta = \infty$) όταν $\varepsilon - \mu(0) > 0$ ο εκθέτης στον παρονομαστή απειρίζεται και ο μέσος αριθμός κατάληψης $\langle n(\varepsilon) \rangle$ μηδενίζεται. Αντίθετα, για $\varepsilon - \mu(0) \leq 0$ ο εκθέτης στον παρονομαστή πάει στο $-\infty$ και ο μέσος αριθμός κατάληψης $\langle n(\varepsilon) \rangle$ γίνεται μονάδα. Επομένως, πρέπει πάντα να ισχύει $\varepsilon - \mu(0) \leq 0$ ώστε να μην μηδενίζεται ο $\langle n(\varepsilon) \rangle$.

Η εξίσωση για τον μέσο αριθμό σωματίων N προσδιορίζεται μέσω του απειροστικού αριθμού σωματίων dN στο στοιχειώδες ενεργειακό διάστημα $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$

$$dN = \langle n(\varepsilon) \rangle \, \rho(\varepsilon) \, d\varepsilon \, , \tag{6.2}$$

που ισούται με το αριθμό των καταστάσεων $\rho(\varepsilon)\, d\varepsilon$ στο ως άνω διάστημα επί τον μέσο αριθμό σωματίων $\langle n(\varepsilon) \rangle$ σε κάθε κατάσταση. Επομένως,

$$N = \int_0^\infty dN = \int_0^\infty d\varepsilon \, \rho(\varepsilon) \, \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \, , \tag{6.3}$$

όπου $\rho(\varepsilon)$ είναι η πυκνότητα καταστάσεων του ενός σωματίου (Κεφ. 2). Επισημαίνεται και εδώ το γεγονός ότι για τον υπολογισμό της $\rho(\varepsilon)$ στην προσέγγιση του οιονεί-συνεχούς ενεργειακού φάσματος απαιτείται η συνθήκη $T >> \Theta_\mu$, που σίγουρα δεν ισχύει για ενέργειες κοντά στην χαμηλότερη στάθμη ενός σωματίου ($3\, k_B\, \Theta_\mu$). Στηριζόμενοι όμως στο γεγονός ότι ο εποικισμός των χαμηλών σταθμών είναι αναγκαστικά αραιός, λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli που επιτρέπει ένα ή κανένα φερμιόνιο σε κάθε μονοσωματιακή κατάσταση, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον τύπο για την πυκνότητα $\rho(\varepsilon)$ ακόμη και για χαμηλές T (που δεν ικανοποιούν την συνθήκη $T >> \Theta_\mu$). Για τον τρισδιάστατο χώρο έχουμε

$$\rho(\varepsilon) = (2s + 1) \cdot \frac{2V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \, . \tag{6.4}$$

συμπεριλαμβάνοντας και τον εκφυλισμό $2s + 1$ λόγω της ύπαρξης του σπιν s. Επομένως, με αντικατάσταση στην (6.3) προκύπτει η εξίσωση σταθερού αριθμού N

$$N = (2s + 1) \cdot \frac{2V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} \, d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \, , \tag{6.5}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

που επιτρέπει τον υπολογισμό του χημικού δυναμικού μ(Τ).

Το ολοκλήρωμα της εξ. (6.5) ονομάζεται ολοκλήρωμα Fermi και επιλύεται με αριθμητικές μεθόδους. Στο όριο $T \to 0$ μπορεί να επιλυθεί ακριβώς. Η τιμή του χημικού δυναμικού για $T = 0$ είναι $\mu(0)$ και για $\varepsilon > \mu(0)$ ισχύει $e^{\beta(\varepsilon - \mu(0))} = \infty$ με αποτέλεσμα αυτές οι καταστάσεις να μην συνεισφέρουν καθόλου στο ολοκλήρωμα. Αντίθετα, για τις καταστάσεις με $\varepsilon < \mu(0)$ ισχύει $e^{\beta(\varepsilon-\mu(0))} = e^{-\infty} = 0$ και ο μέσος αριθμός κατάληψης (εξ. 6.1) είναι μονάδα. Άρα, παρατηρούμε ότι το ολοκλήρωμα Fermi για τον υπολογισμό του N μεταπίπτει στο

$$N = (2s + 1) \cdot \frac{2V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\mu(0)} \varepsilon^{1/2} \, d\varepsilon \qquad (6.6)$$

με το άνω όριο $\mu(0)$ αντί για ∞. Απο την σχέση (6.6) με επίλυση του ορισμένου ολοκληρώματος προκύπτει η σχέση

$$\boxed{\mu(0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{2s+1} \frac{N}{V} \right)^{2/3}} \, , \qquad (6.7)$$

για το χημικό δυναμικό μ σε θερμοκρασία $T = 0$.

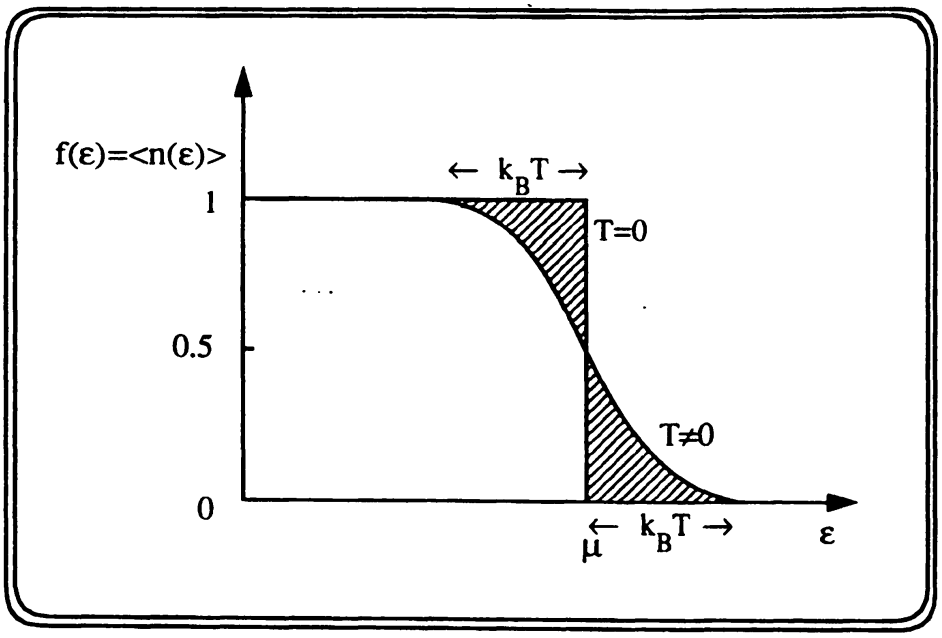
6.2.1. Ενέργεια Fermi

Η ποσότητα $\mu(0)$ λέγεται ενέργεια Fermi ($\varepsilon_F = \mu(0)$) ενώ το εξαρτώμενο από την θερμοκρασία Τ χημικό δυναμικό μ(Τ) στην φυσική στερεάς κατάστασης είναι γνωστό και ως στάθμη Fermi. Ορίζονται, επίσης, η αντίστοιχη χαρακτηριστική θερμοκρασία Fermi $T_F = \frac{\mu(0)}{k_B} = \frac{\varepsilon_F}{k_B}$, η ορμή Fermi $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F} = \hbar k_F$, όπου $k_F = \frac{p_F}{\hbar}$ είναι το κυματάνυσμα Fermi, και η ταχύτητα Fermi $\upsilon_F = \frac{p_F}{m}$. Η ενέργεια Fermi ε_F για ηλεκτρόνια σπιν 1/2 είναι $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}$, ενώ συναρτήσει του κυματανύσματος k_F είναι $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$.

Στο όριο $T = 0K$ όλες οι μονοσωματιακές καταστάσεις κάτω από τη ενέργεια Fermi ε_F είναι κατειλημμένες με (ακριβώς) ένα φερμιόνιο η κάθε μία

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

ενώ όλες οι μονοσωματιακές καταστάσεις υψηλότερης ενέργειας είναι μη κατειλημμένες. Άρα, η ενέργεια Fermi ε_F δηλώνει την τελευταία κατειλημμένη

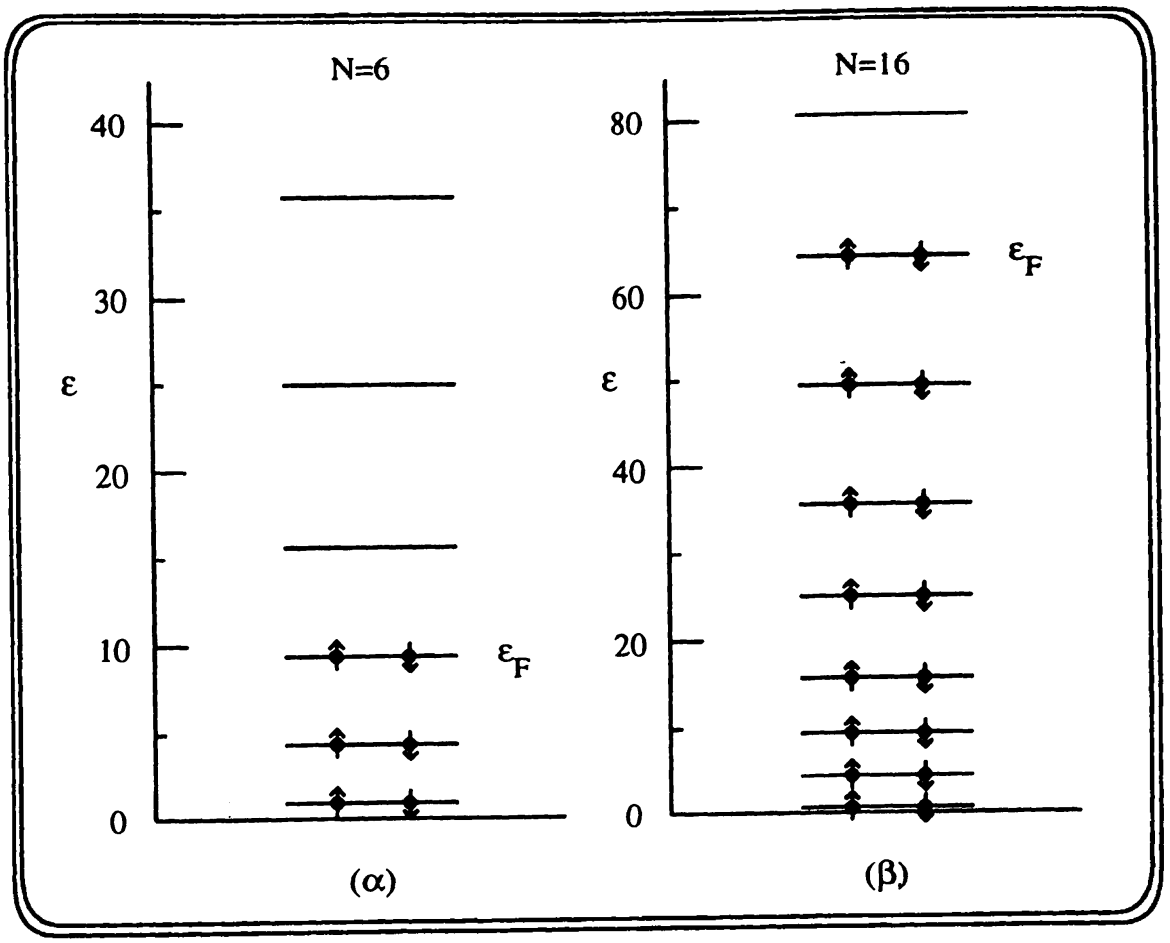


Σχ. 6.1. Η κατανομή Fermi-Dirac (συνάρτηση Fermi της εξ.6.1) συναρτήσει της μονοσωματιακής ενέργειας ε, σε θερμοκρασία T ($\beta=1/k_BT$) και χημικό δυναμικό $\mu = \mu(T)$. Η $f(\varepsilon) = \langle n(\varepsilon) \rangle$ δίνει το ποσοστό των μονοσωματιακών καταστάσεων (τροχιακών) δεδομένης ενέργειας ε που είναι κατειλημμένες όταν το σύστημα είναι σε θερμική ισορροπία. Στη θερμοκρασία του απόλυτου μηδενός (T = 0) τα φερμιόνια έχουν μέσο αριθμό κατάληψης μονάδα για $\varepsilon < \varepsilon_F = \mu(0)$ και μηδέν για $\varepsilon > \varepsilon_F = \mu(0)$. Όταν το σύστημα θερμανθεί σε θερμοκρασία T φερμιόνια μεταφέρονται από την γραμμοσκιασμένη επιφάνεια για $\varepsilon < \mu(T)$ στην γραμμοσκιασμένη επιφάνεια με $\varepsilon > \mu(T)$. Παρατηρείστε, επίσης ότι $\langle n(\varepsilon = \mu) \rangle = \frac{1}{1+1} =$ 0.5.

μονοσωματιακή στάθμη. Η θεμελιώδης (για T = 0) κατάσταση του συστήματος των N ηλεκτρονίων προκύπτει με τον εποικισμό των επιτρεπτών μονοσωματιακών καταστάσεων. Η τοποθέτηση γίνεται λαμβάνοντας υπόψη την "φερμιονική ολιγαρχία" (δύο ηλεκτρόνια δεν μπορούν να έχουν τους ίδιους χβαντικούς αριθμούς) π.χ. για φερμιόνια με σπιν s = 1/2, όπως είναι τα ηλεκτρόνια, κάθε μονοσωματιακή κατάσταση ϕ_{n,m_s} χαρακτηρίζεται από τους χβαντικούς αριθμούς n (n_x, n_y, n_z) και του σπιν $m_s = \pm 1/2$ (+1/2 ή −1/2

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ανάλογα με την κατεύθυνση του σπιν). Ένα μονοδιάστατο σύστημα N = 6 και 16 ηλεκτρονίων φαίνεται στο Σχ. 6.2.



Σχ. 6.2. (α). N = 6 φερμιόνια σπιν 1/2 σε θερμοκρασία T = 0K εποικίζουν τις διπλά εκφυλισμένες (λόγω σπιν) μονοσωματιακές καταστάσεις $\varepsilon_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} n^2$, n=1,2,3, ..., σε μονάδες του $\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, στην μονοδιάστατη κίνηση σε μια γραμμή μήκους L(εξ. 2.55). Φαίνεται, επίσης, η ανώτατη κατειλημμένη στάθμη (η ενέργεια Fermi ε_F) $\varepsilon_F = \varepsilon_3$. **(β).** Όπως στην περίπτωση (α) αλλά για N = 16 φερμιόνια σπιν 1/2 σε θερμοκρασία T = 0K. Η ανώτατη κατειλημμένη στάθμη (ενέργεια Fermi ε_F) είναι $\varepsilon_F = \varepsilon_8$.

Η ενέργεια Fermi είναι η ενέργειά της τελευταίας κατειλημμένης στάθμης ($\varepsilon_F = 9\frac{\pi^2\hbar^2}{2mV^{2/3}}$). Ο εποικισμός των φερμιονίων στις επιτρεπτές μονοσωματιακές

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

καταστάσεις του συστήματος περιορίζεται από τις συνθήκες : **(i).** Η ολική ενέργεια $E = \sum_r n_r \varepsilon_r$ να είναι ελάχιστη και **(ii).** Να ικανοποιείται η απαγορευτική αρχή του Pauli.

Άσκηση1: Αν αυτή τη φορά, για ευκολία, δεχθούμε περιοδικές οριακές συνθήκες (μέχρι τώρα στο Κεφ. 2. δεχθήκαμε οριακές συνθήκες σκληρού τοίχου, βέβαια, οριακά τα αποτελέσματα πρέπει να συγκλίνουν ανεξαρτήτως επιλογής οριακών συνθηκών) σε κυβικό κουτί όγκου $V = L^3$ να καταγραφούν οι μονοσωματιακές καταστάσεις και να δειχθεί πως γίνεται ο εποικισμός τους στην περίπτωση των φερμιονίων σπιν 1/2 για $T = 0K$.

Λύση:

Οι μονοσωματιακές καταστάσεις με ιδιοτιμές (ενέργειες) είναι

$$\varepsilon_r = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} \qquad (6.8)$$

με $k_x = (2\pi/L)\, n_x$, $k_y = (2\pi/L)\, n_y$, $k_z = (2\pi/L)\, n_z$ και

$$p_x = \frac{h}{L} n_x, \quad p_y = \frac{h}{L} n_y, \quad p_z = \frac{h}{L} n_z, \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots . \qquad (6.9)$$

Παρατηρούμε ότι οι κβαντικοί αριθμοί παίρνουν τώρα, λόγω της επιλογής των περιοδικών οριακών συνθηκών, όλες τις ακέραιες (θετικές, αρνητικές και μηδέν) τιμές. Στό χώρο των ορμών (p_x, p_y, p_z) οι αντίστοιχες καταστάσεις (εξ. 6.8) είναι σε διαστήματα $\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = h/L$ που φαίνονται στο Σχ. 6.3.

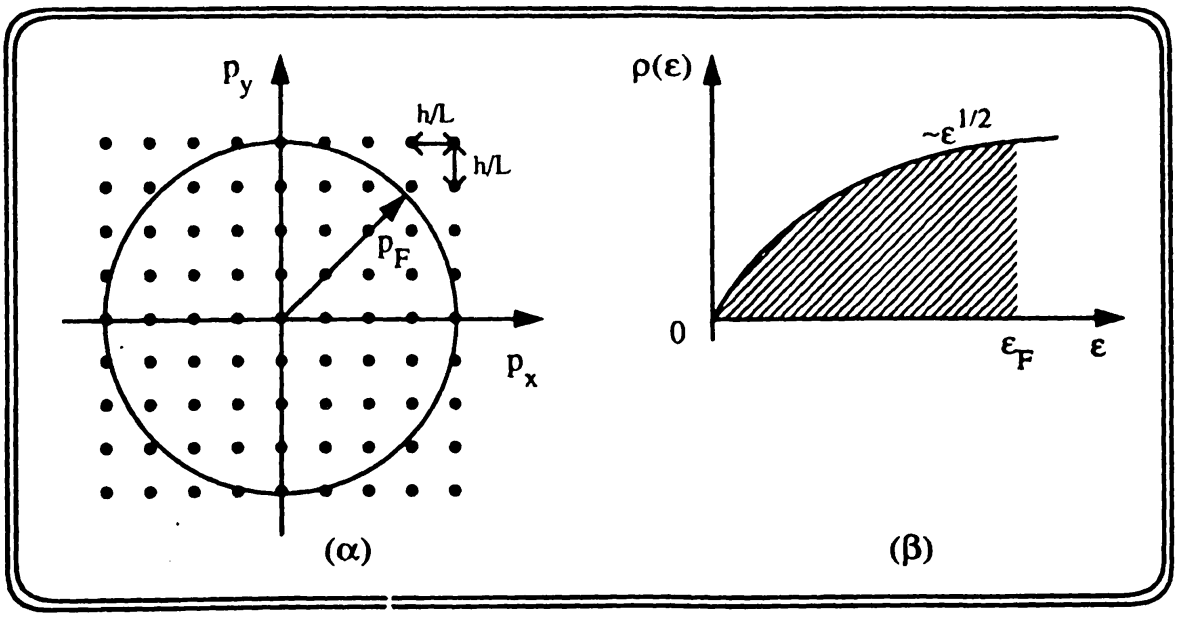
Ο αριθμός των καταστάσεων (αν αγνοήσουμε το σπιν) σε μια μικρή περιοχή του χώρου των ορμών $dp_x dp_y\, dp_z$ είναι

$$\frac{1}{h^3}\, V\, dp_x dp_y\, dp_z \qquad (6.10)$$

και ο αριθμός των καταστάσεων με ενέργεια μικρότερη της ε είναι,ήδη, ο γνωστός

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{h^3}\, V \int_0^{\sqrt{2m\varepsilon}} p^2\, dp = \frac{1}{h^3}\, V \frac{4}{3}\pi\, (2\, m\, \varepsilon)^{3/2} \quad , \qquad (6.11)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 6.3. (α). Οι ιδιοσυναρτήσεις (καταστάσεις) ελεύθερου σωματίου παρουσιάζονται σε σημεία στον διδιάστατο χώρο των ορμών p_x, p_y. Ο κύκλος ακτίνας p_F είναι ο κύκλος Fermi που περιλαμβάνει τις κατειλημμένες καταστάσεις για T = 0K. Στον αντίστοιχο χώρο-$\vec{k}$ οι ορμές p_x και p_y πρέπει απλώς να διαιρεθούν με h=2πh. Στις τρείς διαστάσεις υπάρχει η σφαίρα Fermi, αντίστοιχα.

(β). Η πυκνότητα καταστάσεων του ελεύθερου σωματίου στο τρισδιάστατο χώρο με το γραμμοσκιασμένο μέρος να δείχνει τις κατειλημμένες καταστάσεις για T = 0K (μέχρι την ενέργεια Fermi ε_F).

ενώ η πυκνότητα καταστάσεων ρ(ε) προκύπτει με παραγώγιση της $N(\varepsilon)$ και συμπίπτει ακριβώς με το αποτέλεσμα της εξ. (2.28) (είναι ανάλογη της $\varepsilon^{1/2}$). Αν συμπεριλάβουμε και το σπιν στην περίπτωση των ηλεκτρονίων σε κάθε επιτρεπτή μονοσωματιακή κατάσταση αντιστοιχούν δύο ηλεκτρονικές (εκφυλισμένες) στάθμες, μία για κάθε κατεύθυνση (άνω ή κάτω) του σπιν και μπορούν πλέον να τοποθετηθούν 2 φερμιόνια σε κάθε σημείο του χώρου των ορμών (ή του χώρου-$\vec{k}$).

Για μακροσκοπικά μεγάλο κουτί μεγάλου όγκου V η κατειλημμένη περιοχή από την εξ. (6.11) μοιάζει με σφαίρα ακτίνας p_F (ή ακτίνας k_F στον χώρο-$\vec{k}$ που είναι γνωστή και ως ακτίνα Fermi). Οι μονοσωματιακές

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

καταστάσεις αντιστοιχούν σε τιμές του $\vec{p}$ ή $\vec{k}$ μέσα στην σφαίρα Fermi και είναι για τα ηλεκτρόνια με εκφυλισμό $2s + 1 = 2$ $(s = 1/2)$:

$$2 \cdot \frac{V \cdot \frac{4\pi p_F^3}{3}}{h^3} = 2 \cdot \frac{V \cdot \frac{4\pi k_F^3}{3}}{(2\pi)^3} = 2 \frac{V}{6\pi^2} k_F^3 \ . \qquad (6.12)$$

Στο ίδιο αποτέλεσμα καταλήγουμε με ολοκλήρωση και από τον τύπο $\frac{d^3\vec{r} \cdot d^3\vec{p}}{h^3} = \frac{d^3\vec{r} \cdot d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}$ που δίνει τις καταστάσεις στον στοιχειώδη χώρο $d^3\vec{r} \cdot d^3\vec{p}$ (ή $d^3\vec{r} \cdot d^3\vec{k}$, αντίστοιχα) πολλαπλασιάζοντας και με τον εκφυλισμό (2) λόγω του σπιν του ηλεκτρονίου. Σε κάθε τιμή του $\vec{k}$ τοποθετούνται δύο μονοσωματιακές καταστάσεις του ηλεκτρονίου, μία για κάθε προβολή του σπιν, στις οποίες θα βάλουμε τα N ηλεκτρόνια. Άρα, ο ολικός αριθμός σωματίων είναι για $T = 0$

$$N = 2 \frac{V}{6\pi^2} k_F^3 \quad \text{και} \quad \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \qquad (6.13)$$

είναι η πυκνότητα (ανά μονάδα όγκου) των σωματίων. Εφ' όσον η πυκνότητα των φερμιονίων $\frac{N}{V}$ είναι γνωστή υπολογίζονται (από την εξ: 6.7.) η ακτίνα, η ορμή, η ενέργεια, η ταχύτητα και η θερμοκρασία Fermi. Επισημαίνεται το γεγονός ότι η ορμή Fermi για ηλεκτρόνια $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F} = \hbar \left(3\frac{N}{V}\pi^2\right)^{1/3}$ δεν εξαρτάται από την μάζα m (όπως εξαρτάται, ασφαλώς, η ενέργεια Fermi ε_F) αλλά από την πυκνότητα $\frac{N}{V}$ των ηλεκτρονίων.

6.3.2. Ενέργεια του αερίου φερμιονίων για T = OK

Η ολική ενέργεια του φερμιονικού αερίου για $T = 0K$ δίνεται από το άθροισμα (ολοκλήρωμα εφ' όσον το φάσμα είναι οιονεί-συνεχές) στις μονοσωματιακές καταστάσεις

$$E = \int_0^\infty \varepsilon \, dN = \int_0^\infty \varepsilon \langle n(\varepsilon) \rangle \, \rho(\varepsilon) \, d\varepsilon = \int_0^\infty \varepsilon \, \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \, \rho(\varepsilon) \, d\varepsilon$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \; \varepsilon \; \rho(\varepsilon) \,, \qquad (6.14)$$

και αφού ο στοιχειώδης αριθμός σωματίων στο διάστημα [ε, ε + dε] είναι dN = <n(ε)> ρ(ε) dε με <n(ε)> = 1 για ε<ε_F και 0 για ε> ε_F τα όρια είναι από 0 μέχρι ε_F. Από την εξ. (6.14) αν αντικαταστήσουμε την ρ(ε) για φερμιόνια σπιν 1/2 ενσωματώνοντας τις σταθερές στον $A = 2 \cdot \frac{2V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$

$$E = A \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{3/2} \, d\varepsilon$$

$$= A \frac{2}{5} \; \varepsilon_F^{5/2} \quad . \qquad (6.15)$$

Ο ολικός αριθμός καταστάσεων είναι

$$N = \int_0^{\infty} <n(\varepsilon)> \; \rho(\varepsilon) \, d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} \rho(\varepsilon) \, d\varepsilon = A \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{1/2} \, d\varepsilon = A \frac{2}{3} \; \varepsilon_F^{3/2} \quad . \qquad (6.16)$$

Διαιρώντας τις (6.15) και (6.16) κατά μέλη προκύπτει η σχέση για την ολική ενέργεια των N φερμιονίων για T = 0K

$$\boxed{E = \frac{3}{5} N \; \varepsilon_F} \quad . \qquad (6.17)$$

Άσκηση 2: Οι πυκνότητες καταστάσεων για φερμιόνια με σπιν s είναι για διάσταση d = 1, 2:

$$\rho(\varepsilon) = (2s + 1) \frac{L}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{1/2} \varepsilon^{-1/2} \quad , \quad d=1, \qquad (6.18)$$

$$\rho(\varepsilon) = (2s + 1) \; L^2 \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) , \qquad d=2, \qquad (6.19)$$

με γραμμικό μήκος L και επιφάνεια L^2, αντίστοιχα, ενώ έχει ληφθεί υπ' όψιν και ο παράγοντας εκφυλισμού (2 s + 1). Να δείξετε ότι ο ολικός αριθμός καταστάσεων N και η ακτίνα Fermi p_F είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$N = (2s+1)\frac{L}{h}(2p_F) \Leftrightarrow p_F = \frac{h}{2}\frac{1}{(2s+1)}\frac{N}{L}, \quad \text{για } d=1, \qquad (6.20)$$

$$N = (2s+1)\frac{L^2}{h^2}(\pi p_F^2) \Leftrightarrow p_F = \left(\frac{h^2}{\pi}\frac{1}{(2s+1)}\frac{N}{L^2}\right)^{1/2}, \text{για } d=2, \qquad (6.21)$$

Να υπολογισθούν, επίσης, τα κυματανύσματα Fermi και να ευρεθούν οι αντίστοιχες ενέργειες Fermi για d =1, 2, 3. Να υπολογισθεί και η πυκνότητα καταστάσεων στην ενέργεια Fermi $\varrho(\varepsilon_F)$, αφού ληφθεί υπόψιν ότι η ε_F είναι αντιστρόφως ανάλογη της μάζας m.

Λύση:

Μπορεί να δειχθεί, με υπολογισμό της ακτίνας Fermi $k_F = p_F/\hbar$, πως

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\pi\frac{N}{L}\frac{1}{(2s+1)}\right)^2, \qquad d=1,$$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\pi\frac{N}{L^2}\frac{4}{(2s+1)}\right), \qquad d=2,$$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\pi\frac{N}{L^3}\frac{6}{(2s+1)}\right)^{2/3}, \qquad d=3. \qquad (6.22)$$

Η πυκνότητα καταστάσεων στην ενέργεια Fermi $\varrho(\varepsilon_F)$ είναι

$$\varrho(\varepsilon_F) = \frac{1}{2}\frac{N}{\varepsilon_F} \qquad \text{για } d=1,$$

$$\varrho(\varepsilon_F) = \frac{N}{\varepsilon_F} \qquad \text{για } d=2,$$

$$\varrho(\varepsilon_F) = \frac{3}{2}\frac{N}{\varepsilon_F} \qquad \text{για } d=3. \qquad (6.23)$$

Επίσης, η ενέργεια του φερμιονικού αερίου για T = 0K υπολογίζεται εύκολα από τα παραπάνω

$$\boxed{E = \frac{1}{3}N\,\varepsilon_F}, \quad d=1$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\boxed{E = \frac{1}{2} N \varepsilon_F} \quad , d=2$$

$$\boxed{E = \frac{3}{5} N \varepsilon_F} \quad , d=3 \ . \qquad (6.24)$$

Άρα η μέση ενέργεια ανά φερμιόνιο για T = 0K είναι $<\varepsilon> = \frac{E}{N} = \frac{1}{3}\varepsilon_F, \frac{1}{2}\varepsilon_F$ και $\frac{3}{5}\varepsilon_F$ για d = 1, 2, 3, αντίστοιχα, δηλ. της ίδιας τάξης μεγέθους με την ενέργεια Fermi ε_F (ενώ από το θεώρημα ισοκατανομής προβλέπεται η τιμή μηδέν).

6.3. Το εκφυλισμένο αέριο Fermi ($k_B T << \varepsilon_F$, $\beta\mu \to +\infty$)

Η ενέργεια Fermi είναι μία βασική έννοια που γνωρίσαμε για T = 0K. Παραμένει, όμως, χρήσιμη από φυσική άποψη αυτή η ποσότητα και για μεγαλύτερες θερμοκρασίες T ($T \neq 0$); Πριν απαντήσουμε σε αυτό το ερώτημα ας προσπαθήσουμε μια ποσοτική εκτίμηση του μεγέθους της ενέργειας Fermi ε_F καθώς και της (θεωρητικής) θερμοκρασίας Fermi T_F στην οποία αντιστοιχεί μέσω της σχέσης $k_B T_F$. Για ελεύθερα ηλεκτρόνια επειδή η μάζα τους m είναι πολύ μικρή η ενέργεια Fermi $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ είναι μεγάλη και αντιστοιχεί σε θερμοκρασία Fermi T_F της τάξης των δεκάδων χιλιάδων βαθμών Kelvin. Π.χ. η ενέργεια Fermi των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας στα μέταλλα είναι της τάξης $\varepsilon_F \approx 1.5 - 15$eV και αντιστοιχεί σε θερμοκρασίες Fermi $T_F \approx 10^4 - 10^5$K. Αν λάβουμε υπ' όψιν πως αντίστοιχη θερμική ενέργεια του σωματίου σε θερμοκρασία δωματίου ($T_{δωμ} \approx 300$K) είναι μόλις $k_B T_{δωμ} \approx 1/40$ eV, βλέπουμε πως είναι περίπου εκατό φορές μικρότερη από την τιμή της $\varepsilon_F = k_B T_F$. Άρα, οποιαδήποτε θερμοκρασία T (ακόμη τόσο υψηλή όσο και η $T_{δωμ}$) παραμένει, εν τούτοις, σχετικά πολύ μικρή σε σχέση με τη θερμοκρασία T_F. Με άλλα λόγια, για το ηλεκτρονικό αέριο ικανοποιείται για όλο σχεδόν το εύρος των ενδιαφέρουσων από φυσική άποψη θερμοκρασιών T η συνθήκη $k_B T << \varepsilon_F$ (ή ισοδύναμα $T << T_F$).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Με τον όρο εκφυλισμένο αέριο Fermi θα εννοούμε ένα αέριο μη αλληλεπιδρώντων (ή ασθενώς αλληλεπιδρώντων) φερμιονίων σε συνθήκες συγκέντρωσης και θερμοκρασίας τέτοιες ώστε η θερμική ενέργεια του σωματίου k_BT να είναι πολύ μικρότερη από την ενέργεια Fermi ε_F ($k_BT << \varepsilon_F$). Είδαμε πως στο όριο T = 0K οι μονοσωματιακές καταστάσεις είναι πλήρως κατειλημμένες για $\varepsilon < \varepsilon_F$ ενώ αυτές με $\varepsilon > \varepsilon_F$ είναι σχεδόν πλήρως άδειες, βέβαια, πλήρως κατειλημμένη στην περίπτωση των φερμιονίων είναι μία κατάσταση όταν έχει μόνο ένα σωμάτιο. Στο ίδιο όριο το χημικό δυναμικό παίρνει πεπερασμένη θετική τιμή, επομένως μπορεί να ειπωθεί πως ισχύει και το όριο $\beta\mu \to +\infty$. Ακόμη και το ^{3}He, που η ενέργεια Fermi ε_F αντιστοιχεί σε μια πολύ χαμηλή τιμή με $T_F \approx 5K$ είναι ένα εκφυλισμένο αέριο φερμιονίων αρκεί οι θερμοκρασίες να είναι μικρότερες, π.χ. 100mK (1mK = 10^{-3}K).

Ας καταφύγουμε σε ένα μικρό προσεγγιστικό υπολογισμό της ενέργειας Fermi ε_F για τα ηλεκτρόνια των μετάλλων. Η σταθερά που υπεισέρχεται στον τύπο $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 \frac{N}{V})^{2/3}$ είναι περίπου $(3\pi^2)^{2/3} \approx 10$. Άρα, η ε_F μπορεί να αντιστοιχηθεί στην κινητική ενέργεια $\frac{\hbar^2}{2m(\frac{V}{N})^{2/3}}$ που θα είχε το ηλεκτρόνιο αν έμενε σε μία περιοχή του χώρου V/N που του αναλογεί (αφού στα N ηλεκτρόνια αντιστοιχεί ο όγκος V). Η κινητική του ενέργεια, από την λύση του σωματίου σε κουτί στο Κεφ. 2, θα είναι επίσης της τάξης $\frac{\hbar^2}{2ma^2}$, όπου a^3=V/N. Στην περίπτωση των ηλεκτρονίων ενός μετάλλου με συνεισφορά ενός ηλεκτρονίου αγωγιμότητας ανά άτομο η πλεγματική σταθερά είναι $a \approx 1\text{Å}$, απ' όπου προκύπτει, με αντικατάσταση, ότι η κινητική ενέργεια είναι ίση με την ενέργεια Fermi ε_F (μερικά eV). Επομένως, η θερμική ενέργεια k_BT των ηλεκτρονίων στα μέταλλα είναι "μικρή", ακόμη και για υψηλές T (για $T_{δωμ}$ είναι 1/40 eV), σε σχέση με την "μεγάλη" ενέργεια Fermi ε_F (μερικά eV).

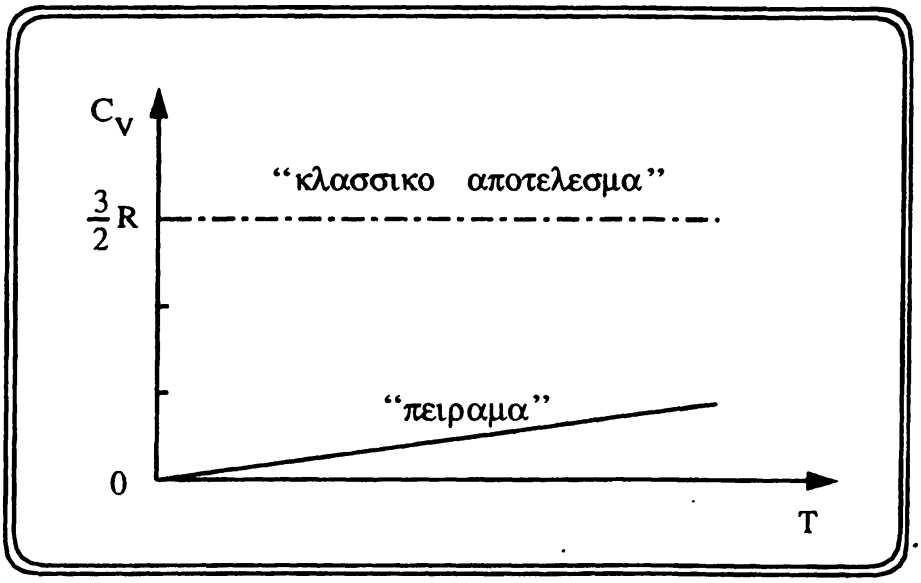
Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε πως η φυσική σημασία της ε_F παραμένει ακόμη για $T \neq 0$, αφού σε πεπερασμένη θερμοκρασία T μια μικρή περιοχή $\Delta\varepsilon \sim k_BT$ (η θερμική ενέργεια διέγερσης των φερμιονίων Σχ. 6.1) πάνω και κάτω από την ε_F είναι αυτή που θα καθορίσει την στατιστική συμπεριφορά του αερίου. Επειδή στις περισσότερες περιπτώσεις, ακόμη και στην θερμοκρασία δωματίου, ισχύει προσεγγιστικά η σχέση $\Delta\varepsilon \sim 0.01\varepsilon_F$, τα κβαντικά φαινόμενα αναμένεται να είναι και σε αυτήν την θερμοκρασία

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

σημαντικά. Άμεσο αποτέλεσμα των παραπάνω είναι η φερμιονική διάταξη που είδαμε για $T = 0K$ να διαταράσσεται κατά ένα πολύ μικρό ποσοστό $\sim \frac{k_B T}{\varepsilon_F}$ όταν $T \neq 0$ και η ε_F να παραμένει η κύρια φυσική ποσότητα για κάθε $T << T_F$.

6.4. Η Θερμοχωρητικότητα του ηλεκτρονικού αερίου

Τα N άτομα ενός μετάλλου με ένα ηλεκτρόνιο σθένους το καθένα συνεισφέρουν N ηλεκτρόνια στο αέριο φερμιονίων. Η κλασσική μηχανική που ισχύει για υψηλές T προβλέπει ολική ενέργεια $E = \frac{3}{2} k_B T \cdot N$ και $C_V = N \cdot \frac{3}{2} k_B$. Διαπιστώνεται, όμως, πως η τιμή αυτή διαφέρει από την πειραματική τιμή, που είναι ακόμη και εκατό φορές μικρότερη. Επιπλέον, για χαμηλές T η C_V δεν είναι σταθερή αλλά ανάλογη της θερμοκρασίας T ενώ μηδενίζεται για $T = 0$.



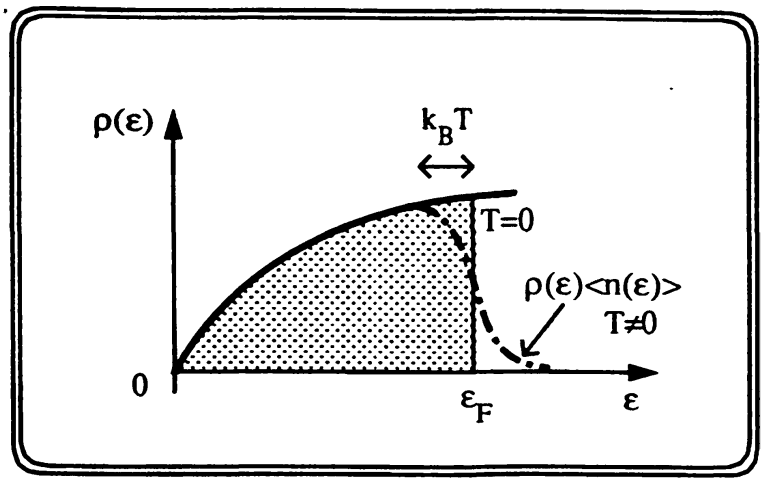
Σχ. 6.4. Η θερμοχωρητικότητα ανά γραμμομόριο στην περίπτωση του αερίου Fermi. Φαίνεται το κλασσικό αποτέλεσμα (που ισχύει σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες T) και η πειραματική καμπύλη με πολύ μικρότερες τιμές (για χαμηλές θερμοκρασίες T). Στην δεύτερη περίπτωση διαπιστώνεται η γραμμική εξάρτηση της θερμοχωρητικότητας από την θερμοκρασία T που ερμηνεύεται με την κβαντική θεωρία του εκφυλισμένου αερίου Fermi.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΚΕΝΤΡΙΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Η ερμηνεία της C_V για χαμηλές θερμοκρασίες επιτυγχάνεται με την θεωρία του εκφυλισμένου αερίου Fermi που συμπεριλαμβάνει τα κβαντικά φαινόμενα. Θα επιδιώξουμε δύο λύσεις του προβλήματος, πρώτα μια προσεγγιστική (ποιοτική) λύση και έπειτα την αυστηρώτερη (ποσοτική) λύση .

6.4.1. Ποιοτική λύση

Σε θερμοκρασία $T \neq 0$ τα μόνα ηλεκτρόνια που μπορούν να αποκτήσουν ενέργεια ($k_B T$) λόγω θέρμανσης και να ανέβουν πάνω από την ενέργεια Fermi ε_F, που είναι η υψηλότερη κατηλημένη στάθμη για $T = 0$, είναι αυτά που βρίσκονται στο ενεργειακό διάστημα $\Delta\varepsilon \sim k_B T$ κάτω από την ε_F (Σχ. 6.5).



Σχ. 6.5. Η πυκνότητα καταστάσεων για το ελεύθερο ηλεκτρονικό αέριο σαν συνάρτηση της μονοσωματιακής ενέργειας ε στις τρεις διαστάσεις. Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά την πυκνότητα των κατειλημμένων μονοσωματιακών καταστάσεων $\rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle$ σε πεπερασμένη θερμοκρασία T. Η θερμική ενέργεια $k_B T$ των διεγερμένων φερμιονίων, ακόμη και για θερμοκρασία δωματίου, κάτω από την ενέργεια Fermi ε_F είναι μικρή σε σχέση με την ε_F ($T << T_F$).

Έστω ΔN ο αριθμός αυτών των ηλεκτρονίων με N τον συνολικό αριθμό των ηλεκτρονίων. Οι αριθμοί N και ΔN μπορούν να υπολογισθούν από το εμβαδόν της πυκνότητας $\rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle$ σαν συνάρτηση της ε. Μιά χονδρική εκτίμηση του ποσοστού $\frac{\Delta N}{N}$ των θερμικά διεγερμένων ηλεκτρονίων μπορεί να επιτευχθεί αν

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

θεωρήσουμε ότι η κατανομή $\rho(\varepsilon) <n(\varepsilon)>$ για d = 3 (Σχ. 6.5.) είναι τετραγωνική (όπως για d = 2). Τότε, ο $\frac{\Delta N}{N}$ δίνεται, κατευθείαν, από τον λόγο των εμβαδών δύο ορθογωνίων κοινού ύψους αλλά με πλάτη $k_B T$ και ε_F αντίστοιχα. Έχουμε, λοιπόν,

$$\frac{\Delta N}{N} \sim \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \sim \frac{T}{T_F} \quad , \tag{6.25}$$

και για T = 300K με $k_B T \sim 1/40$ eV, ώστε για μια τυπική π.χ. για $\varepsilon_F \sim 3$eV

$$\frac{\Delta N}{N} \approx \frac{1/40}{3} \approx \frac{1}{100} \quad . \tag{6.26}$$

Επειδή η θερμοχωρητικότητα είναι, όπως γνωρίζουμε, μια εκτατική μεταβλητή (ανάλογη του N) αναμένεται ότι με τις ίδιες παραμέτρους

$$\frac{C_V(\text{κβαντική})}{C_V(\text{κλασσική})} \approx \frac{\Delta N}{N} \approx \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \approx \frac{1}{100} \quad . \tag{6.27}$$

Ο λόγος $\frac{\Delta N}{N}$ μας δίνει τον παράγοντα κατά τον οποίο διαφέρει η κλασσική πρόβλεψη από την (περίπου εκατό φορές μικρότερη) πειραματική τιμή (Σχ.6.4.). Η σχέση αυτή επιτρέπει, επιπλέον, την διαπίστωση πως η εξάρτηση της θερμοχωρητικότητας C_V από την θερμοκρασία T είναι γραμμική σε μία πολύ μεγάλη περιοχή θερμοκρασιών, από το μηδέν μέχρι την T_F. Άρα,

$$C_V(\text{κβαντική}) \approx C_V(\text{κλασσική}) \frac{k_B T}{\varepsilon_F}$$

$$\approx \frac{3}{2} N k_B^2 \frac{T}{\varepsilon_F}$$

$$\sim T \quad . \tag{6.28}$$

Η πρόβλεψη αυτή επιβεβαιώνεται από τα πειραματικά δεδομένα στο Σχ. (6.4).

Στο Σχ.6.5. φαίνεται η κατανομή των ηλεκτρονίων στις διάφορες μονοσωματιακές ενέργειες για μία θερμοκρασία διάφορη του απόλυτου μηδενός. Βλέπουμε ότι αποτέλεσμα της θέρμανσης του υλικού είναι να μετακινηθεί πάνω από την ενέργεια Fermi ε_F ένα μικρό ποσοστό ηλεκτρονίων ΔN που βρίσκονται σε μία στενή ζώνη ($k_B T$) κάτω από αυτή, ενώ το κύριο σώμα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

της κατανομής για $\varepsilon << \varepsilon_F$ μένει ανεπηρέαστο. Μέσω της εξ. (6.28) εκτιμήσαμε και το μικρό μέγεθος αλλά και την γραμμικότητα της θερμοχωρητικότητας. Μπορούμε, επίσης, να εξάγουμε τον λόγο των ταχυτήτων σε θερμοκρασία δωματίου

$$\frac{\upsilon_F}{\upsilon_{\theta\varepsilon\rho\mu}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_{\theta\varepsilon\rho\mu}}} \approx \sqrt{\frac{5eV}{(1/40)eV}} \approx 15, \qquad (6.29)$$

που δείχνει ότι η ταχύτητα Fermi υ_F είναι περίπου 10 έως 20 φορές μεγαλύτερη από αυτής που υποθέτει η κλασική θεωρία. Το αντίστοιχο μέσο μήκος ελεύθερης διαδρομής

$$l = \upsilon_F \tau \ , \qquad (6.30)$$

αντί για $l = \upsilon_{\theta\varepsilon\rho\mu.} \tau \approx 10\text{Å}$ τώρα από την εξ. (6.29) γίνεται $l = \upsilon_F \tau \approx 150\ \text{Å}$, που δείχνει την αξιοθαύμαστη ευκινησία (μεγάλο l) των ηλεκτρονίων ακόμα και σε θερμοκρασία δωματίου.

6.4.2. Ποσοτική λύση

Σε πεπερασμένες τιμές της θερμοκρασίας T η μέση ενέργεια E(T) και ο αντίστοιχος (σταθερός) αριθμός σωματίων N(T) προκύπτουν από τις σχέσεις

$$E(T) = \int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle \qquad (6.31)$$

και

$$N(T) = \int_0^\infty d\varepsilon\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle \ . \qquad (6.32)$$

Οι αντίστοιχες σχέσεις για $T = 0$ λαμβάνονται με την αντικατάσταση $\langle n(\varepsilon) \rangle = 1$ και του άνω ορίου ολοκλήρωσης στην ε_F (αφού για $\varepsilon \le \varepsilon_F$ ισχύει $\langle n(\varepsilon) \rangle = 1$ και μηδέν για $\varepsilon > \varepsilon_F$). Η αύξηση στην ενέργεια $E(T) - E(0)$, λόγω θέρμανσης των N ηλεκτρονίων, είναι

$$\Delta E(T) = E(T) - E(0) = \int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle - \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \varepsilon\, \rho(\varepsilon)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \int_{\varepsilon_F}^{\infty} d\varepsilon\, \varepsilon\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon)\rangle + \int_{0}^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \varepsilon\, \rho(\varepsilon)\ \langle n(\varepsilon)\rangle - \int_{0}^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \varepsilon\, \rho(\varepsilon)\,, \quad (6.33)$$

όπου έχουμε διαχωρίσει στα δύο το πρώτο ολοκλήρωμα. Αν πολλαπλασιάσουμε τις εκφράσεις για N(T) και N(0) επί ε_F (γιατί;) και τις αφαιρέσουμε

$$\varepsilon_F\,(N(T) - N(0)) = \int_{0}^{\infty} d\varepsilon\, \varepsilon_F\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon)\rangle - \int_{0}^{\varepsilon_F} d\varepsilon\ \varepsilon_F\, \rho(\varepsilon)$$

$$= \int_{\varepsilon_F}^{\infty} d\varepsilon\, \varepsilon_F\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon)\rangle + \int_{0}^{\varepsilon_F} d\varepsilon\ \varepsilon_F\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon)\rangle - \int_{0}^{\varepsilon_F} d\varepsilon\ \varepsilon_F\, \rho(\varepsilon)$$

$$= 0, \quad (6.34)$$

γιατί δεν αλλάζει προφανώς ο αριθμός σωματίων με αύξηση της θερμοκρασίας. Οι σχέσεις (6.33) και (6.34), που επιδιώξαμε να είναι της ίδιας μορφής πολλαπλασιάζοντας τα ολοκληρώματα για το N επί την ε_F, μπορεί να αφαιρεθούν κατά μέλη (λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι το αποτέλεσμα της διαφοράς των αριθμών N είναι μηδέν), ώστε

$$\Delta E(T) = \int_{\varepsilon_F}^{\infty} d\varepsilon\, (\varepsilon - \varepsilon_F)\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon)\rangle + \int_{0}^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, (\varepsilon_F - \varepsilon)\, \rho(\varepsilon)\ (1 - \langle n(\varepsilon)\rangle) \quad (6.35)$$

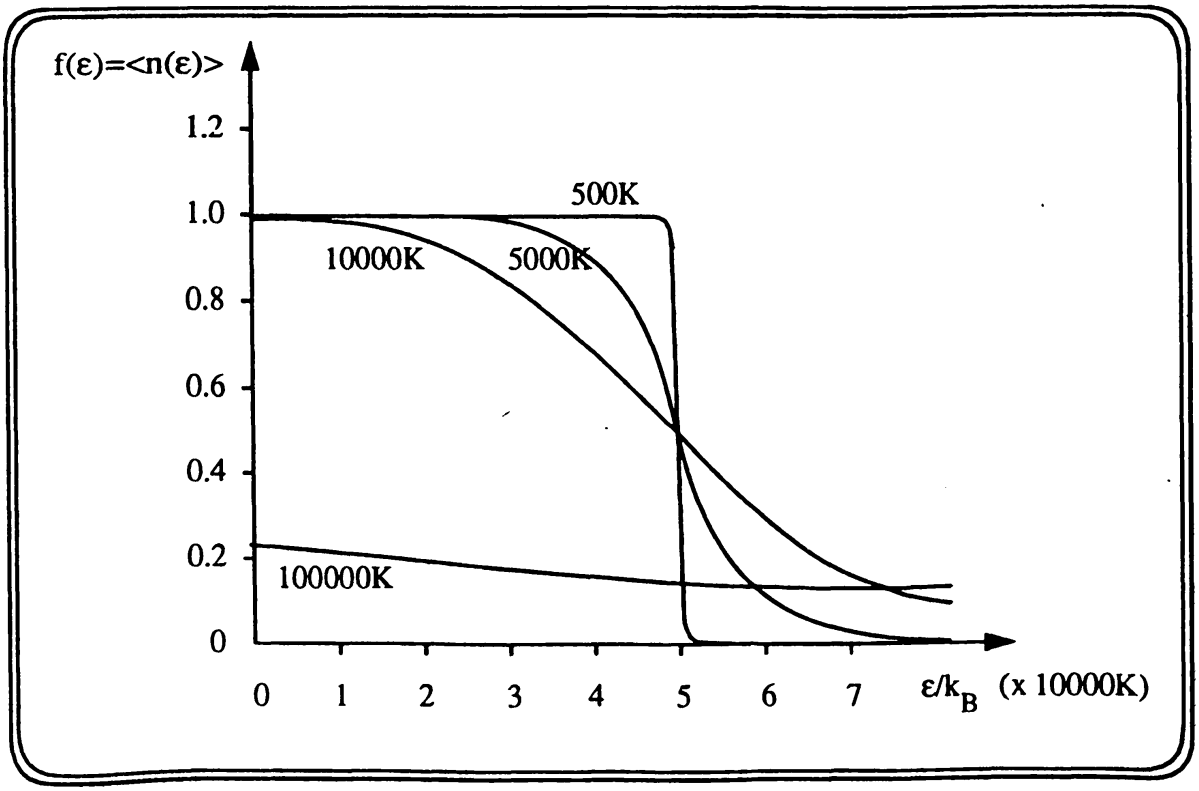
Ο πρώτος όρος αντιστοιχεί στην (θετική) ενέργεια για να πάει το ηλεκτρόνιο από την ενέργεια Fermi ε_F σε μια μεγαλύτερη ενεργειακή στάθμη ενώ ο δεύτερος όρος είναι η ενέργεια που απαιτείται για να φέρει το ηλεκτρόνιο από μια χαμηλότερη ενέργεια στην ενέργεια Fermi ε_F. Η πιθανότητα ώστε ένα ηλεκτρόνιο να μετακινηθεί από μια μονοσωματιακή κατάσταση ενέργειας ε είναι $1-\langle n(\varepsilon)\rangle$.

Η θερμοχωρητικότητα του αερίου λαμβάνεται με παραγώγιση ως προς T της ΔE(T) και αφού η εξάρτηση από την θερμοκρασία T είναι μόνο στην συνάρτηση Fermi $\langle n(\varepsilon)\rangle$ συμπτύσσοντας τα δύο ολοκληρώματα έχουμε

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΕΘΝΙΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$C_V = \frac{\partial E(T)}{\partial T} = \frac{\partial \Delta E(T)}{\partial T} = \int_0^\infty d\varepsilon \; (\varepsilon - \varepsilon_F)\, \rho(\varepsilon) \, \frac{\partial \langle n(\varepsilon) \rangle}{\partial T} \; . \qquad (6.36)$$

Στις θερμοκρασίες που μας ενδιαφέρουν για τα μέταλλα $k_B T << \varepsilon_F$ η παράγωγος $\frac{\partial \langle n(\varepsilon) \rangle}{\partial T}$ είναι μεγάλη μόνο σε ενέργειες κοντά στην ενέργεια Fermi ($\varepsilon \sim \varepsilon_F$) (Σχ.6.6.).



Σχ.6.6. Η συνάρτηση Fermi για διαφορετικές τιμές της θερμοκρασίας T με T_F = 50 000K. Το χημικό δυναμικό μ(T) μπορεί να βρεθεί από την τιμή <n(0.5)> μέσω της εξ. (6.1).

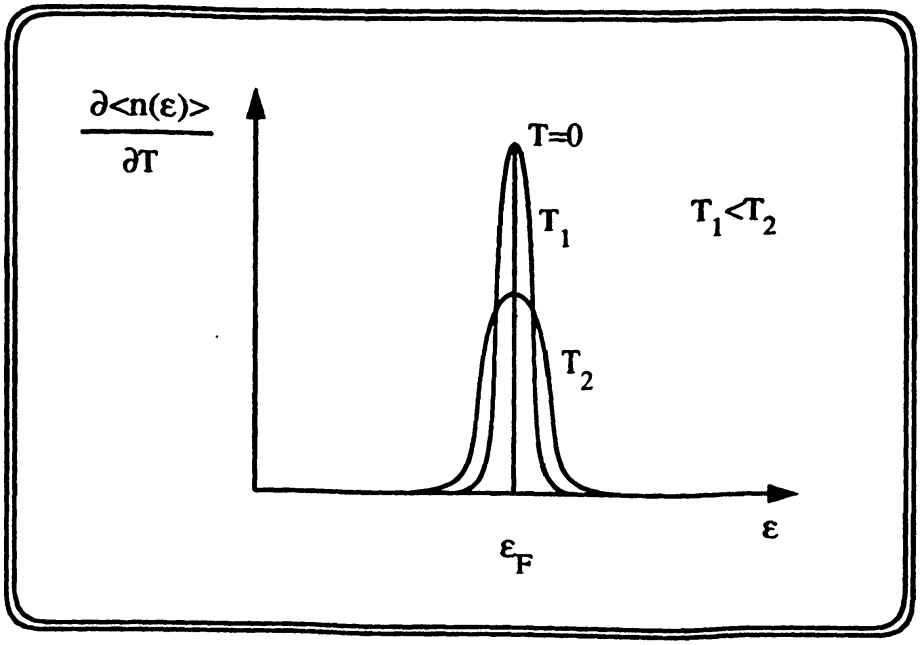
Η αντικατάσταση της πυκνότητας καταστάσεων ρ(ε) στο ολοκλήρωμα με την τιμή της στην ενέργεια Fermi $\rho(\varepsilon_F)$ αποτελεί επομένως ικανοποιητική προσέγγιση ώστε,

$$C_V \approx \rho(\varepsilon_F) \int_0^\infty d\varepsilon \; (\varepsilon - \varepsilon_F) \, \frac{\partial \langle n(\varepsilon) \rangle}{\partial T} \; . \qquad (6.37)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Στην προσέγγιση του εκφυλισμένου φερμιονικού αερίου μπορεί να αγνοηθεί η εξάρτηση του χημικού δυναμικού από την θερμοκρασία (Σχ. 6.6), ώστε $\mu \sim \mu(0) = \varepsilon_F$. Επομένως, ο υπολογισμός της παραγώγου στο ολοκλήρωμα της εξ. (6.37) δίνει (να γίνει σαν άσκηση, δείτε και το Σχ. 6.7)

$$\frac{\partial \langle n(\varepsilon) \rangle}{\partial T} = \frac{(\varepsilon - \varepsilon_F)}{k_B T^2} \frac{\exp[(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T]}{\{\exp[(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T] + 1\}^2} . \qquad (6.38)$$



Σχ. 6.7. Η παράγωγος $\frac{\partial \langle n(\varepsilon) \rangle}{\partial T}$ για τρείς διαφορετικές τιμές της θερμοκρασίας Τ. Για Τ = 0Κ είναι η συνάρτηση-δέλτα $\delta(\varepsilon_F)$.

Με αντικατάσταση στην εξ. (6.37) δίνει

$$C_V \approx \frac{\varrho(\varepsilon_F)}{k_B T^2} \int_0^\infty d\varepsilon \; (\varepsilon - \varepsilon_F)^2 \; \frac{\exp[(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T]}{\{\exp[(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T] + 1\}^2} \qquad (6.39)$$

και με την αντικατάσταση $x = \frac{(\varepsilon - \varepsilon_F)}{k_B T}$ με $dx = \frac{d\varepsilon}{k_B T}$ έχουμε

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$C_V \approx \frac{\varrho(\varepsilon_F)}{k_B T^2} (k_B T)^3 \int_{-\varepsilon_F/k_B T}^{\infty} dx \ \frac{x^2 e^x}{\{e^x+1\}^2} \ . \qquad (6.40)$$

Πάλι για το εκφυλισμένο αέριο Fermi ($k_B T << \varepsilon_F$) το κάτω όριο στο ολοκλήρωμα μπορεί να θεωρηθεί το $-\infty$ (είναι από -100 και κάτω), ώστε

$$C_V \approx \varrho(\varepsilon_F) \ k_B^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \frac{x^2 e^x}{\{e^x+1\}^2} \ T$$

$$= \frac{1}{3} \pi^2 \varrho(\varepsilon_F) k_B^2 \cdot T \quad , \qquad (6.41)$$

με το ολοκλήρωμα να υπολογίζεται μέσω του ολοκληρώματος Riemann

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \frac{x}{e^{\alpha x}+1} = \frac{\pi^2}{12\alpha^2} \qquad (6.42)$$

με την τεχνική της παραγώγισης ως προς α (ΠΑΡΑΡΤ. Α).

Από την εξ. (6.23) αντικαθιστούμε την $\varrho(\varepsilon_F)$ και η θερμοχωρητικότητα των ηλεκτρονίων γράφεται και ως

$$\boxed{C_V = \frac{1}{2} N \pi^2 \ k_B \ \frac{T}{T_F}} \ . \qquad (6.43)$$

Η γραμμική συμπεριφορά $C_V = \gamma \cdot T$, με την σταθερά του Sommerfeld $\gamma = \frac{1}{3} \pi^2 \varrho(\varepsilon_F) k_B^2$ έχει αποδειχθεί ευρύτερα στην φυσική των μετάλλων. Υπενθυμίζεται πάλι πως η T_F δεν είναι μια πραγματική θερμοκρασία αλλά απλώς ένα σημείο αναφοράς.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

6.5. Αναπτύγματα Sommerfeld (μικρής-Τ)

Σε υπολογισμούς στο εκφυλισμένο αέριο Fermi εμφανίζονται ολοκληρώματα του τύπου

$$I(T) = \int_0^\infty \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1}\, f(\varepsilon)\, d\varepsilon \qquad (6.44)$$

με f μια νέα συνάρτηση. Για T = 0K δίνει

$$I(0) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, f(\varepsilon) \quad , \qquad (6.45)$$

και επιθυμούμε μία έκφραση για το I(T) σε χαμηλές θερμοκρασίες T. Το ανάπτυγμα αυτό, όταν η f είναι μία αυθαίρετη συνάρτηση και το ολοκλήρωμα να συγκλίνει, είναι γνωστό ως "ανάπτυγμα Sommerfeld". Με χρήση της

$$\varepsilon - \mu = k_BT\, z \qquad (6.46)$$

έχουμε

$$I(T) = k_BT \int_{-\mu/k_BT}^\infty dz\, \frac{f(\mu + k_BT\, z)}{e^z+1} \quad . \qquad (6.47)$$

Με αλλαγή μεταβλητών και των ορίων ολοκλήρωσης

$$I(T) = k_BT \int_0^{\mu/k_BT} dz\, \frac{f(\mu - k_BT\, z)}{e^{-z}+1} + k_BT \int_0^\infty dz\, \frac{f(\mu + k_BT\, z)}{e^z+1} \quad , \qquad (6.48)$$

όπως επίσης και της ισότητας

$$\frac{1}{e^{-z}+1} = 1 - \frac{1}{e^z+1} \qquad (6.49)$$

έπεται

$$I(T) = \int_0^\mu d\varepsilon\, f(\varepsilon) + k_BT \int_0^\infty dz\, \left[\frac{f(\mu + k_BT\, z) - f(\mu - k_BT\, z)}{e^z+1}\right] \quad , \qquad (6.50)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

όπου αντικαταστήσαμε το μ/k_BT με το ∞ (με λάθος $e^{-\mu/k_BT} << 1$). Αν αναπτύξουμε την f σε σειρά Taylor $\left(f(\mu \pm a) = f(\mu) \pm a f'(\mu) + \frac{a^2}{2} f''(\mu) \pm \ldots\right)$

$$I(T) = \int_0^{\mu} d\varepsilon\, f(\varepsilon) +$$

$$2(k_BT)^2 \left\{ f'(\mu) \int_0^{\infty} dz \frac{z}{e^z+1} + \frac{(k_BT)^2}{3!} f'''(\mu) \int_0^{\infty} dz \frac{z^3}{e^z+1} + \ldots \right\} \quad (6.51)$$

Προσέξτε ότι οι άρτιες δυνάμεις έχουν μηδενισθεί και τα εναπομείνοντα ολοκληρώματα υπολογίζονται με την Riemann συνάρτηση ζ (βλέπε ΠΑΡΑΡΤ. Α) ώστε

$$\boxed{I(T) = \int_0^{\mu} d\varepsilon\, f(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 f'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360}(k_BT)^4 f'''(\mu) + \ldots} \quad (6.52)$$

6.5.1. Το χημικό δυναμικό

Εφαρμόζοντας το ανάπτυγμα Sommerfeld (6.52) έχουμε

$$N = \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

$$= \int_0^{\mu} d\varepsilon\, \rho(\varepsilon) + \rho'(\mu) \frac{(\pi k_BT)^2}{6} + \ldots \quad (6.53)$$

και για $T = 0K$

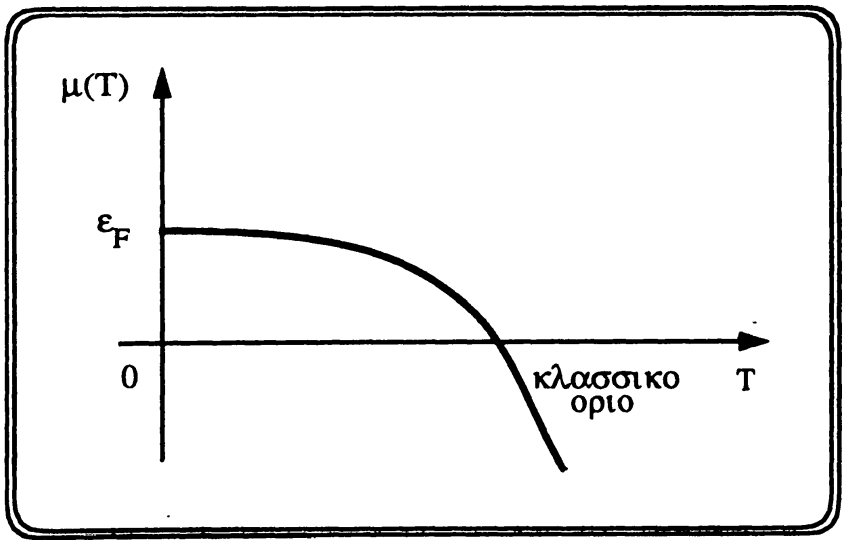
$$N(0) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \rho(\varepsilon) \quad (6.54)$$

αφού $\mu(0) = \varepsilon_F$ εξ ορισμού, ενώ εν γένει $\mu = \mu(T)$. Αφαιρώντας τον N(0) από το N παίρνουμε σε τάξη T^2

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\int_0^{\mu} d\varepsilon\, \varrho(\varepsilon) - \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \varrho(\varepsilon) + \varrho'(\mu)\,\frac{(\pi k_B T)^2}{6} = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, \varrho(\varepsilon) + \varrho'(\mu)\,\frac{(\pi k_B T)^2}{6} = 0\ . \tag{6.55}$$



Σχ. 6.8. Το χημικό δυναμικό μ συναρτήσει της θερμοκρασίας T. Γιά T = 0K είναι η ενέργεια Fermi ε_F.

Για την εύρεση του μ(T) μέχρι την τάξη T^2 αντικαθιστούμε την ϱ(ε) από την $\varrho(\varepsilon_F)$ και την $\varrho'(\mu)$ από την $\varrho'(\varepsilon_F)$ ώστε

$$\int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, \varrho(\varepsilon) = \varrho(\varepsilon_F) \int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon = \varrho(\varepsilon_F)\,(\mu - \varepsilon_F)\ . \tag{6.56}$$

Άρα

$$(\mu - \varepsilon_F)\,\varrho(\varepsilon_F) + \varrho'(\varepsilon_F)\,\frac{(\pi k_B T)^2}{6} = 0\ ,$$

$$\boxed{\mu(T) = \varepsilon_F - \frac{(\pi k_B T)^2}{6}\,\frac{\varrho'(\varepsilon_F)}{\varrho(\varepsilon_F)} + O(T^4)\ .} \tag{6.57}$$

Για ηλεκτρόνια με $\varrho(\varepsilon) \propto \varepsilon^{1/2}$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\frac{\varrho'(\varepsilon_F)}{\varrho(\varepsilon_F)} = \frac{1}{2\varepsilon_F} \tag{6.58}$$

και

$$\mu(T) = \varepsilon_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2\right]$$

$$= \varepsilon_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right]. \tag{6.59}$$

Παρατηρούμε ότι η μετατόπιση του μ από την ε_F είναι της τάξης $\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2 \sim 10^{-4}$ σε θερμοκρασία $T_{δωμ.}$

6.5.2. Ενέργεια και θερμοχωρητικότητα

Με το ανάπτυγμα Sommerfeld έχουμε για την ενέργεια E:

$$E(T) = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon\varrho(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

$$\approx \int_0^\mu d\varepsilon\, \varrho(\varepsilon) + \frac{(\pi k_BT)^2}{6}[\varrho(\varepsilon_F) + \varepsilon\,\varrho'(\varepsilon_F)] \tag{6.60}$$

και

$$E(0) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \varepsilon\, \varrho(\varepsilon) \quad . \tag{6.61}$$

Αντικαθιστώντας το $\varepsilon\,\varrho(\varepsilon)$ με τον $\varepsilon_F\,\varrho(\varepsilon_F)$ και την ε με την ε_F:

$$E(T) - E(0) = (\mu(T) - \varepsilon_F)\varepsilon_F\,\varrho(\varepsilon_F) + \frac{(\pi k_BT)^2}{6}(\varepsilon_F\,\varrho'(\varepsilon_F) + \varrho(\varepsilon_F)). \tag{6.62}$$

Αναπτύσσοντας το μ(T), από την εξ. (6.59), οδηγούμεθα σε διαγραφή των όρων εκτός του τελευταίου, ώστε μέχρι την δεύτερη τάξη στην θερμοκρασία

$$\boxed{E(T) - E(0) \approx \frac{(\pi k_BT)^2}{6}\varrho(\varepsilon_F)} \tag{6.63}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και $C_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T \rho(\varepsilon_F) = \gamma T$, όπως έχουμε ήδη δείξει (εξ. 6.41). Η πυκνότητα καταστάσεων στην ενέργεια Fermi ε_F υπολογίζεται από πειράματα εύρεσης του γ. Από το θεώρημα ισοκατανομής προβλέπεται στην κλασική στατιστική η $C_V = N k_B \frac{3}{2}$.

6.5.3. Εντροπία S και διακυμάνσεις στον μέσο αριθμό N.

Από την σχέση (5.34) για την εντροπία S, όπου N και E είναι ο μέσος αριθμός σωματίων και η μέση ενέργεια αντίστοιχα

$$S = \frac{E}{T} - \frac{\mu N}{T} \pm k_B \sum_r \ln \{1 \pm \exp(-\beta(\varepsilon_r - \mu))\} , \qquad (6.64)$$

εισάγοντας τον μέσο αριθμό κατάληψης φερμιονίων (εξ. 6.1.) $\langle n_r \rangle = [e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} + 1]^{-1}$ η εντροπία μπορεί να λάβει την μορφή

$$\boxed{S = - k_B \sum_r [\langle n_r \rangle \ln \langle n_r \rangle + (1 - \langle n_r \rangle) \ln (1 - \langle n_r \rangle)]} . \qquad (6.65)$$

Αναφέρουμε πάλι το γεγονός ότι για T = 0K η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος των N-φερμιονίων έχει κατειλημμένες, από ένα σωμάτιο, τις καταστάσεις μέχρι την $\varepsilon_F = \mu(0)$ και όλες τις άλλες άδειες. Για $T \neq 0$ ο $\langle n_r \rangle$ παίρνει τιμές ενδιάμεσες μεταξύ 0 και 1 (αφού είναι μέση τιμή) ενώ, φυσικά κάθε συγκεκριμένη τιμή του n_r δεν μπορεί να είναι παρά 0 ή 1.

Αν δηλώσουμε με $p_{n_r=0}$ την πιθανότητα ώστε η μονοσωματιακή κατάσταση $|r\rangle$ δεν είναι κατειλημμένη και $p_{n_r=1}$ ότι είναι κατειλημμένη από ένα σωμάτιο τότε από τον ορισμό της μέσης τιμής του $\langle n_r \rangle$:

$$0\ p_{n_r=0} + 1\ p_{n_r=1} = \langle n_r \rangle \qquad (6.66)$$

με

$$p_{n_r=0} + p_{n_r=1} = 1 \quad . \qquad (6.67)$$

Άρα,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$p_{n_r=1} = \langle n_r \rangle \quad \text{και} \quad p_{n_r=0} = 1 - \langle n_r \rangle \,, \tag{6.68}$$

και με αντικατάσταση στο άθροισμα σε όλες τις ανεξάρτητες καταστάσεις

$$S = - k_B \sum_r [\, p_{n_r=0} \ln p_{n_r=0} + p_{n_r=1} \ln p_{n_r=1} \,] \,. \tag{6.66}$$

προκύπτει η εξ. (6.65) για την εντροπία.
Η εξ. (6.69) εκφράζει την ολική αβεβαιότητα με το άθροισμα των αβεβαιοτήτων για κατάληψη όλων των μονοσωματιακών καταστάσεων. Αφού η κατάληψη της κάθε μιας κατάστασης είναι ανεξάρτητη από την κατάληψη των υπολοίπων οι αβεβαιότητες είναι προσθετικές.

Οι διακυμάνσεις στον αριθμό μιας σωματιδιακής στάθμης |r> είναι

$$\langle n_r^2 \rangle = 0^2 \, p_{n_r=0} + 1^2 \, p_{n_r=1} = \langle n_r \rangle \,, \tag{6.70}$$

ώστε

$$\langle (\Delta n_r)^2 \rangle = \langle n_r^2 \rangle - \langle n_r \rangle^2 = \langle n_r \rangle \, (1 - \langle n_r \rangle) \,, \tag{6.71}$$

και η σχετική διακύμανση είναι

$$\frac{\sqrt{\langle (\Delta n_r)^2 \rangle}}{\langle n_r \rangle} = \sqrt{\frac{1 - \langle n_r \rangle}{\langle n_r \rangle}} \,, \tag{6.72}$$

που παίρνει κάθε δυνατή τιμή από 0 μέχρι ∞. Για $\langle n_r \rangle = 1$ είναι, προφανως, 1/2.

Οι διακυμάνσεις στον ολικό αριθμό σωματιδίων $N = \sum_r \langle n_r \rangle$ είναι,

$$\frac{\langle (\Delta N)^2 \rangle}{\langle N \rangle^2} = \frac{1}{\langle N \rangle^2} \left[\sum_{s,r} \langle n_s n_r \rangle - \sum_{s,r} \langle n_s \rangle \langle n_r \rangle \right]$$

$$= \frac{1}{\langle N \rangle^2} \sum_r [\langle n_r^2 \rangle - \langle n_r \rangle^2] + \frac{1}{\langle N \rangle^2} \sum_{\substack{s,r \\ s \neq r}} [\langle n_s \, n_r \rangle - \langle n_s \rangle \langle n_r \rangle]. \tag{6.73}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Επειδή, όμως, τα σωμάτια είναι ανεξάρτητα οι καταλήψεις διαφορετικών σταθμών είναι ανεξάρτητες για $s \neq r$ ώστε $\langle n_s n_r \rangle = \langle n_s \rangle \langle n_r \rangle$, με αποτέλεσμα ο δεύτερος όρος να γίνεται μηδέν. Επίσης, λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι $\langle n_r^2 \rangle = \langle n_r \rangle$, έχουμε

$$\frac{\langle (\Delta N)^2 \rangle}{\langle N \rangle^2} = \frac{1}{\langle N \rangle^2} \sum_r \langle n_r \rangle (1 - \langle n_r \rangle)$$

$$= \frac{1}{\langle N \rangle} - \frac{1}{\langle N \rangle^2} \sum_r \langle n_r \rangle^2 . \qquad (6.74)$$

Επειδή $\langle n_r \rangle \in [0,1]$ το άθροισμα $\sum_r \langle n_r^2 \rangle$ είναι μικρότερο του μέσου αριθμού $\langle N \rangle$, και οι σχετικές διακυμάνσεις είναι

$$\frac{\sqrt{\langle (\Delta N)^2 \rangle}}{\langle N \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{\langle N \rangle}} . \qquad (6.72)$$

όπως αναμένεται.

6.6 Ιδιότητες του ηλεκτρονικού αερίου

Οι ιδιότητες των μετάλλων ερμηνεύονται από το μοντέλο των "ελευθέρων ηλεκτρονίων", στο οποίο τα ασθενώς συζευγμένα με τα άτομα ηλεκτρόνια σθένους αντιμετωπίζονται ως ένα αέριο. Σε πρώτη προσέγγιση αγνοούνται οι αλληλεπιδράσεις και το αέριο είναι ιδανικό. Ο Drude (1900) πρότεινε ένα επιτυχές μοντέλο βασιζόμενο στην "κινητικη θεωρία των αερίων" και την στατιστική Maxwell-Boltzmann. Το μοντέλο Drude ερμηνεύει τον νόμο του Ohm αλλά και τον νόμο των Wiedemann-Franz, που εκφράζει την αναλογία ματαξύ ηλεκτρικής και θερμικής αγωγιμότητας. Εάν N είναι ο ολικός αριθμός των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας του μετάλλου και V ο όγκος του έχουμε τότε η πυκνότητα των ηλεκτρονίων του μετάλλου είναι $\frac{N}{V}$ (σε cm^{-3}). Εάν είναι γνωστή η πυκνότητα μάζας ρ_m(gr cm^{-3}), το ατομικό ή μοριακό βάρος βάρος M (σε gr) και το σθένος Z (ο αριθμός ηλεκτρονίων που συνεισφέρει το κάθε άτομο στο αέριο) προκύπτει ότι ο αριθμός ηλεκτρονίων ανά cm^3 είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\frac{N}{V} = N_A \cdot \frac{Z\varrho_m}{M} \quad . \tag{6.76}$$

Αφού ϱ_m είναι η μάζα των N σωματίων N m διαιρεμένη με τον όγκο V μπορεί να γραφεί και ως $\varrho_m = \frac{N_A m N}{N_A V} = \frac{M N}{N_A V}$ με $M = N_A m$, απ' όπου προκύπτει η εξ. (6.76) όταν συμπεριληφθεί και το σθένος Z. Στην έκφραση της εξ. (6.76) για την πυκνότητα $\frac{N}{V}$ ο αριθμός του Avogadro $N_A = 6.023 \times 10^{24}$ εκφράζει τον αριθμό των ατόμων του υλικού που περιέχεται σε μία ποσότητα M gr (1 mole).

Παράδειγμα: Μια αριθμητική εφαρμογή για τον Cu δίνει

$$\left.\begin{array}{l} \varrho_m = 8.96\ \text{gr/cm}^3 \\ M = 63.55\ \text{gr} \\ Z = 1 \end{array}\right\} \Rightarrow \frac{N}{V} = 8.49 \times 10^{22}\ \text{cm}^{-3} \quad . \tag{6.77}$$

Μπορούμε, επίσης, να εκφράσουμε την ηλεκτρονική πυκνότητα $\frac{N}{V}$ μέσω της ακτίνας r_s μιας σφαίρας με όγκο ίσον με τον όγκο που αντιστοιχεί σε ένα ηλεκτρόνιο αγωγιμότητας, ώστε

$$\frac{V}{N} = \frac{4\pi r_s^3}{3}$$

$$\Rightarrow \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi N/V}\right)^{1/3} \quad . \tag{6.78}$$

Οι τυπικές τιμές της $\frac{N}{V}$ είναι περίπου 10^{22} και της ακτίνας r_s ανά ηλεκτρόνιο είναι 1 έως 3 Å (1Å=10^{-8}cm), ενώ η ακτίνα Bohr είναι $a_o = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529$ Å, ώστε προκύπτει ο λόγος $\frac{r_s}{a_o} \approx 2$ μέχρι 6. Παρά το γεγονός ότι οι ηλεκτρονικές πυκνότητες είναι υψηλές (π.χ. 1000 φορές ὑψηλότερες από το κλασικό αέριο), αλλά και την αναπόφευκτη παρουσία των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου και ηλεκτρονίου-ιόντος, το μοντέλο του Drude είναι αρκετά επιτυχές. Όμως, όπως είδαμε παραπάνω η στατιστική MB αποτυγχάνει στην

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

πρόβλεψή της για την θερμοχωρητικότητα σε μη υψηλές θερμοκρασίες. Στα πλαίσια της κβαντικής στατιστικής FD επιταχύνεται η πλήρης ερμηνεία και της θερμοχωρητικότητας των μετάλλων.

Είδαμε ότι για T=0K η θεμελιώδης κατάσταση των N-ηλεκτρονίων φτιάχνεται με τον εποικισμό των μονοσωματιακών καταστάσεων με βάση την αρχή του Pauli. Η τοποθέτηση κάθε ηλεκτρονίου γίνεται σε κάθε μία κατάσταση που χαρακτηρίζεται από το κυματάνυσμα $\vec{k}$ αλλά και την προβολή του ηλεκτρονικού σπιν κατά μήκος του άξονα κβάντωσης που μπορεί να πάρει δύο τιμές : $\frac{\hbar}{2}$ (σπιν ↑) και $-\frac{\hbar}{2}$ (σπιν ↓). Επομένως σε κάθε επιτρεπόμενο $\vec{k}$ μπορούμε να τοποθετήσουμε δύο ηλεκτρόνια και τα σημεία του χώρου - $\vec{k}$ αποτελούν μία σφαίρα ακτίνας k_F, που ονομάζεται σφαίρα Fermi (Σχ.6.3). Ο ολικός αριθμός των ηλεκτρονίων N είναι διπλάσιος (λόγω του διπλού εκφυλισμού της κάθε κατάστασης που οφείλεται στο σπιν) από τον αριθμό των καταστάσεων ($\vec{k}$ - σημείων στην σφαίρα Fermi). Έτσι προκύπτει η ηλεκτρική πυκνότητα $\frac{N}{V}$ (εξ. 6.13) .

Συνοψίζοντας, τα ηλεκτρόνια χαρακτηρίζονται από την ακτίνα (ή το κυματάνυσμα) Fermi k_F, την ορμή ($p_F = \hbar k_F$), την ενέργεια Fermi ($\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2/2m$) και την ταχύτητα Fermi ($v_F = \hbar k_F/m$). Συναρτήσει της r_s η ακτίνα Fermi είναι

$$k_F = \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{r_s} = \frac{1.92}{r_s} \qquad (6.79)$$

και συναρτήσει της r_s και της ακτίνας του Bohr a_o

$$\boxed{k_F = \frac{3.63}{r_s/a_o}\ \text{Å}^{-1}}. \qquad (6.80)$$

Αφού τυπικές τιμές $r_s/a_o \approx 2\text{-}6$ έπεται ότι $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} \approx 3\text{-}10\text{Å}$ και $v_F \approx \frac{4\cdot 2}{r_s/a_o} \cdot 10^8$ cm/sec. Παρατηρούμε, λοιπόν, ότι η ταχύτητα Fermi v_F είναι πολύ μεγάλη (1% της ταχύτητας του φωτός!). Στην κλασική προσέγγιση αναμένεται πως για T = 0 όλα τα σωμάτια θα έπρεπε να έχουν μηδενική ταχύτητα. Όμως, ακόμη και σε $T_{δωμ.}$ η μέση θερμική ταχύτητα για ένα σωμάτιο με ηλεκτρονική μάζα είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$\approx 10^7$cm/sec. Απο τον ορισμό της a_o η ενέργεια Fermi είναι $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{e^2}{2a_o}$.

$(k_F a_o)^2$ ώστε

$$\boxed{\varepsilon_F = \frac{50.1}{(r_s/a_o)^2}\ \text{eV}}\ , \qquad (6.81)$$

Επειδή $\frac{e^2}{2a_o}$ = 1 Rydberg = 13.606 eV είναι η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του ατόμου του H_2 προκύπτουν τυπικές τιμές της ε_F από 1.5 μέχρι 15eV. Η θερμοκρασία Fermi T_F από την σχέση $k_B T_F = \varepsilon_F$ είναι

$$\boxed{T_F = \frac{58.2}{(r_s/a_o)^2} \times 10^4\ \text{K}}\ . \qquad (6.82)$$

Π.χ. για το Cu υπολογίζουμε $T_F = 8.12 \times 10^4$ K. Επομένως το αέριο των ηλεκτρονίων του Cu είναι εκφυλισμένο στην μεγαλύτερη κλίμακα θερμοκρασιών και πρέπει να χρησιμοποιήσουμε την κβαντική στατιστική FD για να περιγράψουμε τις ιδιότητές του.

Η πίεση P που εξασκείται από το ηλεκτρονικό αέριο είναι

$$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N \qquad (6.83)$$

και μέσω της σχέσης (6.17) $E = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$ οδηγεί στην ήδη γνωστή σχέση

$$P = \frac{2}{3}\frac{E}{V}\ . \qquad (6.84)$$

Το μέτρο ελαστικότητας όγκου B και η συμπιεστότητα K ορίζονται από την

$$B = \frac{1}{K} = -V\frac{\partial P}{\partial V} = V\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\ . \qquad (6.85)$$

Το B δίνει ένα μέτρο της ακαμψίας του συστήματος, δηλ. της ενέργειας που απαιτείται για να προκαλέσουμε μία ορισμένη παραμόρφωση. Όσο μεγαλύτερο είναι το μέτρο ελαστικότητας B, τόσο μικρότερη είναι η συμπιεστότητα K και τόσο πιο μεγάλη δύναμη χρειάζεται για να επιτύχουμε μία ορισμένη παραμόρφωση. Από την $P = \frac{2}{3}\frac{E}{V}$ προκύπτει $P \sim V^{-5/3}$, άρα,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$B = -V\left(-\frac{5}{3}\frac{P}{V}\right) = \frac{5}{3}P = \frac{10}{9}\frac{E}{V} = \frac{2}{3}\frac{N}{V}\varepsilon_F \ , \qquad (6.86)$$

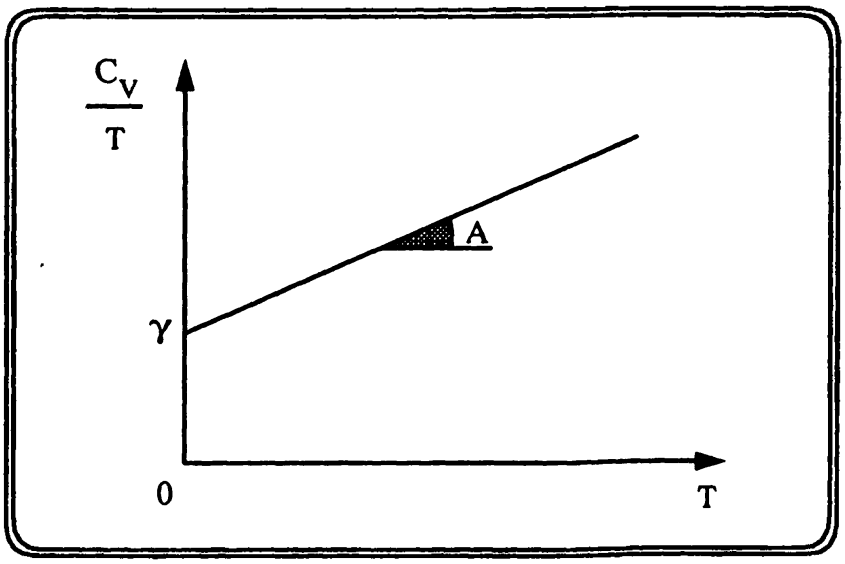
και το μέτρο ελαστικότητας είναι

$$\boxed{B = \left(\frac{6.13}{r_s/a_o}\right)^5 \times 10^{10} \ \text{dynes/cm}^2} \ . \qquad (6.87)$$

Σχετικά με την θερμοχωρητικότητα των μετάλλων αναμένεται ότι θα συνεισφέρουν όχι μόνο τα ηλεκτρόνια αλλά και οι ιοντικοί βαθμοί ελευθερίας των ταλαντώσεων του πλέγματος (δηλ. τα φωνόνια). Για θερμοκρασίες κάτω από την $T_{δωμ.}$

$$C_V = \gamma T + A\,T^3 \ , \qquad (6.88)$$

όπου ο πρώτος όρος αντιστοιχεί στα ηλεκτρόνια και ο δεύτερος στα φωνόνια. Ο πειραματικός προσδιορισμός της γ φαίνεται στο Σχ.6.9.



Σχ.6.9. Ο προσδιορισμός της παραμέτρου γ από το πείραμα υπολογισμού της θερμοχωρητικότητας σχεδιασμένο ως C_V/T συναρτήσει της T. Το σημείο που τέμνεται ο άξονας των y δίνει το γ (ηλεκτρονική συνεισφορά γT) ενώ η κλίση δίνει το A (συνεισφορά από τις ταλαντώσεις του πλέγματος $A\,T^3$).

Από πειραματικές μετρήσεις διαπιστώθηκε ότι ο γραμμικός όρος γίνεται συγκρίσιμος με τον κυβικό όρο σε θερμοκρασίες μερικών Kelvin. Όπως έχουμε ήδη δείξει

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\varrho(\varepsilon_F) = \frac{3}{2}\frac{N}{\varepsilon_F} = \frac{3}{2}\frac{2V}{(2\pi)^3}\frac{4}{3}\pi\frac{k_F^3}{\hbar^2 k_F^2}2m$$

$$= V\frac{mk_F}{\hbar^2\pi^2}\ , \qquad (6.89)$$

και, επομένως, η σταθερά γ είναι ανάλογη της μάζας m. Ενώ τα αλκαλικά μέταλλα αλλά και τα ευγενή μέταλλα (Cu, Ag, Au) περιγράφονται ικανοποιητικά από το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων για την C_V, αποκλίσεις του πειράματος από την θεωρία εμφανίζονται στον σίδηρο (Fe) και το Μαγγάνιο (Mn). Σε αυτές τις περιπτώσεις απαιτείται ο ορισμός μιας θερμικής ενεργής μάζας m^* μέσω της σχέσης

$$\frac{m^*}{m} = \frac{\gamma(\text{παρατήρησης})}{\gamma(\text{ελεύθερων e})}\ . \qquad (6.90)$$

Ο λόγος $\frac{m^*}{m}$ είναι 1.1, 8.0 και 27.0 για τον Άργυρο (Ag), τον Σίδηρο (Fe) και το Μαγγάνιο (Mn), αντίστοιχα. Για ορισμένα μέταλλα των λεγομένων των "βαρέων φερμιονίων" ο λόγος αυτός φτάνει και στις πολύ μεγάλες τιμές $\frac{m^*}{m}$ =200 !

Η θερμοχωρητικότητα ανά γραμμομόριο (mole) είναι

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} Z R \frac{\varrho(\varepsilon_F)}{N}(k_B T) \qquad (6.91)$$

όπου $R = N_A k_B = 8.314$ Joules $\text{mole}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} = 1.99$ cal $\text{mole}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ενώ το σθένος είναι Z. Έχουμε πολλαπλασιάσει την ειδική θερμότητα ανά μονάδα όγκου με τον όγκο ZN_AV/N που καταλαμβάνουν τα ηλεκτρόνια ενός mole. Με τον τύπο $\varrho(\varepsilon_F) = \frac{3}{2}\frac{N}{\varepsilon_F}$ για την πυκνότητα καταστάσεων στην ενέργεια Fermi έχουμε από την σχέση $C_V = \gamma T$ ότι

$$\gamma = \frac{\pi^2}{2} Z R \frac{k_B}{\varepsilon_F}$$

$$= \frac{\pi^2}{2} R \frac{Z}{T_F}$$

$$\boxed{\gamma = 0.169\, Z \left(\frac{r_s}{a_o}\right)^2 10^{-4}\ \text{cal mole}^{-1}\,\text{K}^{-2}}\ . \qquad (6.92)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ:

Σε σύγκριση με το κλασσικό αέριο το κβαντικό αέριο Fermi σε αρκετά χαμηλές θερμοκρασίες T έχει υψηλή κινητική ενέργεια, υψηλή πίεση και μικρή θερμοχωρητικότητα. Οι μονοσωματιακές καταστάσεις για T = 0K γεμίζουν μέχρι την υψηλότερη τιμή

$$\boxed{\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3}}\,, \tag{6.93}$$

που είναι η ενέργεια Fermi στην περίπτωση φερμιονίων σπιν 1/2. Η ολική ενέργεια του αερίου για T = 0K είναι

$$\boxed{E(0) = \frac{3}{5}\, N\, \varepsilon_F} \tag{6.94}$$

και η πυκνότητα των μονοσωματιακών καταστάσεων στην ενέργεια Fermi ε_F

$$\boxed{\varrho(\varepsilon_F) = \frac{3N}{2\varepsilon_F}}\,. \tag{6.95}$$

Η θερμοχωρητικότητα του εκφυλισμένου ($T << T_F$) ηλεκτρονικού αερίου προκύπτει γραμμική ως προς τη θερμοκρασία T

$$\boxed{C_V = \frac{\pi^2}{3}\,\varrho(\varepsilon_F)\,T}\,. \tag{6.96}$$

Γιά το ηλεκτρονικό αέριο οι συνηθισμένες θερμοκρασίες T παραμένουν πολύ μικρές σε σχέση με την θερμοκρασία Fermi (π.χ. $T \sim 0.01\, T_F$) ώστε η περιγραφή του εκφυλισμένου αερίου Fermi ισχύει ακόμη και για μεγάλες T (π.χ. $T_{\delta\omega\mu.}$).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ:

1. Γιατί στα περισσότερα μέταλλα σε θερμοκρασία δωματίου ($T_{δωμ.} \approx 300K$) το χημικό δυναμικό μ είναι περίπου ίσο με την ενέργεια Fermi $\varepsilon_F = \mu(0)$;

2. Πώς μεταβάλλεται η ενέργεια Fermi του ηλεκτρονικού αερίου με την συγκέντρωση των ηλεκτρονίων N/ L^d στον d-διάστατο χώρο; Στις δύο διαστάσεις;

3. Η ηλεκτρονική θερμοχωρητικότητα σε θερμοκρασία $T \approx T_{δωμ} = 300K$ διαφέρει σημαντικά από την τιμή που δίνει η κλασσική στατιστική. Που οφείλεται η διαφορά και πώς επιλύει το πρόβλημα η κβαντική στατιστική FD ;

4. Να ορίσετε τον στοιχειώδη αριθμό μονοσωματιακών καταστάσεων $dN(\varepsilon)$ και τον αριθμό σωματίων $dN(\varepsilon)$ στο ενεργειακό διάστημα $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$. (Προσέξτε την διαφορά μεταξύ N και N).

5. Ένα ιδανικό αέριο φερμιονίων ασκεί πίεση στους 0K; Γιατί ένα μέταλλο δεν αυτοδιαλύεται;

6. Αν στο σύμπαν ακτίνας 10^{28} cm περιέχονται 10^{80} ηλεκτρόνια ποιά είναι η ορμή Fermi ; (2×10^{-26} dyn/cm, από τον τύπο $p_F = \hbar\,(3\pi^2\, N/\, V)^{1/3}$).

7. Να δείξετε πως η ενέργεια Fermi σχετικιστικού αερίου (στο ακραίο σχετικιστικό όριο όπου $\varepsilon \approx pc$) είναι:

$$\varepsilon_F = \hbar\,\pi\,c\left(\frac{3}{\pi}\,\frac{N}{V}\right)^{1/3} ,$$

και η ολική ενέργεια για $T = 0K$ είναι

$$E(0) = \frac{3}{4}\,N\,\varepsilon_F \ .$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

8. Στις περιπτώσεις (i) ηλεκτρονίων σε μέταλλα (π.χ. για το Cu: $\frac{N}{V} = 8.5 \times 10^{22}$ ηλεκτρ. cm^{-3}), (ii)λευκών νάνων ($\frac{N}{V} = 10^{30}$ ηλεκτρ. cm^{-3}) και (iii) νουκλεονίων πυρηνικής ύλης ($\frac{N}{V} = 10^{39}$ ηλεκτρ. cm^{-3}). Ποιές είναι οι αντίστοιχες ενέργειες Fermi;(7 eV, 300 000 eV, 27 MeV) οι θερμοκρασίες Fermi; (82 000K, 3 δις K, 0.3 τρις K). Ποιές είναι οι αντίστοιχες πιέσεις; Σημειώστε τις εξωφρενικά μεγάλες τιμές στα παραπάνω μεγέθη.

9. Στην περίπτωση ηλεκτρονίων στο Li: $\frac{N}{V} = 4.6 \times 10^{22}$ ηλεκτρ. cm^{-3} . Να υπολογίσετε την ε_F και την T_F .

ΑΣΚΗΣΕΙΣ :

1. Να υπολογισθεί το χημικό δυναμικό $\mu(T)$ στην περίπτωση της στατιστικής FD για $d = 2$ διαστάσεις και σωμάτια με σπιν $s = 1/2$.

Λύση:

Ο αριθμός των καταστάσεων σωματίων που κινούνται στη διδιάστατη επιφάνεια εμβαδού L^3 με ενέργεια $\leq \varepsilon$ δίνεται από τον τύπο

$$N(\varepsilon) = (2s+1)\frac{L^2\pi(2m\varepsilon)}{\hbar^2}$$

$$= (2s+1)\frac{L^2\pi(2m\varepsilon)}{4\pi^2\hbar^2}$$

$$= L^2\frac{m}{\pi\hbar^2}\cdot\varepsilon,$$

όπου πολλαπλασιάσαμε επί τον εκφυλισμό $(2s+1) = 2$ λόγω σπιν. Η πυκνότητα καταστάσεων είναι

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{L^2m}{\pi\hbar^2},$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ενώ ο αντίστοιχος στοιχειώδης αριθμός σωματίων στο ενεργειακό διάστημα [ε, ε + dε] είναι

$$dN(\varepsilon) = \langle n(\varepsilon)\rangle \rho(\varepsilon)\, d\varepsilon,$$

με $\langle n(\varepsilon)\rangle = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$ στην στατιστική FD (εξ. 6.1).

Το χημικό δυναμικό μ(T) θα υπολογισθεί από την απαίτηση σταθερού συνολικού αριθμού σωματίων N μέσω της σχέσης

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \langle n(\varepsilon)\rangle \rho(\varepsilon)$$

$$= \int_0^\infty d\varepsilon \ \frac{L^2 m}{\pi\hbar^2} \ \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} = \frac{L^2 m}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{dx}{\beta} \ \frac{1}{e^{x-\beta\mu}+1}$$

$$= L^2 \left(\frac{mk_BT}{\pi\hbar^2}\right) \int_0^\infty \frac{dx}{\beta} \ \frac{1}{e^{x-\beta\mu}+1}$$

$$\int_0^\infty \frac{dx}{\lambda e^x + 1} = ?, \qquad \lambda = e^{-\beta\mu}$$

$$= [x - \ln(1+\lambda e^x)]_0^\infty$$

$$= [x - \ln(1+\lambda e^x)]_{x=\infty} + \ln(1+\lambda)$$

$$= \ln(1+\lambda) + [\ln e^x - \ln(1+\lambda e^x)]_{x=\infty}$$

$$= \ln(1+\lambda) + \ln \frac{e^x}{1+\lambda e^x}\Big|_{x=\infty}$$

$$= \ln(1+\lambda) - \ln\lambda \ .$$

Άρα,

$$N = \frac{L^2 m k_B T}{\pi\hbar^2} [\ln(1+e^{-\beta\mu}) - \ln(e^{-\beta\mu})]$$

$$\Leftrightarrow \quad N = \frac{L^2 m k_B T}{\pi\hbar^2} \left[\ln\left(\frac{1+e^{-\beta\mu}}{e^{-\beta\mu}}\right)\right]$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\Leftrightarrow \quad N = \frac{L^2 m k_B T}{\pi \hbar^2} \left[\ln \left(e^{\beta\mu} + 1 \right) \right]$$

$$\Leftrightarrow \quad e^{\beta\mu} = \exp \left[\frac{N}{L^2} \frac{\pi \hbar^2}{m k_B T} \right] - 1$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{\mu_{FD}(T) = k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{N}{L^2} \frac{\pi \hbar^2}{m k_B T} \right) - 1 \right]}$$

$$T \to \infty : \ \mu_{MB} = k_B T \ln \left(\frac{N}{L^2} \frac{\pi \hbar^2}{m k_B T} \right) < 0 \ (\text{γιατί;}) , \quad e^x \approx 1 + x$$

$$T \to 0 : \ \mu = k_B T \frac{N}{L^2} \frac{\pi \hbar^2}{m k_B T} = \frac{N}{L^2} \frac{\pi \hbar^2}{m} > 0 , \quad \mu(0) = \varepsilon_F ,.$$

Το ερώτημα, που τέμνει τον άξονα των T η καμπύλη μ(T), απαντάται από την σχέση

$$\exp \left(\frac{N}{L^2} \frac{\pi \hbar^2}{m k_B T_0} \right) - 1 = 1 \ \Rightarrow \ \boxed{k_B T_0 = \frac{N}{L^2} \frac{\pi \hbar^2}{m \ln 2}} .$$

Η T_0 αντιστοιχεί στην θερμοκρασία εκφυλισμού του αερίου.

2. (i). Να δώσετε τις συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται ώστε ένα σύστημα σωματίων να περιγράφεται από τις συναρτήσεις κατανομής <n(ε)> στις στατιστικές MB και FD.

(ii). Να περιγράψετε τα βασικά βήματα στην λήψη της συνάρτησης κατανομής FD (εξ. 6.1).

(iii). Ένα ελεύθερο ηλεκτρονικό αέριο αποτελείται από N ηλεκτρόνια σε όγκο V. Να βρείτε τις εκφράσεις για την ολική κινητική του ενέργεια E(0) στο απόλυτο μηδέν, τη σχέση μεταξύ πίεσης και ενέργειας και το μέτρο συμπιεστότητας $B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T^{-1}$.

(iv). Αν υποθέσετε πως τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας του Cu μπορεί να θεωρηθούν ως ελεύθερα ηλεκτρόνια με πυκνότητα

$$\frac{N}{V} = 8.5 \ \text{x} \ 10^{22} \ \text{ηλεκτρ.} \ \text{cm}^{-3}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

να εκτιμήσετε την ηλεκτρονική συνεισφορά στο B. Να συγκρίνετε το αποτέλεσμά σας με την παρατηρηθείσα (πειραματικά) τιμή 1.45 x 10^{12} dyn cm^{-2}.

3. Να επιλυθεί το πρόβλημα των φερμιονίων που αποτελούν μια (διδιάστατη) τηγανίτα εμβαδού $L^2 = A$:

(i). Να λύσετε την εξίσωση Schröndiger

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V(x,y)\right\}\phi(x,y) = \varepsilon\,\phi(x,y)$$

όταν $V(x,y) = 0$, για $0 \le x,y \le L$ και άπειρο για $x,y > L$ ή $x,y < 0$, σε οριακές συνθήκες "σκληρού τοίχου".

(ii). Να εκτιμήσετε (σε erg) την ενεργειακή διαφορά των δύο χαμηλότερων ενεργειακών σταθμών όταν (α) $L=10^2$ cm και (β) $L=1\text{Å} = 10^{-8}$ cm. Σε ποιά από τις δύο περιπτώσεις διακιολογείται (και από φυσική άποψη) η "οιονεί κλασσική προσέγγιση"; Να δώσετε τις εκφράσεις για τη συνάρτηση επιμερισμού του ενός σωματίου z όταν το σπιν είναι $s = 1/2$ και της μέσης ενέργειας $\langle\varepsilon\rangle$.

(iii). Με χρήση των αποτελεσμάτων της Ασκ. 1 για την $\rho(\varepsilon)$ και το $\mu(T)$ να ορίσετε και να υπολογίσετε την ενέργεια Fermi ε_F συναρτήσει του N και της $\rho(\varepsilon_F)$. Επίσης να δώσετε τις αντίστοιχες εκφράσεις συναρτήσει της ακτίνας r_s που αναλογεί από το μοίρασμα του εμβαδού A στο κάθε ηλεκτρόνιο. Ποιά είναι η ολική ενέργεια των ηλεκτρονίων για $T = 0K$ (συναρτήσει των N και ε_F) και πώς συγκρίνεται με την αναμενόμενη κλασσική τιμή της;

(iv). Να ορίσετε μέσω της z την κβαντική επιφάνεια A_Q στο όριο της οιονεί-κλασσικής προσέγγισης και να υπολογίσετε το χημικό δυναμικό ώστε να βρείτε την εντροπία S. Περιέχεται η κβαντική σταθερά $\hbar$ στον τελικό τύπο για την S; (πώς και γιατί)

(v). Να υπολογίσετε την πίεση P που ασκείται στα άκρα ώστε να λάβουμε μια σχέση μεταξύ των P, $A=L^2$ και E. Ποιά είναι η αντίστοιχη σχέση στις τρεις διαστάσεις;

(vi). Αν η τηγανίτα εμβαδού A αποτελείται από ηλεκτρόνια που προέρχονται από τα άτομα (2 από κάθε άτομο) ενώ η επιφανειακή πυκνότητα μάζας είναι 6 x 10^{-8} gr/cm^2 και το ατομικό βάρος M=36 gr να υπολογίσετε την ε_F.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Λύση:

(i). $\phi(x,y) = X(x)\,Y(y)$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}X(x) &= \varepsilon_x X(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}Y(y) &= \varepsilon_y Y(y) \end{aligned}\right\} \quad \Leftrightarrow$$

$$\ddot{X}(x) + k_x^2 X(x) = 0$$

$$\ddot{Y}(y) + k_y^2 Y(y) = 0 \qquad \text{με} \quad \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} = k_x^2 + k_y^2 = k^2 \,.$$

Η λύση της $\ddot{X}(x) + k_x^2 X(x) = 0$

$\Leftrightarrow \quad X(x) = A\sin(k_x x) + B\cos(k_x x)$

με οριακές συνθήκες "σκληρού τοίχου"

$$X(x) = 0 = B \;\Leftrightarrow\; B = 0$$

$$X(L) = A\sin(k_x L) = 0 \;\Leftrightarrow\; k_x L = n_x \pi, \quad n_x = 1, 2, \ldots$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{\phi(x,y) = A\sin\left(n_x \frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(n_y \frac{\pi y}{L}\right)}$$

και

$$\boxed{\varepsilon_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(n_x^2 + n_y^2)} \quad , \quad n_x, n_y = 1, 2, \ldots$$

(ii). $\varepsilon_{21} = \varepsilon_{12} = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\,(1+4) = \dfrac{5}{2}\,\dfrac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}$ = πρώτη διηγημένη (διπλά εκφυλισμένη) στάθμη και $\varepsilon_{11} = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\cdot 2 = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ = η θεμελιώδης (βασική) στάθμη. Έχουμε

$$\Delta = \varepsilon_{21} - \varepsilon_{11} = \frac{3}{2}\,\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2} \;,$$

και

(α) $\quad L = 100\,\text{cm} \;\Leftrightarrow\; \Delta = \dfrac{3}{8}\,\dfrac{10^{-54}\times 36}{10^{-27}\times 10^{4}} = \dfrac{108}{8}\times 10^{-31}\,\text{erg}$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

(β) $L = 10^{-8}$ cm $\Leftrightarrow \Delta = \frac{3}{8}\frac{10^{-54} \times 36}{10^{-27} \times 10^{-16}} = \frac{108}{8} \times 10^{-11}$ erg ,

ενώ $k_B T_{δωμ} \approx \frac{1}{40}$ eV $\approx 4 \times 10^{-14}$ erg ώστε: (α) $k_B T >> \Delta$ και (β) $k_B T < \Delta$.

Επομένως, η οιονεί-κλασσική προσέγγιση δικαιολογείται μόνο στην περίπτωση του σωματίου σε μακροσκοπικό κουτί και όχι στην περίπτωση σωματίου στην περιοχή διαστάσεων του ατόμου σε ένα υλικό (≈ 1Å).

Στην οιονεί-κλασσική προσέγγιση

$$z = 2\sum_r e^{-\beta\varepsilon_r} = 2\sum_{n_x=1}^{\infty}\sum_{n_y=1}^{\infty} \exp[-\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2)]$$

$$= 2\left(\sum_{n_x=1}^{\infty} \exp[-\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2k_BT}\cdot n_x^2\right)\left(\sum_{n_y=1}^{\infty} \exp[-\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2k_BT}\cdot n_y^2\right)$$

το φάσμα των $\varepsilon_r (= \varepsilon_{n_x,n_y})$ είναι σχεδόν συνεχές, άρα

$$\sum_n e^{-an^2} = \int_0^{\infty} e^{-an^2}\,dn = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\Leftrightarrow \quad z = 2\sqrt{\frac{\pi\, 2mL^2k_BT}{\hbar^2\pi^2}}\sqrt{\frac{\pi\, 2mL^2k_BT}{\hbar^2\pi^2}}\cdot\frac{1}{4}$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{z = 2\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\cdot L^2} = \frac{L^2}{L_Q^2} \text{ με } L_Q^2 = \frac{\pi\hbar^2}{mk_BT}$$ την κβαντική επιφάνεια.

Υπολογίζεται εύκολα η μέση τιμή

$$\langle\varepsilon\rangle = -\frac{\partial \ln z}{\partial\beta} = k_BT^2\frac{\partial \ln z}{\partial T} = k_BT^2\frac{\partial}{\partial T}\{\ln(\sigma\tau\alpha\theta.) + \ln T\} = k_BT$$

ή

$$\boxed{\langle\varepsilon\rangle = k_BT}\ .$$

(iii). $N = 2\frac{A(\pi k_F^2)}{(2\pi)^2} = 2\frac{\pi k_F^2}{4\pi^2}A$

$$\Rightarrow \boxed{k_F = \sqrt{\frac{2\pi N}{A}}}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \Leftrightarrow \boxed{\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 \pi}{m}\frac{N}{A} = \mu(0)}$$

και

$$\boxed{\varepsilon_F = \frac{N}{\varrho(\varepsilon_F)}} .$$

Από το μοίρασμα της "τηγανίτας" αντιστοιχεί εμβαδόν $\frac{A}{N} = \pi r_s^2$ ανά ηλεκτρόνιο και

$$\boxed{k_F = \frac{\sqrt{2}}{r_s}} \qquad \boxed{\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{m r_s^2}} .$$

Για $T \equiv 0K$: $E(0) = \int_0^{\varepsilon_F} \varrho(\varepsilon) \frac{\varepsilon\, d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu(0))}+1}$

$$= \int_0^{\varepsilon_F} \varrho(\varepsilon)\, \varepsilon\, d\varepsilon \quad ,$$

αφού $\langle n(\varepsilon)\rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu(0))}+1} = 1$ για $\varepsilon < \varepsilon_F$. Άρα, για την ολική ενέργεια

$$\Leftrightarrow \qquad \boxed{\underset{\text{ΚΒΑΝΤ}}{E(0)} = \frac{Am}{2\pi\hbar^2}\varepsilon_F^2 = \frac{N}{2}\varepsilon_F}$$

ενώ

$$\boxed{\underset{\text{ΚΛΑΣΣ}}{E(0)} = 2N\frac{k_B T}{2} = 0} .$$

(iv). $z = \frac{A}{L_Q^2}$, $L_Q^2 = \frac{\pi\hbar^2}{m k_B T}$ και δείξαμε ήδη ότι στο όριο της οιονεί-κλασσικής προσέγγισης $\beta\mu = \ln\left(\frac{N}{L^2}L_Q^2\right)$

$$\Leftrightarrow e^{\beta\mu} = \frac{N}{A}L_Q^2 .$$

Το χημικό δυναμικό στο ίδιο όριο υπολογίζεται από την $\langle n_r\rangle_{MB} = e^{-\beta(\varepsilon_r-\mu)}$ που ισχύει ($\beta\mu \to -\infty$ ή $e^{\beta\mu} \ll 1$ μέσω του

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$N = \sum_r e^{\beta\mu} e^{-\beta\varepsilon_r} = e^{\beta\mu} z \Rightarrow e^{\beta\mu} = \frac{N}{z} \Rightarrow \boxed{e^{\beta\mu} = \frac{N}{A} L_Q^2} .$$

Η ελεύθερη ενέργεια και η εντροπία υπολογίζονται

$$F = -N k_B T + N k_B T \left(\frac{N}{A} L_Q^2 \right), \text{ αφού } F = \Omega + \mu N = -N k_B T + \mu N$$

$$\Leftrightarrow S = -\frac{\partial F}{\partial T}\Big|_{A,N} = Nk_B - Nk_B \ln\left(\frac{N}{A} L_Q^2 \right) - Nk_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln\left(\frac{N}{A} L_Q^2 \right) .$$

Ισχύει

$$\frac{\partial}{\partial T} \ln\left(\frac{N}{A} \frac{\pi \hbar^2}{m k_B T} \right) = -\frac{1}{T^2}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{S = N k_B \left\{ 2 - \ln\left(\frac{N}{A} L_Q^2 \right) \right\}}, \text{ που είναι η εξίσωση Sackur-Tetrode για d} = 2.$$

Η εντροπία S περιέχει την κβαντική σταθερά ħ μέσω της L_Q^2 (εξ' άλλου ο ορισμός της S προϋποθέτει βασικές στάθμες!)

(v). $E(0) = \frac{N}{2} \varepsilon_F$ και $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 \pi}{mA} N$,

άρα $P = -\frac{\partial E}{\partial A} = \frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{2mA^2} = \frac{E}{A} \Leftrightarrow \boxed{PA = E}$.

Στις τρεις διαστάσεις είναι, βέβαια, γνωστή η γενικής ισχύος σχέση

$$\boxed{P \cdot V = \frac{2}{3} E} .$$

(vi). Με την σχέση $\frac{N}{A} = N_A \cdot Z \cdot \frac{\varrho_m}{Z}$, όπου $\varrho_m = 6 \times 10^{-8}$ gr/cm^2, M = 36 gr, Z = 2 και $N_A = 6 \times 10^{23}$ έπεται ότι $\frac{N}{A} = 2 \times 10^{15}$ cm^{-2} και $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 \pi}{mA} N \approx \frac{72}{12,6} \times 10^{-12}$ erg $\approx$ 3.6 eV.

4. Η μέση ενέργεια ανά σωμάτιο για το αέριο Fermi σε θερμοκρασία $T \ll T_F$ (εκφυλισμένο αέριο Fermi) δίνεται από το ανάπτυγμα

$$\frac{3}{5} \varepsilon_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right), \quad T \ll T_F.$$

Να υπολογίσετε την ειδική θερμότητα και να εξηγήσετε που οφείλονται οι δύο όροι AT^3 και γT για τον χαλκό (Cu) σε χαμηλές θερμοκρασίες T.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

5. Πώς υπολογίζεται, έστω δυνητικά, το χημικό δυναμικό μ(Τ) στην κατανομή FD; Να υπολογίσετε το μ(0) και το μ(Τ) (για Τ=0.989 T_F) όπου $T_F = \mu(0)/k_B$ για σύστημα Ν σωματίων μάζας m, σπιν 1/2 σε όγκο V.

6. Να δείξετε ότι η θερμοχωρητικότητα στο τρισδιάστατο αέριο Fermi είναι

$$C_V = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} \quad ,$$

με βάση το ανάπτυγμα του ολοκληρώματος Fermi (ΠΑΡΑΡΤ. Α)

$$\int_0^\infty \frac{x^n\, dx}{e^{x-\beta\mu}+1} \approx \frac{(\beta\mu)^{n+1}}{n+1}\left[1 + \frac{\pi^2}{6} n\,(n+1)\,(\beta\mu)^{-2} + \ldots\right], \quad \beta\mu \gg 1 \quad ,$$

στον υπολογισμό της ενέργειας Ε(Τ). Με το ίδιο ανάπτυγμα για n =1/2 να υπολογίσετε το χημικό δυναμικό μ(Τ).

(**Απάντηση:** $\mu(T) = \varepsilon_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right]$)

7. Να βρείτε τον αριθμό των ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου που καταλαμβάνουν μια ενεργειακή περιοχή εύρους 0.5 eV κάτω από την ε_F στην περίπτωση του μεταλλικού Na στους 0K. (M=23 gr, ρ_m=0.97 gr cm^{-3}).

Λύση:

$$dN = \rho(\varepsilon)\langle n(\varepsilon)\rangle\, d\varepsilon \quad , \qquad \langle n(\varepsilon)\rangle = 1, \quad \text{όπου } \varepsilon < \varepsilon_F,$$

$$= 2\,\frac{2V}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}\, d\varepsilon, \qquad \text{όπου } 2s+1 = 2.$$

Επομένως, ο αριθμός των ηλεκτρονίων μεταξύ $\varepsilon_F - \varepsilon$ και ε_F, με $\varepsilon = 0.5$ είναι

$$N' = \frac{4V}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \int_{\varepsilon_F - 0.5}^{\varepsilon_F} \varepsilon^{1/2}\, d\varepsilon$$

$$= \frac{4V}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \left[\varepsilon_F^{3/2} - (\varepsilon_F - 0.5)^{3/2}\right].$$

Με τα δεδομένα του προβλήματος

$$\frac{N'}{V} = 5.8 \times 10^{27}\ cm^{-3}$$

ενώ για όλο το διάστημα είναι η πυκνότητα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\frac{N}{V} = 2.54 \times 10^{22}\ \text{cm}^{-2}.$$

8. Να βρείτε τη σχέση που συνδέει την πίεση P και τον όγκο V αερίου Fermi με την ενέργεια E στο απόλυτο μηδέν. Ποιό είναι το μέτρο ελαστικότητας B $= -V\frac{\partial P}{\partial V}$ συναρτήσει του E/ V.

(**Απάντηση:** $PV = \frac{2}{3}E$ και $B = \frac{10}{9}\left(\frac{E}{V}\right)$).

9. Να δείξετε ότι στην περίπτωση της στατιστικής MB με

$$\langle n(\varepsilon)\rangle = e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} << 1$$

η ακτίνα r_s μιας σφαίρας όγκου ίσου με τον όγκο που αντιστοιχεί σε κάθε ηλεκτρόνιο αγωγιμότητας είναι

$$r_s = e^{-\beta\mu/3}\, 3^{1/3}\, \pi^{1/6}\left(\frac{2mk_BT}{\hbar^2}\right)^{-1/2},$$

ώστε η συνθήκη $\langle n(\varepsilon)\rangle << 1$ γίνεται

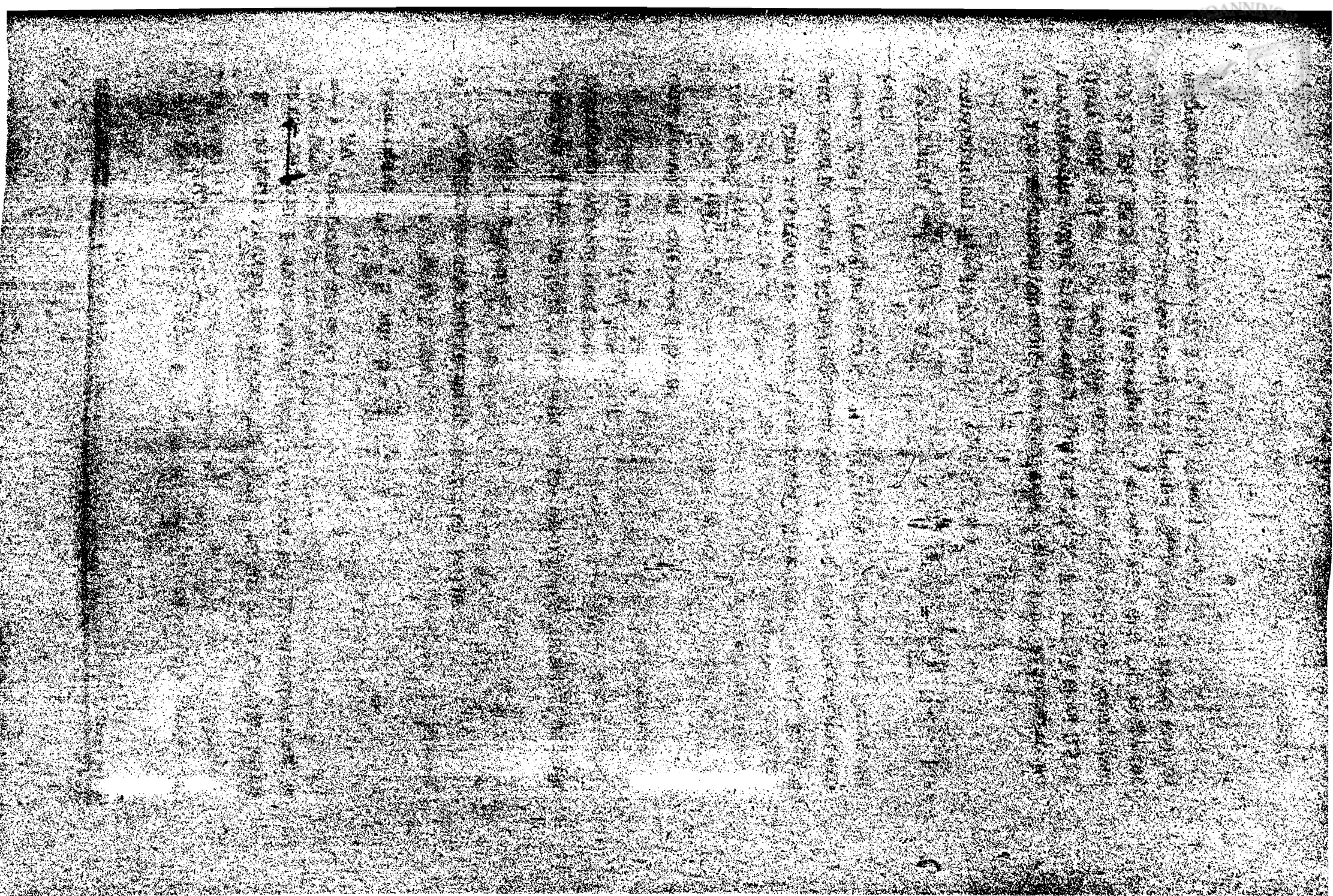
$$r_s >> \left(\frac{mk_BT}{\hbar^2}\right)^{-1/2}.$$

10. Στην περίπτωση του καλίου η καμπύλη C_V/T ως προς T^2 δίνει (Σχ. 6.9) μια ευθεία με κλίση 2.57 mJ/ (γραμμομόριο K^4) που τέμνει τον y άξονα στο σημείο 2.08 mJ/ (γραμμομόριο K^2). Ποιές είναι οι θερμοκρασίες Debye και Fermi;

(**Απάντηση:** $C_V/T = \gamma + AT^2$, $\gamma = \frac{\pi^2}{2T_F} N k_B$ και $A = \frac{12\pi^4}{3\Theta_D{}^3} N k_B$. Με αντικατάσταση : $T_F = 19.72 \times 10^3$ K, $\Theta_D = 91.1$ K).

11. Στην περίπτωση του αερίου των ελεύθερων ηλεκτρονίων τα δεδομένα για την πυκνότητα μάζας στα βασικά μέταλλα Li, Na, K, Rb και Cs είναι 0.534, 0.971, 0.86, 1.53 και 1.87 ενώ οι αντίστοιχες τιμές για το ατομικό βάρος είναι 6.9, 23, 39.1, 85.5, 132.9. (**Απάντηση:** Οι αντίστοιχες τιμές της ενέργειας Fermi που υπολογίζονται είναι 5.22, 3.15, 2.05, 1.78 και 1.59 eV ενώ οι πειραματικές τιμές είναι 4.72, 3.12, 2.14,1.82 και 1.59 eV).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7

ΤΟ ΑΕΡΙΟ BOSE

7.1 Συμπύκνωση Bose-Einstein ($\beta\mu \to 0$)

7.2 Θερμοδυναμικές ποσότητες

7.3 Φωτόνια και φωνόνια

7.4 Ακτινοβολία μέλανος σώματος (φωτονικό αέριο)

7.5 Μιά πολύ μικρή επίσκεψη στο φωνονικό αέριο.

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ-ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ-ΑΣΚΗΣΕΙΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΤΟ ΑΕΡΙΟ BOSE

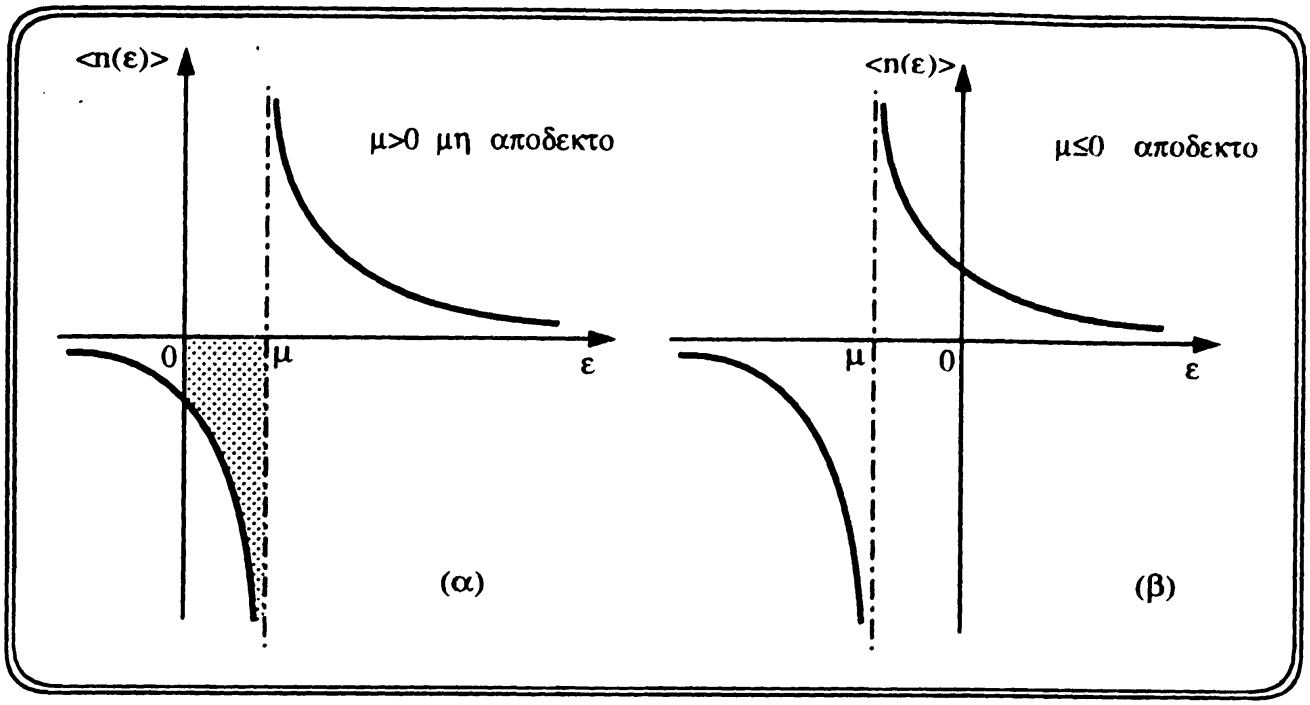
7.1. Συμπύκνωση Bose-Einstein ($\beta\mu \rightarrow 0$)

Οι ιδιότητες του αερίου των μποζονίων διαφέρουν κατά πολύ από αυτές του αερίου φερμιονίων. Δεν υπάρχει για τα μποζόνια κανένας περιορισμός στην κατάληψη των μονοσωματιακών καταστάσεων (η αρχή του Pauli παύει να ισχύει) και για χαμηλές θερμοκρασίες η βασική μονοσωματιακή κατάσταση μπορεί να έχει μακροσκοπικό αριθμό κατάληψης, στα πλαίσια μιάς μετάβασης φάσης γνωστής ως "συμπύκνωση Bose-Einstein". Τα φαινόμενα της υπερρευστότητας του ^{4}He και της υπεραγωγιμότητας στην γνωστή θεωρία BCS, ερμηνεύονται με βάση αυτήν την μετάβαση φάσης που επιδέχεται, μάλιστα, μια ακριβή λύση*. Στην υπερρευστότητα σε ιδιαίτερα χαμηλές θερμοκρασίες, κάτω από 2.19K, η κίνηση του υγρού ^{4}He σε ένα στενό κύλινδρο χαρακτηρίζεται από την ολική απουσία ιξώδους. Με άλλα λόγια η ροή γίνεται χωρίς οποιοδήποτε είδος τριβών από τα τοιχώματα. Αυτό συμβαίνει επειδή τα μποζόνια, από μια θερμοκρασία και κάτω, συγκεντρώνονται σε μια μόνο κατάσταση που χαρακτηρίζεται από μια συγκεκριμένη ορμή και κινούνται πλέον σαν ένα σύνολο, ενώ η παρουσία ιξώδους θα απαιτούσε διαφορετικές περιοχές του υγρού να ταξιδεύουν με διαφορετικές ταχύτητες. Αντίθετα με το ^{4}He τα άτομα του ^{3}He είναι φερμιόνια και με ψύξη κάτω από 2K το φαινόμενο δεν παρατηρείται. Όμως, μόλις το 1974, διαπιστώθηκε πως κάτω από τους 0.0027K (ή 2.7mK) και το ^{3}He γίνεται υπέρρευστο! Αυτό συμβαίνει επειδή στις πολύ χαμηλές αυτές θερμοκρασίες τά άτομα του ^{3}He ζευγαρώνουν και τα ζεύγη (με άρτιο σπιν) συμπεριφέρονται πλέον σαν μποζόνια. Ένα άλλο περίεργο φαινόμενο είναι αυτό της υπεραγωγιμότητας των μετάλλων (όπου κοντά στο απόλυτο μηδέν η ροή του ρεύματος γίνεται με μηδενική αντίσταση). Στην υπεραγωγιμότητα τα μποζόνια αποτελούνται από ζεύγη ηλεκτρονίων και για θερμοκρασία μικρότερη από μια κρίσιμη τιμή η αντίσταση του υλικού πέφτει στο μηδέν !

* Το ^{4}He έχει άρτιο αριθμό ηλεκτρονίων και αποτελεί σύστημα μποζονίων ενώ το ^{3}He σύστημα φερμιονίων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Που οφείλονται, όμως, οι σημαντικές αυτές διαφορές στην περίπτωση των μποζονίων; Ο μέσος αριθμός κατάληψης για τα μποζόνια είναι



Σχ.7.1. Ο μέσος αριθμός κατάληψης μποζονίων <n(ε)> συναρτήσει του θετικού μονοσωματιακού ενεργειακού φάσματος ε για δύο περιπτώσεις: **(α).** $\mu > 0$ που οδηγεί σε αρνητικές μη αποδεκτές τιμές στο γραμμοσκιασμένο διάστημα και **(β).** $\mu \leq 0$ που είναι οι αποδεκτές τιμές.

$$<n(\varepsilon)> = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad . \tag{7.1}$$

και διαφέρει, σε σχέση με την αντίστοιχη έκφραση για τα φερμιόνια, μόνο στο πρόσημο του 1 στον παρονομαστή. Όμως θα δούμε πως η μικρή αυτή διαφορά μπορεί να έχει δραματικές συνέπειες στον μέσο αριθμό σωματίων. Για μποζόνια μάζας m με ακέραιο σπιν s και πυκνότητα καταστάσεων ρ(ε) περιέχονται σε κύβο όγκου V. Ο ολικός αριθμός σωματίων δίνεται από την σχέση

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$N = \sum_r \langle n_r \rangle$$

$$= \frac{2V(2s+1)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \, \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad . \tag{7.2}$$

Από το Σχ. 7.1 για $T \to 0$ η περίπτωση $\varepsilon_r - \mu < 0$ που οδηγεί στην σχέση $\mu > 0$ (αφού υπάρχουν μόνο θετικής ενέργειας μονοσωματιακές καταστάσεις και η χαμηλότερη μονοσωματιακή στάθμη είναι 0) δεν είναι αποδεκτή, επειδή ο μέσος αριθμός κατάληψης $\langle n \rangle$ παίρνει και αρνητικές τιμές. Γιά να είναι ο $\langle n_r \rangle$ θετικός ($\langle n_r \rangle \geq 0$) πρέπει $\varepsilon_r - \mu \geq 0$ ή $\mu \leq 0$. Άρα, το χημικό δυναμικό είναι πάντα αρνητικό ή μηδέν ($\mu \leq 0$) ενώ το γινόμενο βμ δεν παίρνει, προφανώς, ποτέ θετικές τιμές και ισχύει πάντα στην περίπτωση των μποζονίων η ανισότητα $\beta\mu \leq 0$ που οδηγεί στην $e^{-\beta\mu} \geq 1$.

Με την αλλαγή μεταβλητών $x = \beta\varepsilon$ η έκφραση για την πυκνότητα μποζονίων είναι συναρτήσει του βμ

$$\frac{N}{V} = \frac{2(2s+1)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{1/2}}{e^{x-\beta\mu} - 1} \quad . \tag{7.3}$$

Το ολοκλήρωμα στο δεξιό μέλος της εξ. (7.3) μικραίνει και επομένως η πυκνότητα $\frac{N}{V}$ μειώνεται όσο η τιμή του βμ γίνεται μεγάλη και αρνητική (προσεγγίζοντας το οιονεί-κλασσικό όριο). Είναι επίσης αρκετά εύκολο να δούμε πως οι τιμές του μεγαλώνουν στο αντίθετο κβαντικό όριο $\beta\mu \to 0$. Επομένως, η μέγιστη τιμή της πυκνότητας παρατηρείται ακριβώς για $\beta\mu = 0$ ($e^{-\beta\mu} = 1$). Μέσω της συνάρτησης Riemann ζ (ΠΑΡΑΡΤ. Α) η τιμή του ολοκληρώματος στο όριο αυτό υπολογίζεται από το γινόμενο $\zeta(3/2)\,\Gamma(3/2) = 2.612\,\sqrt{\pi}/2$ και η μέγιστη δυνατή πυκνότητα των μποζονίων είναι

$$\left(\frac{N}{V} \right)_{max} = (2s+1) \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \times 2.612$$

$$= (2s+1) \, \frac{2.612\,\pi^{3/2}}{\lambda_{DB}^3} \quad , \quad \text{με } \beta\mu = 0, \tag{7.4}$$



σαν συνάρτηση του μέσου θερμικού μήκος κύματος De Broglie λ_{DB} (εξ.2.44).

Άσκηση 1: Να υπολογισθεί το ολοκλήρωμα στην σχέση (7.3) για βμ = 0.

(**Υπόδειξη**: $\int_0^\infty dx \ \frac{x^{1/2}}{e^x - 1} = \int_0^\infty dx \ \frac{x^{1/2} e^{-x}}{1 - e^{-x}}$ και η συνέχεια στο ΠΑΡΑΡΤ.Α).

Το αποτέλεσμα της εξ. (7.4), όπου η πυκνότητα ευρέθη ανάλογη του λ_{DB}^{-3}, οδηγεί στο εξής ερώτημα : Τι θα συμβεί αν η πυκνότητα των μποζονίων $\frac{N}{V}$ είναι τέτοια ώστε να υπερβαίνει την οριακή τιμή $\left(\frac{N}{V}\right)_{max}$ που μπορεί να υπολογισθεί με τον παραπάνω τρόπο και δίνει η προηγούμενη σχέση ($\sim \lambda_{DB}^{-3}$);

Όταν η πυκνότητα των μποζονίων υπερβαίνει την οριακή τιμή της εξ. (7.4) (ή ισοδύναμα έχουμε χαμηλές Τ ή μικρό όγκο V στην εξ. 7.4) το δοχείο δεν. θα εκραγεί (!), αφού ούτε δυνάμεις υπάρχουν στο ιδανικό αέριο ούτε η αρχή του Pauli ισχύει που οδηγεί σε μεγάλες πιέσεις. Αυτό που συμβαίνει είναι το φαινόμενο της "συμπύκνωσης Bose-Einstein" (1925). Τα επιπλέον σωμάτια από την αύξηση της πυκνότητας πάνω από την μέγιστη τιμή της εξ. (7.4), που δεν μπορούν να συμπεριληφθούν πλέον στο ολοκλήρωμα της εξ. 7.4, πάνε σε μια ορισμένη ενεργειακή στάθμη. Ποιά είναι αυτή; Η χαμηλότερη μονοσωματιακή ενέργεια $\varepsilon_o \to 0$. Στο ίδιο όριο βμ = 0 ο μέσος αριθμός των μποζονίων που "πέφτουν" στην μικρότερη τιμή της ενέργειας ε_o είναι

$$<n(\varepsilon_o)> = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_o} - 1} \approx \frac{1}{1 + \beta\varepsilon_o - 1} \approx \frac{k_B T}{\varepsilon_o} = N_o, \qquad (7.5)$$

προσεγγίζοντας το ανάπτυγμα του εκθετικού στον παρονομαστή. Ο N_o είναι ένας μακροσκοπικά μεγάλος αριθμός, συγκρίσιμος με τον N, αφού $\varepsilon_o << k_B T$. Γιά $T \to 0$ από την εξ. (7.1) το χημικό δυναμικό $\mu \to \varepsilon_o$ και $N_o = N$, με αποτέλεσμα όλα τα μποζόνια να πάνε στην χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη ε_o με τον αριθμό τους να μην υπολογίζεται από το ολοκλήρωμα της εξ. (7.3). Πρέπει εξ' άλλου να θυμηθούμε πως η χρήση του ολοκληρώματος αποτελεί μια προσέγγιση που προϋποθέτει ότι το φάσμα είναι οιονεί συνεχές. Είδαμε σε προηγούμενα κεφάλαια ότι η προσέγγιση αυτή δεν ισχύει για τις χαμηλές

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

θερμοκρασίες T , αλλά στην περίπτωση των φερμιονίων με κατάληψη 0 ή 1 δεν υπήρχε πρόβλημα. Στα μποζόνια διαπιστώνεται, όμως, η αδυναμία μας να μετρήσουμε όλα τα σωμάτια με χρήση αυτής της προσέγγισης.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, αφού στο ολοκλήρωμα της εξ. (7.3) δεν υπάρχει η δυνατότητα μακροσκοπικού αριθμού κατάληψης της χαμηλότερης στάθης με $\varepsilon_o \to 0$, ο αριθμός N πρέπει να δίνεται από την προηγούμενη έκφραση από το ολοκλήρωμα (εξ. 7.4) συν τον επιπλέον όρο N_o (εξ. 7.5). Άρα,

$$N = N_o + V(2s+1)\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \times 2.612$$

$$= N_o + A\,V\,T^{3/2}, \qquad \text{για } \beta\mu = 0, \tag{7.6}$$

όπου

$$A = (2s+1)\left(\frac{mk_B}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \times 2.612. \tag{7.7}$$

Επομένως, διακρίνουμε τις εξής δύο περιπτώσεις :

$$\frac{N}{V} < \left(\frac{N}{V}\right)_{max} \Leftrightarrow N = A\,V\,T^{3/2} \qquad \text{και } \beta\mu < 0 \quad , \tag{7.8}$$

$$\frac{N}{V} > \left(\frac{N}{V}\right)_{max} \Leftrightarrow N = N_o + A\,V\,T^{3/2} \quad \text{και } \beta\mu = 0 \quad , \tag{7.9}$$

που περιγράφιυν μια μετάβασης φάσης. Όταν η πυκνότητα N/V υπερβαίνει την ποσότητα $\left(\frac{N}{V}\right)_{max} \sim \lambda_{DB}^{-3}$ ο αριθμός N_o των σωματίων στην βασική στάθμη ε_o αποτελεί ένα πεπερασμένο ποσοστό του συνολικού αριθμού των σωματίων, ενώ είναι μικρός σε σχέση με τον συνολικό αριθμό των σωματίων N, με λόγο αναλογίας που τείνει στο μηδέν για $N \to \infty$, στην κανονική περίπτωση $\frac{N}{V} < \left(\frac{N}{V}\right)_{max}$. (Υπενθυμίζουμε πως η δήλωση $N_o = 0$ και $N_o > 0$ έχει νόημα μόνο στο όριο $N \to \infty$, αφού μόνο στο θερμοδυναμικό όριο αυτό οι μεταβάσεις φάσης είναι απότομες). Επιπλέον, από την συνθήκη ισότητας

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\frac{N}{V} = \left(\frac{N}{V}\right)_{max} = A\,T^{3/2} = (2s+1)\,\frac{\pi^{3/2}}{\lambda_{DB}^3}\,2.612\,T^{3/2} \qquad (7.10)$$

ορίζεται η κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης

$$\boxed{T_B = \left(\frac{N}{V\,A}\right)^{2/3} = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{N/V}{(2s+1)\;2.612}\right)^{2/3}} \qquad (7.11)$$

Άρα, το φαινόμενο της συμπύκνωσης Bose-Einstein συμβαίνει όταν κρυώνουμε το αέριο μποζονίων σε $T < T_B$*. Με άλλα λόγια για $T < T_B$ η στάθμη ε_o επoικίζεται με πεπερασμένο ποσοστό σωματίων $\frac{N_o}{N}$ ενώ για $T > T_B$ ο λόγος $\frac{N_o}{N} \to 0$ και το φαινόμενο δεν συμβαίνει.

Άσκηση 2: Να δείξετε ότι η θερμοκρασία συμπύκνωσης Bose-Einstein μπορεί (για $s = 0$) να λάβει την μορφή $T_B = 115/(V_M^{2/3}M)$, σε Kelvin, όπου M το μοριακό βάρος (σε gr) και V_M είναι ο όγκος (σε cm^3) που αντιστοιχεί σε ένα γραμμομόριο του αερίου (προκύπτει αν διαιρέσουμε τον όγκο V με το αριθμό των γραμμομορίων N/N_A, δηλ. $V_M = VN_A/N$).

Γιά $T = T_B$ από την εξ. (7.11) ο αριθμός των σωματίων εκτός της χαμηλότερης στάθμης είναι $N = A\,V\,T_B^{3/2}$. Από την εξ. (7.9) για $T < T_B$ όπου το χημικό δυναμικό είναι $\mu = 0$ υπολογίζεται ότι το ποσοστό $1 - N_o/N$ των μποζονίων που δεν ανήκει στο συμπυκνωμένο αέριο είναι ανάλογο του $T^{3/2}$ και συναρτήσει της θερμοκρασίας συμπύκνωσης έχουμε τους εύχρηστους τύπους στο όριο του μεγάλου N

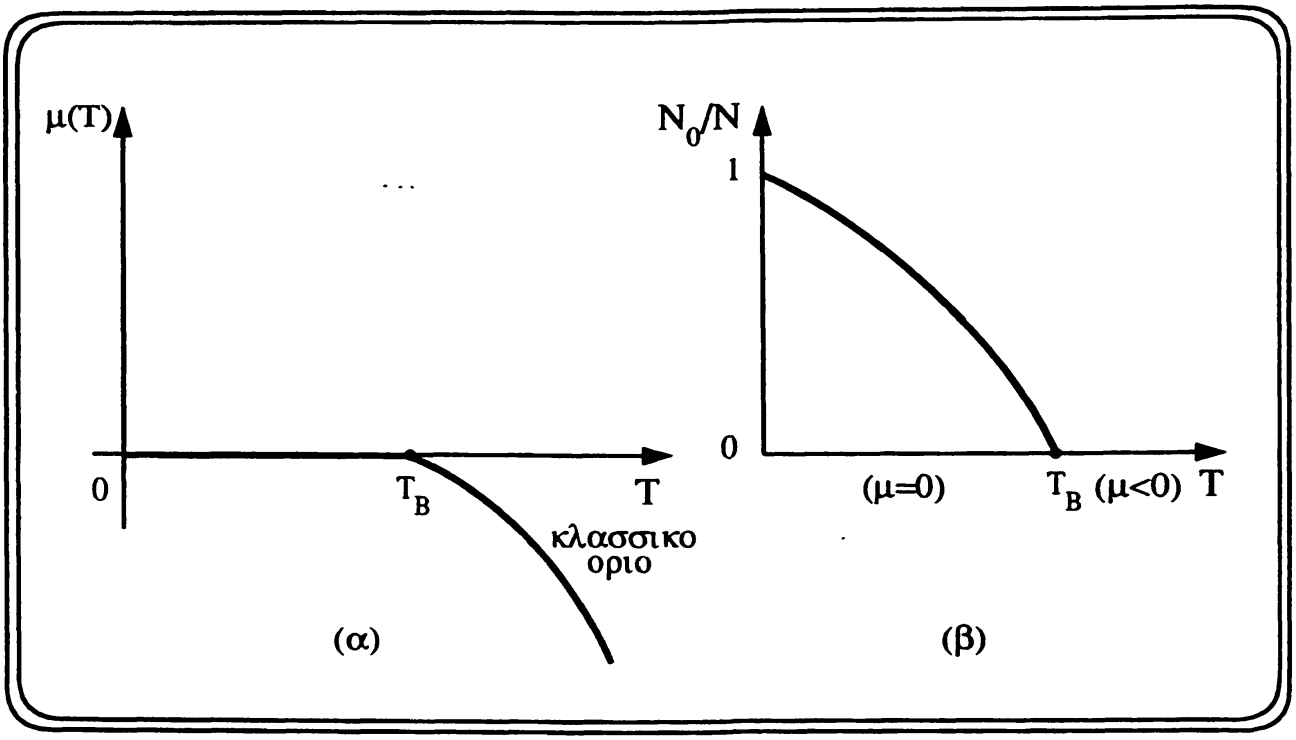
$$\boxed{\frac{N_o}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2} \quad \text{για } T < T_B} \qquad (7.12)$$

---

* Η συμπύκνωση Bose-Einstein σημαίνει ότι ένα πεπερασμένο ποσοστό του N είναι στην ε=0 και όχι συμπύκνωση των σωματίων στον χώρο.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\boxed{\frac{N_0}{N} = 0 \quad \text{για } T > T_B} \quad . \qquad (7.13)$$



Σχ.7.2. (α). Το χημικό δυναμικό μ(T) συναρτήσει της θερμοκρασίας T. Γιά $T < T_B$ είναι μηδέν ενώ για πολύ μεγάλες τιμές του T προσεγγίζει την κλασσική τιμή από την στατιστική Boltzmann. **(β).** Το ποσοστό $\frac{N_0}{N}$ των μποζονίων στην χαμηλότερη στάθμη σύμφωνα με τις εξ. (7.12) και (7.13). Γιά $T < T_B$ το $\frac{N_0}{N}$ είναι πεπερασμένος αριθμός, ενώ ακριβώς για $T = 0$ είναι μονάδα και όλα τα σωμάτια είναι στην χαμηλότερη στάθμη (πλήρης συμπύκνωση).

Το αποτέλεσμα αυτό απεικονίζεται στο Σχ. 7.2.

Παρατηρούμε πως ενώ για $T > T_B$ ο αριθμός N_0 είναι αμελητέος ($N_0 = 0$), για τιμές του T κάτω από την T_B αυξάνει ταχέως και το ιδανικό αέριο Bose, για $T < T_B$, αποτελείται από το "φυσιολογικό" υγρό με θερμική κίνηση αλλά και ένα "συμπυκνωμένο" μέρος. Γιά T = 0K υπάρχει, βέβαια, μόνο το συμπυκνωμένο μέρος. Πρέπει να αναφερθεί, επίσης, πως το συμπυκνωμένο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αέριο δεν έχει προφανώς ορμή ή ενέργεια αλλά ούτε και εντροπία ή θερμοχωρητικότητα, ενώ δεν παρατηρούνται τριβές (αφού η εσωτερική τριβή προκύπτει από συγκρούσεις μεταξύ σωματίων στην θερμική κίνηση). Επιπλέον η συμπύκνωση Bose-Einstein διαφέρει, από την συμπύκνωση ατμών μέσα σε υγρό γιατί δεν υπάρχει διαχωρισμός μέσα στον χώρο σε φάσεις με διαφορετικές ιδιότητες και η συμπύκνωση συμβαίνει στον χώρο των ορμών.

Πειραματικά έχουν παρατηρηθεί τέτοια φαινόμενα στο υπέρευστο ήλιο ^{4}He κάτω από την θερμοκρασία λάμδα $T_B = 2.2K$ (Σχ. 7.3β) όπου υπάρχει μία κίνηση από στροβίλους χωρίς τριβές. Τα ηλεκτρόνια των μετάλλων είναι φερμιόνια και επομένως δεν υπόκεινται σε συμπύκνωση Bose-Einstein. Αλλά σε ορισμένες συνθήκες* μπορούν να ελκύουν το ένα το άλλο και να αποτελέσουν ένα "ζεύγος Cooper". Τα "κουπερόνια" είναι μποζόνια και επομένως γίνονται υπέρρευστα σε χαμηλές θερμοκρασίες. Αφού όμως φέρουν ηλεκτρικά φορτία δημιουργούν την υπεραγωγιμότητα που εξηγήθηκε με την θεωρία BCS το 1957. Η παρατήρηση της υπεραγωγιμότητας έγινε από τον Omnes το 1911, όταν με την χρήση του υγρού He κατέβασε την θερμοκρασία στους 4.2K (ό άλλος τρόπος για να κατεβάσουμε τη θερμοκρασία, όχι όμως τόσο χαμηλά, είναι το υγρό άζωτο) όπου μπορεί να παρατηρηθεί το φαινόμενο. Μέχρι το 1986 οι θερμοκρασίες συμπύκνωσης στην υπεραγώγιμη κατάσταση ήταν κάτω από 25K και επομένως πολύ δύσκολο να εκμεταλλευθούμε τις φοβερές συνέπειες της κίνησης των φορέων του ρεύματος χωρίς τριβές. Όμως οι Bedhorz και Miller από την IBM Ζυρίχης ανακάλυψαν ότι η T_B είναι μέχρι και 95K για τα γνωστά ως "νέα υπεραγώγιμα υλικά υψηλής κρίσμης θερμοκρασίας". Η ανακάλυψη αυτή τους οδήγησε στην απονομή του βραβείου Nobel τον επόμενο χρόνο. Μέχρι σήμερα η αύξηση στην κρίσιμη θερμοκρασία συνεχίζεται, όμως με αργό ρυθμό, ώστε μπορούμε να πούμε πως είναι μάλλον όνειρο η επίτευξη του φαινομένου της υπεραγωγιμότητας σε θερμοκρασία δωματίου. Ένα τέτοιο ενδεχόμενο θα άλλαζε άρδην την εικόνα της σημερινής τεχνολογικής εξέλιξης.

* με μεσολάβηση του πλέγματος των βαριών ατόμων

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

7.2. Θερμοδυναμικές ποσότητες

Η μέση ενέργεια του αερίου Bose στην συμπυκνωμένη "φάση" είναι

$$E = N_o \cdot \varepsilon_o + \frac{2V(2s+1)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \, \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta\varepsilon}-1} , \qquad (7.14)$$

όπου ε_o είναι η βασική στάθμη ($\varepsilon_o = 3\hbar^2\pi^2/(2mV^{2/3})$). Η τιμή της ενέργειας ε_o συναρτήσει της θερμοκρασίας συμπύκνωσης T_B (εξ. 7.11) είναι

$$\varepsilon_o = \frac{3\pi}{4} \left(\frac{2.612\,(2s+1)}{N}\right)^{2/3} k_B T_B \qquad (7.15)$$

και, προφανώς, για μακροσκοπικό αριθμό N ισχύει $\varepsilon_o << k_B T_B$ με $\varepsilon_o \to 0$ και $\mu \to 0$. Με την αλλαγή μεταβλητών στο ολοκλήρωμα της εξ. (7.14) για $\beta\mu = 0$ και με την βοήθεια του ΠΑΡΑΡΤ. Α για τα ολοκληρώματα

$$E = N\left[1 - \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2}\right] \varepsilon_o + V \frac{2(2s+1)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} k_BT \int_0^\infty dx \, \frac{x^{3/2}}{e^x - 1}$$

$$= N\left[1 - \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2}\right] \varepsilon_o + \quad 0.7701 \; N k_B T \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2} . \qquad (7.16)$$

Η θερμοχωρητικότητα δίνεται από την σχέση

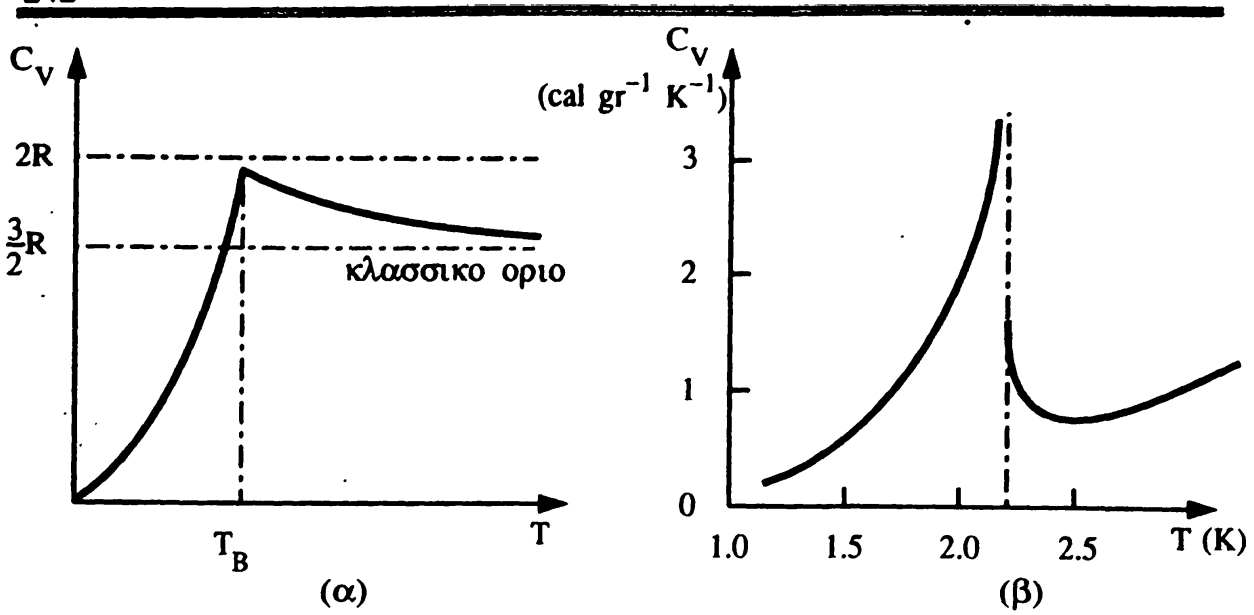
$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V}$$

$$= 1.93 \; N k_B \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2} \quad \text{για } T < T_B \; . \qquad (7.17)$$

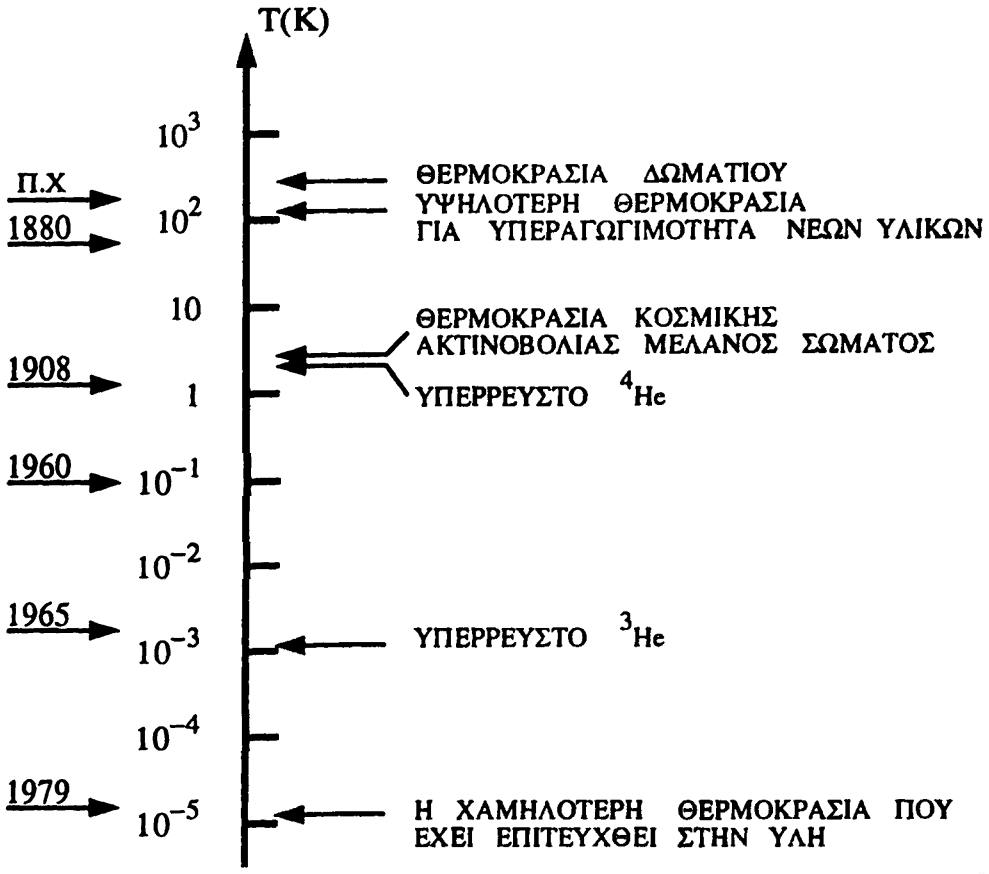
Εν γένει η γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα (είναι διαιρεμένη με τον αριθμό των γραμμομορίων N/N_A) $C_V = 1.93R \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2}$ με την σταθερά $R = N_A k_B$.

Από το Σχ. (7.3) βλέπουμε πως η C_V παρουσιάζει μια "κόψη" στην θερμοκρασία συμπύκνωσης T_B, που δεν υπάρχει στο αέριο Fermi, και σχετίζεται με την συμπύκνωση Bose-Einstein. Για μεγάλες T η C_V τείνει, όπως αναμένεται, στην κλασσική τιμή 3R/2. Για $T >> T_B$ μπορεί να υπολογισθούν, επίσης, και οι κβαντικές διορθώσεις στο κλασσικό αποτέλεσμα.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 7.3. (α). Η γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα (εξ. 7.17) στο αέριο Bose συναρτήσει της θερμοκρασίας Τ. (β). Η θερμοχωρητικότητα του υγρού ^{4}He όπου το ιξώδες μειώνεται και 1 εκατομμύριο φορές κάτω από το κρίσιμο σημείο. Λόγω του σχήματος η μετάβαση αυτή είναι γνωστή και ως "μετάβαση λάμδα".



Σχ. 7.4. Παρουσιάζονται οι χαρακτηριστικές θερμοκρασίες της στατιστικής σε λογαριθμική κλίμακα. Στα αριστερά είναι οι ημερομηνίες που αυτές ελήφθησαν για πρώτη φορά.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Παρατηρούμε ότι στην θερμοκρασία συμπύκνωσης T_B η C_V υπερβαίνει την κλασσική τιμή (3R/2) και δείχνει ένα "σπάσιμο" για $T = T_B$.

Άσκηση 1: Να υπολογισθούν για $T<T_B$ η εντροπία S και πίεση P.

(**Απάντηση**: $S = 1.284\ N k_B \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2}$ και $\frac{PV}{N k_B T} = \frac{\frac{2}{3}E}{N k_B T} = 0.5134 \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2}$).

7.3 Φωτόνια και φωνόνια

Η θερμοχωρητικότητα που προκύπτει λόγω των ταλαντώσεων δίνεται από το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας που ισχύει όταν $k_B T >> \hbar\omega$. Σε χαμηλές θερμοκρασίες-Τ όπου τον σημαντικό ρόλο διαδραματίζουν τα κβαντικά φαινόμενα οι ταλαντωτές (π.χ. λόγω του μικρού πλάτους ταλαντώσεων των ιόντων του πλέγματος, αν αγνοήσουμε τα ηλεκτρόνια) μπορούν να αντιστοιχηθούν με σωμάτια. Έτσι προκύπτουν τα οιονεί-σωμάτια που ονομάζονται φωνόνια στα ακουστικά κύματα των ταλαντώσεων του πλέγματος και φωτόνια για τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα των ταλαντώσεων σε μία κοιλότητα.

Ένας ταλαντωτής με συχνότητα ω έχει διακριτές τιμές ενέργειας

$$\hbar\omega\,(n+\tfrac{1}{2}),\ n = 0, 1, 2, \ldots\ , \tag{7.18}$$

όπου n είναι ο αριθμός που δείχνει την διέγερσή του. Η μέση θερμική ενέργεια είναι

$$\varepsilon = \hbar\omega\left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right)\ , \tag{7.19}$$

με μέσο αριθμό κατάληψης τον

$$\langle n(\omega)\rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\ . \tag{7.20}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η τελευταία σχέση υπολογίσθηκε από τον Planck (1900) και συμπίπτει με τον μέσο αριθμό των σωματίων στην στάθμη $\hbar\omega$ στην στατιστική Bose-Einstein (εξ. 7.1) όταν το χημικό δυναμικό μ είναι μηδέν.

Επομένως μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την ισοδύναμη σωματιακή περιγραφή, που δηλώνει πως σε κάθε ταλαντωτή συχνότητας ω με αριθμό διέγερσης n αντιστοιχούν n σωμάτια Bose με την ίδια συχνότητα. Η ελεύθερη ενέργεια είναι ανά ταλαντωτή ευρίσκεται εύκολα

$$f = \frac{\hbar\omega}{2} + k_B T \ln (1 - e^{\beta\hbar\omega}) \ , \qquad (7.21)$$

αφού υπολογίσουμε πρώτα την $z = \sum_n e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = e^{-\beta\hbar\omega/2} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$ και χρησιμοποιήσουμε την $f = - k_B T \ln z$.

Σε ένα αέριο που αποτελείται από ταλαντωτές διαφορετικών συχνοτήτων $\omega \equiv \omega(\vec{k}) \equiv \omega_{\vec{k}}$ η ολική ενέργεια γράφεται ως

$$E = \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_{\vec{k}} \left(<n(\omega_{\vec{k}})> + \frac{1}{2}\right) \ , \qquad (7.22)$$

με ένα άθροισμα σε όλες τις τιμές του κυματανύσματος $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$. Η σχέση διασποράς των μποζονίων είναι

$$\omega \sim k^b \ , \quad k = |\vec{k}| \ , \qquad (7.23)$$

με b = 1 για φωτόνια και φωνόνια. Έχουμε, λοιπόν,

$$d\omega \sim b\, k^{b-1}\, dk \qquad (7.24)$$

και με διαίρεση κατά μέλη των δύο σχέσεων αναλογίας προκύπτει η ισότητα

$$\frac{1}{\omega} d\omega = \frac{b}{k} dk \ . \qquad (7.25)$$

Αν αγνοηθεί η ενέργεια μηδενικού σημείου (n = 0) η ολική ενέργεια E του αερίου υπολογίζεται ακριβώς. Θα προχωρήσουμε στον υπολογισμό στον d-διάστατο χώρο αλλά θα περιορισθούμε σε σχέσεις αναλογίας αγνοώντας τους παράγοντες μπροστά από τις εκφράσεις. Επομένως, από τις (7.22), (7.24) και (7.25)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$E = \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_{\vec{k}} \langle n(\omega_{\vec{k}}) \rangle$$

$$\sim \int d^d k \; \omega \; \langle n(k) \rangle$$

$$\sim \int d k \, k^{d-1} \omega \; \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

$$\sim \int d\omega \, k^d \; \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

$$\sim \int d\omega \, \omega^{d/b} \; \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \; , \qquad (7.26)$$

και με την αντικατάσταση

$$x = \beta\hbar\omega \; , \quad dx = \beta \hbar \, d\omega, \qquad (7.27)$$

έχουμε

$$E \sim T^{1 + d/b} \int_0^\infty dx \, x^{d/b} \; \frac{1}{e^x - 1}$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{E \sim T^{1 + d/b}} \; . \qquad (7.28)$$

Τα παραπάνω ισχύουν με την προυπόθεση ότι το ολοκλήρωμα στην εξ. (7.26) συγκλίνει και υπεισέρχεται στην σταθερά αναλογίας μπροστά από τη εξάρτηση $T^{1+d/b}$.

Για b = 1 έχουμε από την εξ. (7.28) $E \sim T^{1+d}$ και η θερμοχωρητικότητα μετά από παραγώγιση της εξ. (7.28) είναι

$$\boxed{C_V \sim T^{d/b}} \; , \qquad (7.29)$$

που γίνεται $\sim T^3$ στον τρισδιάστατο χώρο. Έτσι αντίθετα από το θεώρημα ισοκατανομής που προβλέπει σταθερή τιμή της C_V οι χβαντικές τιμές της είναι πολύ μικρές και η C_V τείνει στο μηδέν για $T \to 0$. Επειδή η σχέση διασποράς $\omega \sim k^b$ με b = 1, ισχύει μόνο για μικρές τιμές του ω στην περίπτωση των φωνονίων, η $C_V \sim T^3$ μόνο για μικρές θερμοκρασίες T. Για τα φωτόνια η σχέση $\omega \sim k^b$ ισχύει για κάθε ω (χωρίς άνω όριο στο φάσμα των συχνοτήτων ω).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Επίσης επειδή το ολοκλήρωμα στην αναλογία της εξ. (7.28) έχει την μέγιστη συνεισφορά για x ~ 1 προκύπτει γιά

$$\hbar\omega_{max} \approx k_B T \qquad (7.30)$$

ότι η ενέργεια E έχει την μέγιστη συνεισφορά από τις συχνότητες $\omega \approx \omega_{max}$ (από τον γνωστό νόμο μετατόπισης του Wien).

7.4. Ακτινοβολία μέλανος σώματος (φωτονικό αέριο)

Η θερμική ακτινοβολία από μία κοιλότητα όγκου V σε θερμοκρασία T μέσω μιας μικρής τρύπας αποτέλεσε ένα θεμελιώδες πρόβλημα της φυσικής του περασμένου αιώνα. Η ακτινοβολία είναι ηλεκτρομαγνητικής φύσεως (ταξιδεύει στο κενό με την ταχύτητα του φωτός c) και η τρύπα από την οποία εκπέμπεται ισοδυναμεί με ένα σχεδόν τέλειο "μέλαν σώμα". Αυτό γιατί όπως και στο μέλαν σώμα η προσπίπτουσα ακτινοβολία που εισέρχεται στην κοιλότητα απορροφάται πλήρως, αφού προηγουμένως υποστεί πολλαπλές ανακλάσεις στα τοιχώματα της κοιλότητας. Τα σωμάτια που αντιστοιχούν στην ακτινοβολία είναι τα φωτόνια, μάζας μηδέν, ενέργειας $\hbar\omega = \hbar ck$ και σπιν 1. Επομένως, η ακτινοβολία μπορεί να θεωρηθεί ως ένα αέριο Bose από φωτόνια, σε σταθερή ενέργεια και όγκο. Επειδή τα φωτόνια μιας συχνότητας που απορροφούνται από τα τοιχώματα της κοιλότητας μπορεί να επανεκπέμπονται σε μια άλλη συχνότητα και σε διαφορετικούς αριθμούς ώστε η ολική ενέργεια να διατηρείται σταθερή, ο ολικός αριθμός N των φωτονίων δεν παραμένει σταθερός. Αυτό σημαίνει πως το χημικό δυναμικό (η παράγωγος της ενέργειας ως προς N) είναι μηδέν αφού δεν απαιτείται η συνθήκη σταθερού αριθμού N.

Εκτός από την βασική σχέση διασποράς

$$\omega = c\,k \ , \qquad (7.31)$$

ισχύει και η σχέση μηδενισμού για το χημικό δυναμικό (εξ. 5.27) του αερίου των φωτονίων

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = 0 \ . \qquad (7.32)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Ο μηδενισμός του μ μπορεί, επίσης, να προκύψει από την συνθήκη ισορροπίας $\Delta F = 0$ και την ιδιομορφία του μεταβλητού αριθμού φωτονίων N. Επιπλέον, τα φωτόνια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους ώστε η προσέγγιση του ιδανικού αερίου είναι ικανοποιητική.

Ο αριθμός των φωτονίων στην κατάσταση $\vec{k}$ με συχνότητα $\omega(\vec{k}) = \omega_{\vec{k}}$ είναι

$$\langle n(\omega_{\vec{k}})\rangle = \langle n_{\vec{k}}\rangle = \frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega_{\vec{k}}) - 1} \quad , \tag{7.33}$$

σε εφαρμογή της στατιστικής Bose με $\mu = 0$. Ο αριθμός των καταστάσεων μεταξύ k, k+dk στον τρισδιάστατο χώρο όγκου V είναι

$$g(k)\,dk = 2 \cdot \frac{V d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} = \frac{Vk^2}{\pi^2}\,dk \quad , \tag{7.34}$$

με τον παράγοντα 2 να προκύπτει από τις δύο διευθύνσεις πόλωσης που είναι δυνατές στην περίπτωση των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων. (Για τα φωνόνια ο παράγοντας αυτός είναι 3). Μπορεί, επίσης, να ειπωθεί πως λόγω μηδενικής μάζας η προβολή του σπιν είναι μόνο $+$ ή -1 που αντιστοιχεί στον παράγοντα εκφυλισμού 2.

Από τα παραπάνω υπολογίζεται, κατευθείαν, ο αριθμός των καταστάσεων με συχνότητες φωτονίων μεταξύ ω, ω + dω

$$\rho(\omega)\,d\omega = \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3}\,d\omega \quad , \tag{7.35}$$

ενώ ο αριθμός των φωτονίων στην ίδια στοιχειώδη ενεργειακή περιοχή είναι

$$dN(\omega) = \rho(\omega)\langle n(\omega)\rangle\,d\omega = \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3}\,\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\,d\omega \quad . \tag{7.36}$$

Από την ολοκλήρωση της εξ. (7.36) προκύπτει ο ολικός αριθμός φωτονίων N:

$$\boxed{N = \frac{V}{\pi^2 c^3}\int_0^\infty d\omega\,\frac{\omega^2}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = 0.244\left(\frac{T}{\hbar c}\right)^3 V} \quad , \tag{7.37}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με το ολοκλήρωμα να εκφράζεται συναρτήσει του ζ(3) (ΠΑΡΑΡΤ. Α). Η ολική ενέργεια ($E = V \int_0^\infty d\omega\, u(\omega)$, με $u(\omega) = \frac{1}{V}\frac{dE}{d\omega}$ την πυκνότητα ενέργειας ανά μονάδα όγκου), είναι

$$E = \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{(k_B T)^4}{\hbar^4} \left(\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} \right), \qquad (7.38)$$

ενώ το ολοκλήρωμα είναι $\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \zeta(4) = \frac{\pi^4}{15}$. Επομένως, η εξ. (7.38) δίνει το αποτέλεσμα

$$\boxed{\frac{E}{V} = \frac{\pi^2}{15} \frac{k_B^4}{(\hbar c)^3} T^4} \quad , \qquad (7.39)$$

που περιγράφει (από το 1879!) την ακτινοβολία του μέλανος σώματος. Μέσω της σταθεράς των Stefan-Boltzmann

$$\sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 \hbar^3 c^2} = 5.7 \times 10^{-5} \text{ erg. cm}^{-2} \text{ sec}^{-1} \text{ K}^{-4} \qquad (7.40)$$

προκύπτει η γνωστή μορφή του νόμου των Stefan Boltzmann για την ολική ενέργεια

$$\boxed{E = 4\sigma \frac{V}{c} T^4} \quad . \qquad (7.41)$$

Η ελεύθερη ενέργεια υπολογίζεται από την σχέση

$$F = T \frac{V}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega})\, d\omega$$

$$= -\frac{T^4 V}{3\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} \qquad (7.42)$$

και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$\boxed{F = -\,4\sigma\,\frac{V}{3c}\,T^4}\ . \qquad (7.43)$$

Αντίστοιχα η εντροπία $S = -\,\frac{\partial F}{\partial T}$ είναι

$$\boxed{S = 16\sigma\,\frac{V}{3c}\,T^3}\ , \qquad (7.44)$$

η θερμοχωρητικότητα $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V$

$$\boxed{C_V = 16\sigma\,\frac{V}{c}\,T^3}\ , \qquad (7.45)$$

και η πίεση $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$

$$\boxed{P = \frac{4\sigma}{3c}\,T^4}\ , \qquad (7.46)$$

με

$$\boxed{PV = \frac{1}{3}E}\ . \qquad (7.47)$$

Η τελευταία σχέση δείχνει ότι η πίεση είναι ανεξάρτητη του όγκου V.

Για υψηλές θερμοκρασίες ($\hbar\omega << k_B T$) η πυκνότητα ενέργειας (ενέργεια του πεδίου ακτινοβολίας στη περιοχή μεταξύ ω και ω + dω) ανά μονάδα όγκου $u(\omega) = \frac{1}{V}\frac{dE}{d\omega} = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}\,\frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$ από την $dE = \hbar\omega\, dN = \frac{V k_B T}{\pi^2 c^3}\,\omega^2\, d\omega$ είναι

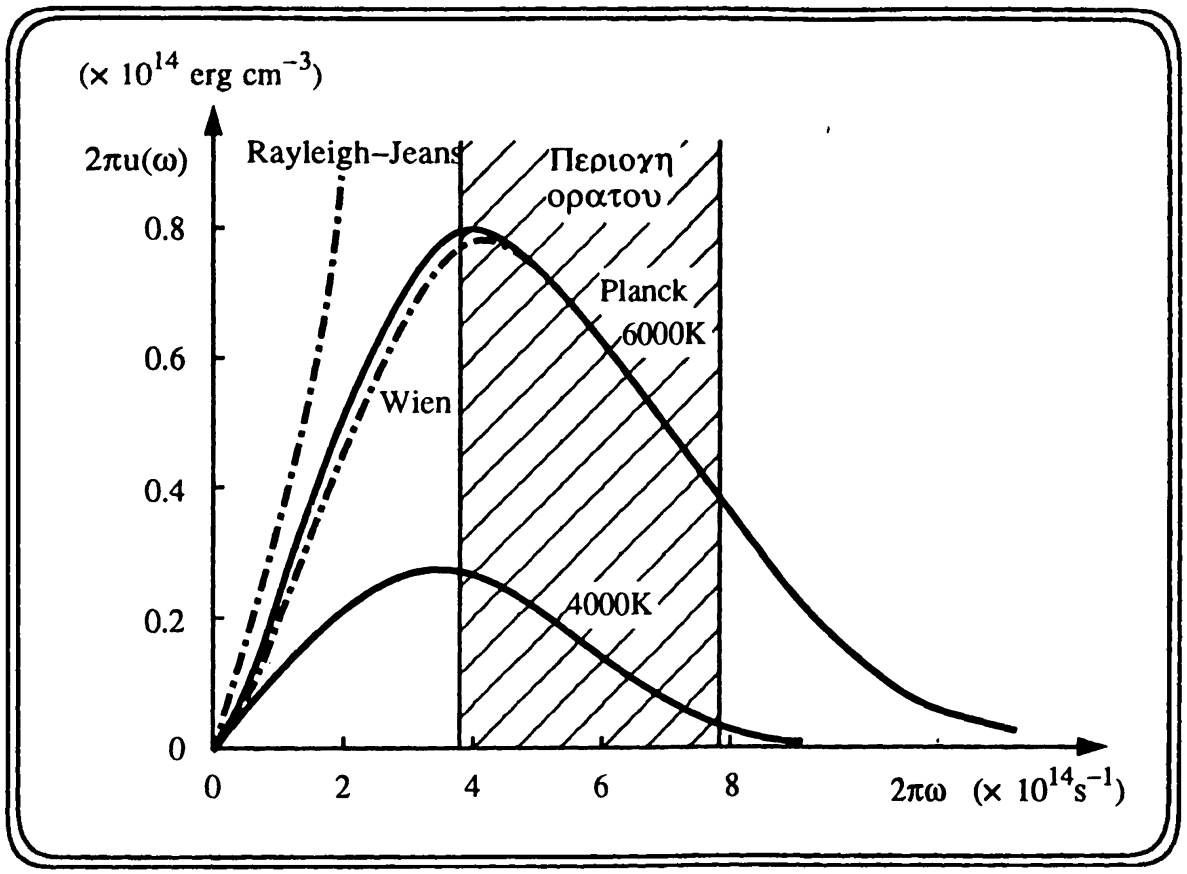
$$u(\omega) = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3}\,\omega^2\ , \qquad (7.48)$$

που είναι <u>ο νόμος των Rayleigh - Jeans,</u> ενώ για χαμηλές ($\hbar\omega >> k_B T$) θερμοκρασίες $dE = \hbar\omega\, dN = \frac{V\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\,\exp(-\hbar\omega/k_B T)\, d\omega$ και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$u(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp(-\hbar\omega/k_B T) \quad , \tag{7.49}$$

που είναι ο νόμος του Wien. Τα αποτελέσματα αυτά φαίνονται μαζί με το βασικό αποτέλεσμα του Planck στο Σχ. 7.5.



Σχ. 7.5. Η πυκνότητα ενέργειας ανά μονάδα όγκου u(ω) για το μέλαν σώμα συναρτήσει της συχνότητας ω (νόμος του Planck) για δύο τιμές της θερμοκρασίας Τ. Φαίνονται, επίσης, και οι προσεγγιστικοί νόμοι των Rayleigh-Jeans και Wien.

Άσκηση 1: Να δείξετε ότι η πυκνότητα ενέργειας ανά μονάδα όγκου u(ω) έχει μέγιστο για $\hbar\omega_{max} = 2.8214\, k_B T$. Ποιό είναι το αντίστοιχο μήκος κύματος της μέγιστης εκπομπής;

(**Υπόδειξη:** να μεγιστοποιήσετε την εξ. $u(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$. Η λύση επιτυγχάνεται με αριθμητικό τρόπο. Το μέγιστο μήκος κύματος λ_{max} δεν είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

απλώς $2\pi c/\omega_{max}$ αλλά πρέπει πρώτα να εκφρασθεί η νέα συνάρτηση $u(\lambda)$ και μετά να ληφθεί το μέγιστο. Η τιμή είναι $\lambda_{max} = 2.8978 \times 10^{-3}/T$ σε mK.)

Άσκηση 2: Να δείξετε ότι η πυκνότητα ενέργειας ανά μονάδα όγκου $u(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$ από τον νόμο της ακτινοβολίας του Planck (εξ. 7.38) συναρτήσει της συχνότητας ν ($\omega = 2\pi\nu$ και $d\omega = 2\pi\, d\nu$) γράφεται $u(\nu) = \sqrt{(16\pi^2\hbar c^3)} \frac{\nu^3}{e^{\beta h\nu} - 1}$. Να δώσετε και τις αντίστοιχες εκφράσεις για τους νόμους Rayleigh-Jeans και Wien. Να επαναλάβετε όλες τις σχέσεις συναρτήσει του μήκους κύματος λ ($\omega = c/\lambda$).

Άσκηση 3: Να δείξετε ότι ο νόμος των Stefan-Boltzmann (εξ. 7.39) προκύπτει από ολοκλήρωση της πυκνότητας $u(\omega)$ από τον νόμο του Planck: $\frac{E}{V} = \int_0^\infty d\omega\, u(\omega)$.

Το γεγονός ότι το θεώρημα ισοκατανομής, που προβλέπει ενέργεια $2k_BT$ για κάθε κατάσταση $\vec{k}$, δίνει άπειρη ενέργεια E στην περίπτωση των φωτονίων απετέλεσε την αφετηρία της κβαντικής θεωρίας, με την εισαγωγή των κβάντα το1900.

7.5. Μια πολύ μικρή επίσκεψη στο φωνονικό αέριο

Το αέριο των φωνονίων αφορά τις ταλαντώσεις των βαριών ιόντων που αποτελούν το κρυσταλλικό πλέγμα. Η λύση του προβλήματος οδηγεί σε 3N ανεξάρτητους ταλαντωτές ("τρόπους ταλάντωσης") που αντιμετωπίζονται με την κανονική κατανομή Boltzmann. Ο κάθε ταλαντωτής είναι σε μια στάθμη n, ενώ ισοδύναμα στη μεγαλοκανονική κατανομή θεωρούμε ότι υπάρχουν n φωνόνια στη στάθμη 0. Οι υπολογισμοί γίνονται σχετικά εύκολα, λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι είναι σταθερός ο αριθμός N ενώ η μέγιστη συχνότητα είναι πεπερασμένη (ω_{max}), αντίθετα με τα φωτόνια όπου ο $N \neq$ σταθ. και $\omega_{max} = \infty$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Ισχύει ότι ο αριθμός των καταστάσεων με συχνότητα μεταξύ ω, ω +dω είναι

$$\rho(\omega)\, d\omega = 3\, \frac{V\omega^2}{2\pi^2 c^3}\, d\omega \ , \quad \text{για μικρές } \omega, \qquad (7.50)$$

αφού ω = c k, όπου c η ταχύτητα του ήχου, μόνο για μικρές τιμές του k. Η σχέση $C_V \sim T^3$ (νόμος του Debye) ισχύει στην περίπτωσή μας μόνο για χαμηλές θερμοκρασίες T και συμπίπτει με τον νόμο των Stefan - Boltzmann (ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ:

Σε ένα αέριο Bose για $T<T_B$, όπου T_B είναι η θερμοκρασία συμπύκνωσης, το ποσοστό των μορίων που καταλαμβάνουν την βασική μονοσωματιακή κατάσταση ε_o είναι

$$\boxed{\frac{N_o}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2}} \qquad (7.51)$$

ενώ το χημικό δυναμικό είναι $\mu = 0$. Η θερμοκρασία συμπύκνωσης για μποζόνια με σπιν s δίνεται από τη σχέση

$$\boxed{T_B = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{N/V}{(2s+1)\,2.612}\right)^{2/3}}. \qquad (7.52)$$

Το φωτονικό και φωνονικό αέριο αποτελούν βασικά παραδείγματα αερίων Bose. Η συνάρτηση κατανομής του Planck είναι

$$\boxed{\langle n(\omega)\rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}}\ , \qquad (7.53)$$

ο νόμος Stefan - Boltzmann για την ακτινοβολία μέλανος σώματος σε θερμοκρασία T είναι

$$\boxed{\frac{E}{V} = \frac{\pi^2}{15\,\hbar^3c^3}(k_BT)^4}\ , \qquad (7.54)$$

ενώ ο νόμος του Planck

$$\boxed{u(\omega) = \frac{1}{V}\frac{dE}{d\omega} = \frac{\hbar}{\pi^2c^3}\,\frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega}-1}}\ , \qquad (7.55)$$

δίνει την ακτινοβολία ανά μονάδα όγκου και μονάδα περιοχής συχνοτήτων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ:

1. Για ποιόν τύπο συστημάτων ισχύει η στατιστική BE ;

2. Ποια είναι η εικόνα κατάληψης των μονοσωματιακών καταστάσεων ε_r για T = 0K στην περίπτωση της στατιστικής BE; Σε τι διαφέρει από την περίπτωση της FD;

3. Να εξηγήσετε το φαινόμενο της συμπύκνωσης BE μέσω του υπολογισμού της πυκνότητας μποζονίων N/ V από τη χρήση της πυκνότητας καταστάσεων ρ(ε). Τί συμβαίνει όταν βμ = 0;

4. Να δείξετε ότι βμ = 0 για $T < T_B$ ενώ στην ίδια περιοχή θερμοκρασιών η κατάληψη της στάθμης $\varepsilon_o \to 0$ δίνεται από τον N_o που παίρνει μακροσκοπικές τιμές; Υπολογίζεται ο N_o από το ολοκλήρωμα $\int_o^\infty d\varepsilon\, \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon)\rangle$;

5. Σε ποιές περιοχές θερμοκρασιών συνυπάρχουν το "φυσιολογικό" και το "συμπυκνωμένο" αέριο Bose; Που υπάρχει μόνο το "φυσιολογικό" και που μόνο το "συμπυκνωμένο";

6. Πώς δίνεται ο λόγος N_o/ V συναρτήσει της θερμοκρασίας T και της T_B; Να σχεδιασθεί και να ερμηνευθεί από φυσική άποψη.

7. Γιατί δεν παρατηρείται η συμπύκνωση Bose - Einstein στο διδιάστατο αέριο Bose; ($\int_o^\infty \frac{dx}{e^x - 1} = \infty$ και $\rho(\varepsilon) \propto$ σταθ.).

8. Γιατί το πρόβλημα της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος είναι σημαντικό στη φυσική; Ποιά σχέση έδειξε ο Planck το 1906 για τον μέσο αριθμό κατάληψης $\langle n(\omega)\rangle$;

9. Σε τι διαφέρει το φωτονικό αέριο από το αέριο φωνονίων; (Απάντηση: για τα φωνόνια υπάρχει άνω όριο στο φάσμα συχνοτήτων).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

10. Να περιγράψετε τον νόμο μετατόπισης του Wien.

11. Να δείξετε ότι οι διακυμάνσεις $<(\Delta N_0)^2>$ στον αριθμό κατάληψης της στάθμης ε_0 είναι ≈ 1 στο όριο όπου $N_0 >> 1$.

12. Γιατί στην ακτινοβολία του μέλανος σώματος η φωτονική πυκνότητα καταστάσεων πρέπει να πολλαπλασιαστεί επί δύο;

13. Επιτρέπεται $\beta\mu > 0$ στην περίπτωση του αερίου Bose και γιατί;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ:

1. Για σωμάτια Bose μάζας m που κινούνται ελεύθερα σε όγκο V εάν η χαμηλότερη ενεργειακή στάθμη είναι

$$\varepsilon_o = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mV^{2/3}},$$

να υπολογίσετε το χημικό δυναμικό μ για χαμηλές T και να δείξετε ότι $\mu \to \varepsilon_o$ όταν $T \to 0K$ και $\mu = 0$ για $T = T_B$ μέ $T_B = \left(\frac{N}{2\pi IV}\right)^{2/3} \frac{2\pi^2\hbar^2}{mk_B}$ και $I = \int_0^\infty \frac{x^{1/2}dx}{e^x - 1}$ ≈ 2.312 . Να βρείτε τον αριθμό N_o των καταστάσεων στην βασική κατάσταση για κάθε $T < T_B$ και να δείξετε ότι αν $N_o = N/2$ ο αριθμός των μποζονίων στην πρώτη διεγερμένη μονοσωματιακή κατάσταση N_1 είναι της τάξης $N^{2/3}$.

2. Από αστρονομικές παρατηρήσεις η μέση πυκνότητα ύλης στο σύμπαν ως σύνολο είναι 4×10^{-27} Kg m^{-3}. Το σύμπαν επίσης είναι σε λουτρό σταθερά κατανεμημένης ακτινοβολίας μέλανος σώματος θερμοκρασίας 2.7K, ανάμνηση της μεγάλης έκρηξης με την οποία δημιουργήθηκε πριν 20 δισ. χρόνια περίπου. Να υπολογίσετε την πυκνότητα ενέργειας και την πυκνότητα αριθμού (i) όταν η ύλη αποτελείται από φωτόνια, (ii) από πρωτόνια:

Λύση:

Γιά τα φωτόνια $\frac{N}{V} = \frac{2}{\pi^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3 (1.202) \approx 4 \times 10^8\ m^{-3}$ και $\frac{E}{V} = 3P = 2.7 \left(\frac{N}{V}\right) k_B T \approx 4 \times 10^{-14}$ J m^{-3}. Γιά τα πρωτόνια οι αντίστοιχοι αριθμοί υπολογίζονται 2.4 m^{-3} και 3.6×10^{-10} J m^{-3}. (Πως;)

3. Στην περίπτωση μποζονίων σπιν $s = 0$ που κινούνται σε διδιάστατη επιφάνεια εμβαδού $A = L^2$ με $\rho(\varepsilon) = (2s + 1)\frac{Am}{2\pi\hbar^2}$ να εκτιμήσετε τη θερμοκρασία συμπύκνωσης T_B:

(**Απάντηση:**

$N = A\left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)\int_0^\infty \frac{dx}{e^{x-\beta\mu}-1}$ με οριακή τιμή του ολοκληρώματος $\int_0^\infty \frac{dx}{e^x - 1} = \infty$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Επομένως η επιφανειακή πυκνότητα μποζονίων N/A δεν παρουσιάζει μέγιστο στην προηγούμενη έκφραση ώστε να μην απαιτείται η πρόσθεση του N_o. Άρα $T_B = 0$ σε $d = 2$).

4. Στο πρόβλημα του φωτονικού αερίου θέτοντας $\mu = 0, \omega = c\,k$, όπου c η ταχύτητα του φωτός να υπολογίσετε την επιφανειακή πυκνότητα ενέργειας E/A στην διδιάστατη περίπτωση της άσκησης 3.

Λύση: Αν λάβουμε υπ' όψιν και τον διπλό εκφυλισμό λόγω των 2 ανεξάρτητων καταυθύνσεων πόλωσης του ΗΜ πεδίου

$$\rho(\omega) = \frac{A\,\omega}{c^2\pi} \quad \text{για} \quad d = 2,$$

και

$$E = \frac{A(k_B T)^3}{\pi\hbar^2 c^2} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^x - 1}$$

$$= \frac{A(k_B T)^3}{\pi\hbar^2 c^2}\, \Gamma(3)\, \zeta(3).$$

Άρα, (ΠΑΡΑΡΤ. Α) προκύπτει

$$\frac{E}{A} = \frac{(k_B T)^3}{\pi\hbar^2 c^2}\, 2.4 \ .$$

5. Στο τρισδιάστατο σύμπαν που ζούμε ισχύουν από τη στατιστική φυσική οι εξής σχέσεις:

(i). Η ενεργειακή πυκνότητα της ακτινοβολίας μέλανος σώματος είναι ανάλογη της θερμοκρασίας T με το νόμο T^α, $\alpha = 4$.

(ii). Στο μοντέλο Debye των στερεών η θερμοχωρητικότητα για χαμηλές T είναι ανάλογη της T^β, $\beta = 3$.

(iii). Ο λόγος της θερμοχωρητικότητας σε σταθερή πίεση ως προς αυτή σε σταθερό όγκο είναι για ένα μονοατομικό αέριο $\gamma = 5/3$. Ποιές είναι οι τιμές των α, β και γ σε ένα d- διάστατο σύμπαν;
(**Απάντηση:** $\alpha = d + 1$, $\beta = d$, $\gamma = 1 + 2/d$).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

6. Πόσα φωτόνια υπάρχουν σε ένα σκοτεινό δωμάτιο. Πόσα βλέπουμε εμείς; (Η περιοχή του ορατού είναι: 1.3 eV μέχρι 3.3 eV. Να υπολογίσετε το ολοκλήρωμα με αυτά τα όρια).

7. Να υπολογίσετε τον αριθμό σωματίων $N_{\varepsilon>0}$ για ένα μονοδιάστατο αέριο Bose και να δείξετε ότι δεν συγκλίνει. Το αποτέλεσμα δείχνει ότι δεν παρατηρείται συμπύκνωση Bose-Einstein ούτε στην μία διάσταση.

8. Από τον τύπο

$$N = 2.404\,\pi^{-2}\,V\left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3$$

που δίνει τον αριθμό φωτονίων σε ισορροπία με θερμοκρασία T σε όγκο V να υπολογίσετε τη θερμοκρασία T_B ώστε για $T < T_B$ να ισχύει $N_{\varepsilon>0} < N$ ενώ $N = N_o + N_{\varepsilon>0}$, όπου N_o ο αριθμός των φωτονίων με τη χαμηλότερη συχνότητα ($N/V = 10^{20}$ cm^{-3}). Η περίπτωση αυτή θα μπορούσε να αντιπροσωπεύει το συμπυκνωμένο αέριο Bose. Στην πράξη όμως αυτό δεν συμβαίνει γιατί ο ολικός αριθμός φωτονίων δεν είναι σταθερός.

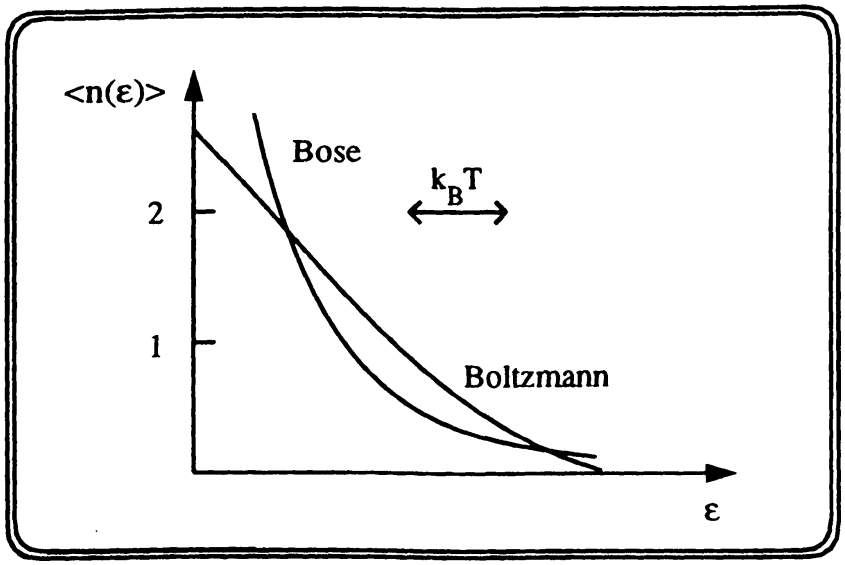
9. Να δείξετε ότι η τυπική απόκλιση $\sqrt{\langle(\Delta n)^2\rangle}$ για τον αριθμό των φωτονίων συχνότητας ω σε μια αγώγιμη κοιλότητα είναι πάντα μεγαλύτερη από τον μέσο αριθμό των φωτονίων σ' αυτή τη συχνότητα.
(**Απάντηση:**

$$\langle n\rangle = [\exp(\beta\hbar\omega - 1)]\,,\quad \langle(\Delta n)^2\rangle = -\frac{\partial\langle n\rangle}{\partial(\beta\hbar\omega)} = \frac{\exp(\beta\hbar\omega)}{[\exp(\beta\hbar\omega - 1)]^2}\,,$$

άρα: $\sqrt{\langle(\Delta n)^2\rangle} = \langle n\rangle \exp(\beta\hbar\omega)/2\rangle >> \langle n\rangle)$.

10. Οι δύο χαμηλότερες στάθμες για ένα άτομο μάζας που κινείται ελεύθερα σε κουτί όγκου V είναι $\varepsilon_o = 3\,\frac{\hbar^2\pi^2}{2mV^{2/3}}$ και $2\varepsilon_o$, αντίστοιχα. Για το ^{4}He έχουμε m = 6.6.x 10^{-24} gr και V = 1 cm^3. Να δείξετε ότι η διαφορά μεταξύ των δύο σταθμών είναι $\Delta\varepsilon = \varepsilon_o = 2.48 \times 10^{-30}$ erg και αντιστοιχεί σε θερμοκρασία 1.8 x 10^{-14} K.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 7.6. Η κλασσική κατανομή Boltzmann και η Bose.

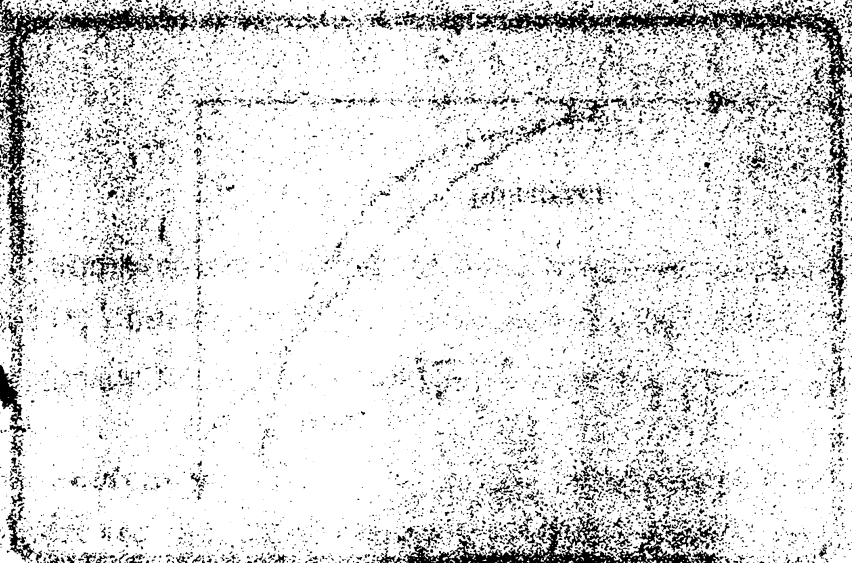
Να δείξετε ότι σε θερμοκρασία 1mK ο παράγοντας Boltzmann $\exp(-\Delta\varepsilon/k_BT)$ είναι $1 - 1.8 \times 10^{-11}$ (περίπου μονάδα) που σημαίνει ότι και για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση η κατάληψη είναι περίπου μονάδα. Όμως, η τιμή που δίνει η κατανομή Bose για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση είναι $(\exp(\Delta\varepsilon) - 1)^{-1}$ επειδή $\Delta\varepsilon >> \mu$ είναι $N_1 = 5 \times 10^{10}$ με ποσοστό σωματίων $N_1/N = 5 \times 10^{-12}$. (Να δειχθεί πρώτα ότι το χημικό δυναμικό μ είναι τόσο μικρό, -1.4×10^{-41}erg, ώστε η κατάληψη της πρώτης στάθμης $(\exp[(\varepsilon_o-\mu)/k_BT] - 1)^{-1}$ είναι πολύ πιό κοντά στην μονάδα απ' ότι της δεύτερης $(\exp[(2\varepsilon_o-\mu)/k_BT] - 1)^{-1}$ με αποτέλεσμα η ενέργεια ε_o να κυριαρχεί στην κατανομή Bose). Στο Σχήμα 7.6 φαίνονται οι αριθμοί κατάληψης στις κατανομές Boltzmann και Bose.

11. Να αποδείξετε ότι οι διακυμάνσεις $\langle(\Delta N)^2\rangle$ στον αριθμό των μποζονίων είναι

$$\langle(\Delta N)^2\rangle = \langle N\rangle (1 + \langle N\rangle) \ .$$

Για $\langle N\rangle >> 1$, ποιά είναι η ποσοστική τυπική απόκλιση;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α

ΤΑ ΑΠΑΡΑΙΤΗΤΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ

Α.1 Εισαγωγή
Α.2 Ολοκληρώματα σφάλματος
Α.3 Παραγοντικά ολοκληρώματα
Α.4 Ολοκληρώματα Riemann

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΚΑΛΛΙΤΕΧΝΑΙ

ΤΑ ΑΠΑΡΑΙΤΗΤΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΑ

Α.1. Εισαγωγή

Στο παράρτημα αυτό δίνουμε ορισμένες μαθηματικές αποδείξεις και μερικούς τύπους ολοκληρωμάτων που είναι χρήσιμα στην στατιστική φυσική. Δεν επιμένουνε στην μαθηματική αυστηρότητα αλλά για λόγους φυσικής σκοπιμότητας δίνουμε περισσότερο έμφαση στην σαφήνεια και την ευκολία της παρουσίασης. Αρχίζουμε με την επίλυση των ολοκληρωμάτων $\int_a^b x^n e^{-\alpha x}\, dx$.

Ισχύει η στοιχειώδης ολοκλήρωση

$$\int_a^b e^{-\alpha x}\, dx = -\frac{1}{\alpha}\left[e^{-\alpha x}\right]_b^a$$

$$= -\frac{1}{\alpha}\left(e^{-\alpha a} - e^{-\alpha b}\right) , \qquad (A.1)$$

ενώ με ολοκλήρωση κατά παράγοντες έχουμε

$$\int_a^b x\, e^{-\alpha x}\, dx = -\frac{1}{\alpha}\left[x\, e^{-\alpha x}\right]_b^a + \frac{1}{\alpha}\int_a^b e^{-\alpha x}\, dx$$

$$= \frac{a}{\alpha} e^{-\alpha a} - \frac{b}{\alpha} e^{-\alpha b} + \frac{1}{\alpha^2}\left(e^{-\alpha a} - e^{-\alpha b}\right) , \qquad (A.2)$$

και ίδια διαδικασία επαναλαμβάνεται και για τα ολοκληρώματα $\int_a^b x^2 e^{-\alpha x}\, dx$,

κ.λ.π.

Το ίδιο αποτέλεσμα με την (Α.2) προκύπτει με το ευρύτατα διαδεδομένο μαθηματικό κόλπο της παραγώγισης στην υπό ολοκλήρωση ποσότητα

$$\int_a^b x e^{-\alpha x}\, dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha}\int_a^b e^{-\alpha x}\, dx$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= -\frac{\partial}{\partial\alpha}\left\{\frac{1}{\alpha}(e^{-\alpha a} - e^{-\alpha b})\right\}$$

$$= \frac{a}{\alpha}e^{-\alpha a} - \frac{b}{\alpha}e^{-\alpha b} + \frac{1}{\alpha^2}(e^{-\alpha a} - e^{-\alpha b}) \,. \qquad \text{(A.3)}$$

Για το ολοκλήρωμα $\int_a^b x^2 e^{-\alpha x}\,dx$ απαιτούνται δύο παραγωγίσεις ως προς α, κ.λ.π.

Επίσης η λογαριθμική ολοκλήρωση επιτρέπει τον υπολογισμό

$$\frac{\int_a^b xe^{-\alpha x}\,dx}{\int_a^b e^{-\alpha x}\,dx} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\int_a^b e^{-\alpha x}\,dx$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\left\{\frac{1}{\alpha}(e^{-\alpha a} - e^{-\alpha b})\right\}, \qquad \text{(A.4)}$$

ενώ όταν το άνω όριο είναι $b = \infty$ έχουμε

$$\frac{\int_a^\infty xe^{-\alpha x}\,dx}{\int_a^\infty e^{-\alpha x}\,dx} = \frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\alpha - \frac{\partial}{\partial\alpha}(-\alpha a) = \frac{1}{\alpha} + a, \qquad \text{(A.5)}$$

ενώ όταν το κάτω όριο είναι $a = 0$

$$\frac{\int_0^\infty xe^{-\alpha x}\,dx}{\int_0^\infty e^{-\alpha x}\,dx} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\int_0^\infty e^{-\alpha x}\,dx$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\frac{1}{\alpha}$$

$$= +\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\alpha = \frac{1}{\alpha} \,. \qquad \text{(A.6)}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Α.2. Ολοκληρώματα σφάλματος

Το ολοκλήρωμα $I_n = \int_0^\infty x^n e^{-\alpha x^2} dx$ απαιτεί διαφορετική αντιμετώπιση για n άρτιο και n περιττό. Όταν ο n είναι περιττός αριθμός (π.χ.1)

$$I_1 = \int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \quad , \tag{A.7}$$

ενώ με τις μεθόδους παραγώγισης για n=3:

$$I_3 = \int_0^\infty x^3 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{1}{2\alpha}\right) = \frac{1}{2\alpha^2} \tag{A.8}$$

για n=5:

$$I_5 = \int_0^\infty x^5 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_0^\infty x^3 e^{-\alpha x^2} dx \tag{A.9}$$

$$= \frac{1}{\alpha^3} \quad , \text{κ.λ.π.} \tag{A.10}$$

Όταν ο n είναι άρτιος (π.χ. για n=0)

$$I_0 = \int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad , \tag{A.11}$$

που είναι το γνωστό μας (ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι, ΠΑΡ. Α) ολοκλήρωμα του Gauss. Με την τεχνική της παραγώγισης για n=2 παίρνουμε

$$I_2 = \int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\right)$$

$$= \frac{1}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \, , \tag{A.12}$$

κ.λ.π. για υψηλότερες τιμές του άρτιου n.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Από την κατανομή ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann

$$f(\upsilon)\, d\upsilon = A\upsilon^2 e^{-\alpha\upsilon^2} d\upsilon \qquad (A.13)$$

μπορεί να υπολογισθεί η μέση ταχύτητα <υ> μέσω του πηλίκου των ολοκληρωμάτων

$$<\upsilon> = \frac{\int_0^\infty A\upsilon^3 e^{-\alpha\upsilon^2} d\upsilon}{\int_0^\infty A\upsilon^2 e^{-\alpha\upsilon^2} d\upsilon} = \frac{2}{\sqrt{\pi\alpha}} \qquad (A.14)$$

ενώ

$$<\upsilon^2> = \frac{\int_0^\infty A\upsilon^4 e^{-\alpha\upsilon^2} d\upsilon}{\int_0^\infty A\upsilon^2 e^{-\alpha\upsilon^2} d\upsilon} = \frac{3}{2\alpha} \quad . \qquad (A.15)$$

Με την λογαριθμική ολοκλήρωση (εξ. Α.4)

$$<\upsilon^2> = -\frac{\partial}{\partial\alpha} \ln \int_0^\infty \upsilon^2 e^{-\alpha\upsilon^2} d\upsilon$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\alpha} \ln\left(\frac{1}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\right)$$

$$= \frac{3}{2}\frac{\partial}{\partial\alpha} \ln\alpha = \frac{3}{2\alpha}\,, \qquad (A.16)$$

όμοιο αποτέλεσμα με την εξ. (Α.15).

Αντίστοιχα, ορίζεται η "συνάρτηση σφάλματος"

$$\mathrm{erf}\,(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x^2} dx\,,\ \mathrm{erf}\,(0) = 1,\ \mathrm{erf}\,(\infty) = 0,\ \mathrm{erf}\,(x) = \mathrm{erf}\,(-x), \qquad (A.17)$$

που μπορεί να εκφρασθεί συναρτήσει της συμπληρωματικής της συνάρτησης erfc (x) που έχει το ανάπτυγμα για x>>1:

$$\mathrm{erfc}\,(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-x^2} dx \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}\,x} e^{-x^2}\left(1 - \frac{1}{2x^2} + \ldots\right). \qquad (A.18)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Α.3. Παραγοντικά ολοκληρώματα

Η συνάρτηση Γ ορίζεται μέσω του ολοκληρώματος

$$\Gamma(p+1) = \int_0^\infty x^p e^{-x}\, dx$$

$$= [-x^p e^{-x}]_\infty^0 + p \int_0^\infty x^{p-1} e^{-x}\, dx$$

$$= p\,\Gamma(p)\,, \qquad \text{(A.19)}$$

με χρήση της κατά παράγοντας ολοκλήρωσης και παρατηρώντας ότι $\lim_{x\to\infty} x^p e^{-x} = 0$. Όταν ο p είναι θετικός ακέραιος n αποδεικνύεται εύκολα από την (A.19) ότι

$$\Gamma(n+1) = n!\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots\,, \qquad \text{(A.20)}$$

ενώ είναι χρήσιμα και τα αποτελέσματα

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \qquad \Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{1.3.5\ldots(2n-1)}{2^n}\sqrt{\pi}\,, \quad n = 1, 2, \ldots \qquad \text{(A.21)}$$

Για αυθαίρετο p ισχύει το ανάπτυγμα (ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι)

$$\Gamma(p+1) = \left(\frac{p}{e}\right)^p = \sqrt{2\pi p}\left(1 + \frac{1}{12p} + \ldots\right)\,. \qquad \text{(A.22)}$$

Α.4. Ολοκληρώματα Riemann $\int_0^\infty dx\, \frac{x^{n-1}}{e^x \pm 1}$

Στην περίπτωση των μποζονίων εμφανίζεται το ολοκλήρωμα Riemann με − στον παρονομαστή ενώ το ίδιο ολοκλήρωμα εμφανίζεται με + για φερμιόνια. Έχουμε

$$\int_0^\infty dx\, \frac{x^{n-1}}{e^x \pm 1} = \int_0^\infty dx\, x^{n-1} \frac{e^{-x}}{1 \pm e^{-x}}$$

$$= \int_0^\infty dx\, x^{n-1} e^{-x} \sum_{r=1}^\infty e^{-(r-1)x}, \qquad \text{για μποζόνια} \qquad \text{(A.23)}$$

και

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$= \int_0^\infty dx\, x^{n-1} e^{-x} \sum_{r=1}^\infty (-1)^{r+1} e^{-(r-1)x}, \quad \text{για φερμιόνια .} \quad \text{(A.24)}$$

Οι σειρές στις εξ. (A.23, 24) εμφανίζονται λόγω των αναπτυγμάτων

$$\sum_{r=1}^\infty \alpha^{r-1} = 1 + \alpha + \alpha^2 + \ldots = \frac{1}{1-\alpha} \qquad \text{(A.25)}$$

και

$$\sum_{r=1}^\infty (-1)^{r+1} \alpha^{r-1} = 1 - \alpha + \alpha^2 - \ldots = \frac{1}{1+\alpha} \quad . \qquad \text{(A.26)}$$

Τα ολοκληρώματα ως προς x στις εξ. (A.23,24) επιλύονται μέσω της αντικατάστασης

$$y = r\,x \quad , \qquad dy = r\,dx \quad , \qquad \text{(A.27)}$$

ώστε η (A.23) γίνεται

$$\sum_{r=1}^\infty \frac{1}{r^n} \int_0^\infty dy\, y^{n-1} e^{-y} = \Gamma(n) \sum_{r=1}^\infty \frac{1}{r^n} \qquad \text{(A.28)}$$

και η (A.24)

$$\sum_{r=1}^\infty \frac{1}{r^n} (-1)^{r+1} \int_0^\infty dy\, y^{n-1} e^{-y} = \Gamma(n) \sum_{r=1}^\infty \frac{(-1)^{r+1}}{r^n} \qquad \text{(A.29)}$$

για τα μποζόνια και τα φερμιόνια, αντίστοιχα. Η συνάρτηση Γ ορίσθηκε στην (A.19) ενώ μερικές χρήσιμες τιμές της είναι οι

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}, \quad \text{κ.λ.π.}$$

ενώ οι υπόλοιπες παράγονται εύκολα με χρήση της εξ. (A.19).

Τα αθροίσματα στις εξ. (A.28,29) ορίζονται από τη συνάρτηση ζήτα του Riemann

$$\sum_{r=1}^\infty \frac{1}{r^n} = 1 + \frac{1}{2^n} + \frac{1}{3^n} + \ldots = \zeta(n) \quad , \qquad \text{(A.30)}$$

ενώ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r^n} (-1)^{r+1} = 1 - \frac{1}{2^n} + \frac{1}{3^n} + \ldots = (1 - 2^{1-n})\, \zeta(n), \qquad \text{(A.31)}$$

με ορισμένα χρήσιμα αποτελέσματα τα: $\zeta(2)=\pi^2/6$, $\zeta(3)=1.20$, $\zeta(4)=\pi^4/90$, $\zeta(3/2)\approx 2.612$, $\zeta(5/2)\approx 1.341$, κ.λ.π.

Επομένως, στην περίπτωση των μποζονίων το ολοκλήρωμα Riemann είναι

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^{n-1}}{e^x - 1} = \Gamma(n)\, \zeta(n) \qquad \text{(A.32)}$$

και των φερμιονίων

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^{n-1}}{e^x + 1} = (1 - 2^{1-n})\, \Gamma(n)\, \zeta(n), \qquad \text{(A.33)}$$

αντίστοιχα.

Στην περίπτωση των φερμιονίων (στατιστική Fermi) αποδεικνύονται χρήσιμες και οι παρακάτω προσεγγίσεις:

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^n}{e^{x-\beta\mu}+1} \approx \Gamma(n+1)\, e^{\beta\mu}, \quad \text{για} \quad \beta\mu < -2 \qquad \text{(A.34)}$$

$$\approx \frac{(\beta\mu)^{n+1}}{n+1}\left[1 + \frac{\pi^2\, n(n+1)}{6(\beta\mu)^2} + \ldots\right], \quad \text{για } \beta\mu \gg 1 \quad . \qquad \text{(A.35)}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

ΤΟ ΚΒΑΝΤΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ HALL

Β.1 Εισαγωγή
Β.2 Ημιαγωγοί-διατάξεις
Β.3 Διδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο (το κλασικό φαινόμενο Hall)
Β.4 Η κβαντική περιγραφή
Β.5 Το κβαντικό φαινόμενο Hall παρουσία τυχαιότητας
Β.6 Συμπεράσματα-εφαρμογές

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΤΟ ΚΒΑΝΤΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ HALL

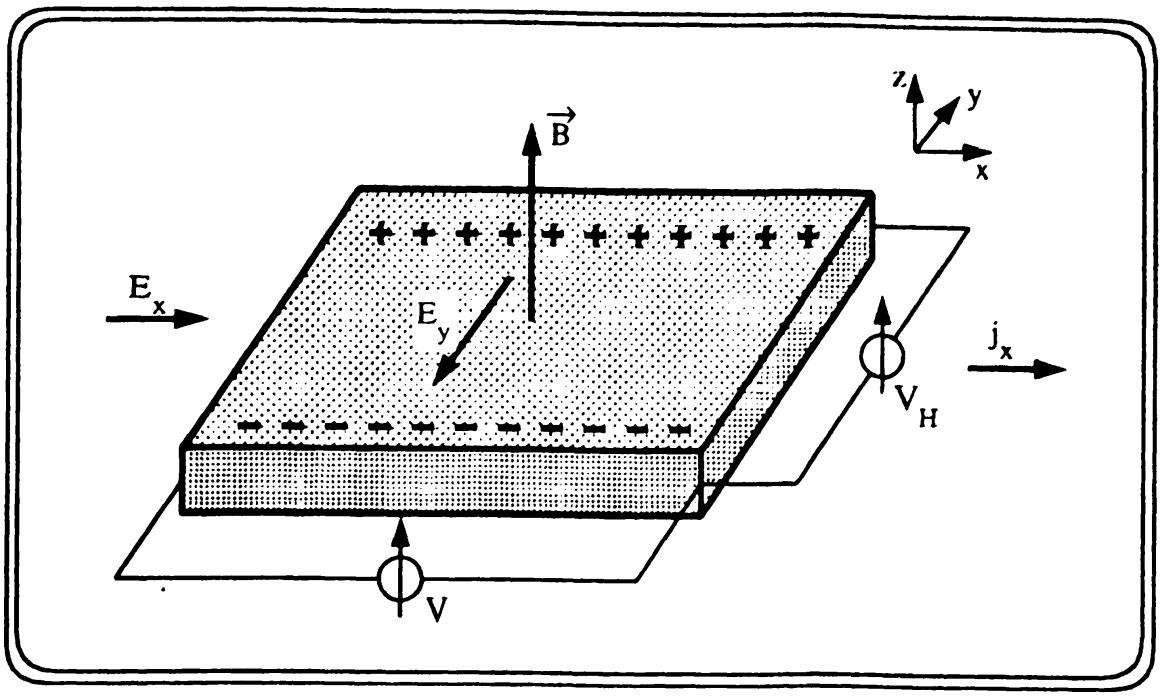
Β.1. Εισαγωγή

Οι θεωρίες που προτείνονται για την εξήγηση διαφόρων φαινομένων της φύσης βελτιώνονται συνεχώς αφού υποστούν τα τεστ του πειραματικού ελέγχου. Αυτή είναι η συνηθισμένη μέθοδος ανεύρεσης της αλήθειας στις επιστήμες, που είναι γνωστή και ως αναλυτική μέθοδος, ενώ στην εφαρμογή της αποκλείεται κάθε ίχνος δογματισμού. Συχνά όμως πειράματα δίνουν μετρήσεις που αναιρούν τις θεωρητικές προβλέψεις και νέα φαινόμενα παρουσιάζονται εκεί που δεν τα περιμέναμε. Αναμφισβήτητα, η φύση διαθέτει μεγάλη φαντασία ώστε να μας επιφυλάσσει πολλές τέτοιες εκπλήξεις! Μια τέτοια περίπτωση είναι αυτή του κβαντικού φαινομένου Hall που ανακαλύφθηκε από τον Γερμανό φυσικό K. von Klitzing στα εργαστήρια υψηλών μαγνητικών πεδίων της Grenoble το 1980. Μέχρι τότε κανένας φυσικός δεν περίμενε πως η φυσική των ημιαγωγών έκρυβε ένα τόσο σημαντικό βασικό φαινόμενο που δείχνει την ισχύ της κβαντικής μηχανικής σε μακροσκοπική κλίμακα, αφού το πεδίο είχε ήδη ερευνηθεί σε μεγάλη έκταση. Επομένως, η ανακάλυψη του K. von Klitzing, δικαιολογημένα, τον οδήγησε στην απονομή του βραβείου Nobel Φυσικής το 1985.

Στο κβαντικό φαινόμενο Hall έχουμε μιά διδιάσταστη επιφάνεια (Σχ.Β.1) που αποτελείται από μια πολύ λεπτή ημιαγώγιμη στρώση ενώ υποβάλλεται σε μετρήσεις που γίνονται σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες και υπερβολικά ισχυρά μαγνητικά πεδία $\vec{B}$. Τα αποτελέσματα του πειράματος δείχνουν πως η αντίσταση Hall ρ_{xy} παρουσιάζει "πλατώ", δηλ. υπάρχουν διαστήματα όπου παραμένει σταθερή όταν μεταβάλλεται η ισχύς του πεδίου $\vec{B}$.

Όταν σε ένα διδιάστατο αγώγιμο ή ημιαγώγιμο υλικό που διαρρέεται από ρεύμα έντασης I παρουσία εφαρμοσθεί μαγνητικό πεδίο $\vec{B}$ κάθετο προς στην επιφάνεια παρατηρείται διαφορά δυναμικού (V_H). Αυτό είναι το κλασικό φαινόμενο Hall που ανακαλύφθηκε από τον Αμερικάνο φυσικό Hall το 1879. Η παρουσία του μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$ είναι υπεύθυνη για την εμφάνιση ηλεκτρικού πεδίου $\vec{E}_H$ κάθετου στην ροή του ρεύματος και την δημιουργία του

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

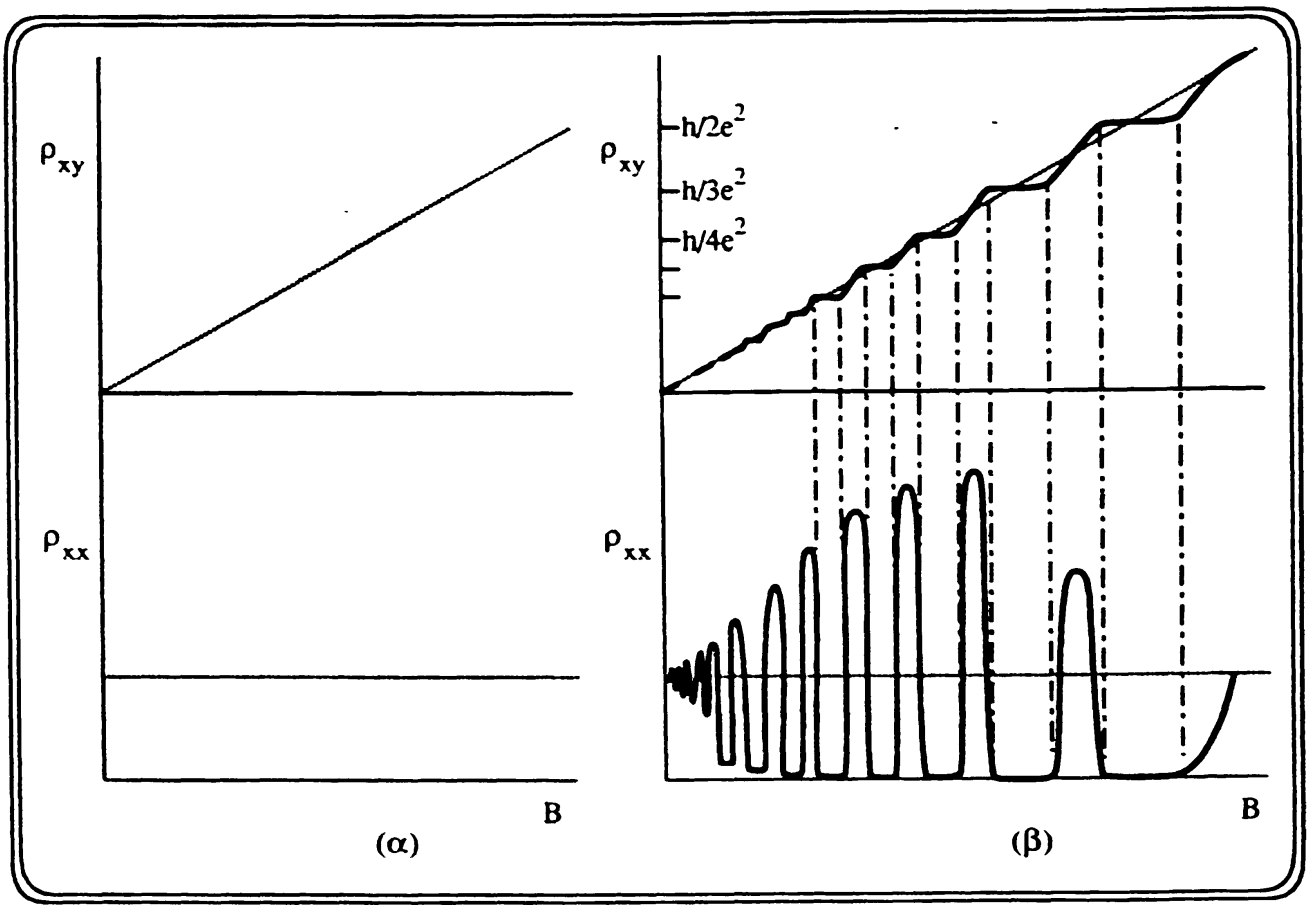


Σχ. Β.1. Μιά συσκευή μέτρησης του φαινομένου Hall: αποτελείται από ένα επίπεδο αγώγιμο υλικό τοποθετημένο σε κάθετο μαγνητικό πεδίο ως προς την επιφάνεια. Λόγω του πεδίου E_x κατά μήκος του άξονα x το υλικό διαρρέεται από ρεύμα I πυκνότητας j_x. Εάν εφαρμοσθεί μαγνητικό πεδίο $\vec{B}$ κάθετο προς την επιφάνεια δρα έτσι ώστε να κατευθύνει τα ηλεκτρόνια κάθετα προς το ρεύμα με αποτέλεσμα λόγω συσσώρευσης στα άκρα να αναπτυχθεί πεδίο Hall E_y που αντιβαίνει στην κίνησή τους και την περαιτέρω συσσώρευσή τους. Με την προσάρτηση διάφορων συσκευών μέτρησης μετρούμε την διαφορά δυναμικού παράλληλα στο ρεύμα (V) καθώς και την κάθετη προς την ροή του ρεύματος διαφορά δυναμικού V_H (που οφείλεται στην ύπαρξη του μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$). Στο κλασσικό φαινόμενο Hall η αντίσταση Hall ρ_{xy} (το πηλίκο της τάσης V_H διά την ένταση του ρεύματος I) είναι ανάλογη της ισχύος του μαγνητικού πεδίου B.

δυναμικού Hall V_H. Έτσι εκτός απο την ηλεκτρική αντίσταση $R = \rho_{xx} = V/I$ ορίζεται και η αντίσταση Hall ρ_{xy}, που δίνεται απο το πηλίκο της διαίρεσης του δυναμικού Hall (V_H) διά της έντασης του ρεύματος (I). Η αντίσταση Hall $\rho_{xy} = V_H/I$ που προκύπτει είναι ανάλογη της ισχύος του πεδίου B (Σχ. Β.2(α)). Ο K. von Klitzing χρησιμοποίησε ένα ημιαγώγιμο υλικό σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες (κοντά στο απόλυτο μηδέν) και σε υπερβολικά ισχυρά μαγνητικά πεδία B και έδειξε ότι η αντίσταση Hall ρ_{xy} εμφανίζει πολύ διαφορετική συμπεριφορά, με διαστήματα όπου η μεταβολή του πεδίου B δεν μεταβάλλει

την αντίσταση (Σχ. Β.2(β)). Αυτά είναι τα γνωστά "πλατώ", ενώ η ανακάλυψη αποτελεί το γνωστό και ως "ακέραιο" κβαντικό φαινόμενο Hall. Επιπλέον η αντίσταση Hall στα "πλατώ" δίνεται από τις ιδανικές τιμές

$$\varrho_{xy} = \frac{h}{Ne^2}, \qquad \text{(B.1)}$$



Σχ. Β.2. (α) Το κλασσικό φαινόμενο Hall όπου για σχετικά μικρές τιμές του πεδίου η αντίσταση Hall ϱ_{xy} είναι ανάλογη του πεδίου B. (β) Το κβαντικό φαινόμενο Hall όπου για μεγάλα πεδία η αντίσταση Hall ϱ_{xy} εμφανίζει "πλατώ" ενώ η συνηθισμένη διαμήκης αντίσταση R μηδενίζεται στα ίδια διαστήματα τιμών του B. Σε κάθε πλατώ η τιμή της ϱ_{xy} δίνεται από τον τύπο (B.1) με πολύ μεγάλη ακρίβεια.

($h/e^2 = 25812.8\ \Omega$), όπου N = 1, 2, 3,... και h είναι η σταθερά του Planck ενώ e είναι το φορτίο του ηλεκτρονίου. Επιπλέον η διαμήκης αντίσταση ϱ_{xx} μηδενίζεται στα ίδια διαστήματα. Αργότερα (1982) άλλοι ερευνητές (Tsui, Störmer και Gossard) ανακάλυψαν και το "κλασματικό" κβαντικό φαινόμενο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Hall όπου η κβάντωση της αντίστασης Hall ρ_{xy} (με την παρουσία των πλατώ) επεκτάθηκε και σε τιμές που αντιστοιχούν σε κλασματικές τιμές του N. Παρατηρήθηκαν, λοιπόν, τιμές που αντιστοιχούν σε N = 1/3, 2/3, 4/3, 5/3, 2/5, 3/5, 3/7,... με περιττούς παρονομαστές.

Αυτό που είναι ιδιαίτερα εντυπωσιακό στο κβαντικό φαινόμενο Hall είναι ο βαθμός ακρίβειας των αποτελεσμάτων με βάσει την σχέση (Β.1). Οι μετρήσεις για τις τιμές της αντίστασης Hall στα διάφορα ακέραια πλατώ ικανοποιούν την (Β.1) με ακρίβεια που φθάνει στο 1:6000000 ενώ πιό ακριβείς μετρήσεις έφθασαν και μέχρι 1: 1000 000 000, δηλ. με την ίδια ακρίβεια που είναι γνωστές οι θεμελιώδεις σταθερές της κβαντικής μηχανικής. Κι αυτά παρ' όλο που τέτοιου είδους μετρήσεις σε ημιαγώγιμα υλικά είναι, συνήθως, ιδιαίτερα ευαίσθητες σε λεπτομέρειες όπως η γεωμετρία του δείγματος, η ιστορία του, η περιεκτικότητα ξένων ατόμων ή ατελειών στην δομή του, όπως επίσης και η θερμοκρασία μέτρησης. Το κβαντικό φαινόμενο Hall παραμένει το ίδιο ακόμη και για μετρήσεις που έγιναν σε δείγματα με διαφορετικά σχήματα και ιστορία ή κατασκευασμένα απο διαφορετικά υλικά! Στην φυσική συμπυκνωμένης ύλης όπου προβλέψεις με τυπικές αποκλίσεις της τάξης του 10% θεωρούνται ικανοποιητικές τέτοιου είδους ακρίβεια δεν έχει προηγούμενο.

Το κβαντικό φαινόμενο Hall αποτελεί και μία απο τις λίγες περιπτώσεις όπου η κβαντική μηχανική εκδηλώνεται σε μακροσκοπική κλίμακα με άμεση συνέπεια την χρησιμότητά του για τον ακριβή υπολογισμό κβαντομηχανικών σταθερών π.χ. για την σταθερά της λεπτής υφής δίνει $\alpha^{-1} = \hbar c/e^2 = 137.035991 \pm 0.000008$ που συγκρίνεται με την διεθνώς αποδεκτή τιμή $\alpha^{-1} = 137.0364 \pm 0.00011$). Αποτελεί επομένως μια σπουδαία ανακάλυψη απ' την πλευρά της βασικής φυσικής με προφανή χρησιμότητα και στην εργαστηριακή τεχνολογία. Αλλά πριν υπεισέλθουμε στις λεπτομέρειες του φαινομένου και στις απόπειρες θεωρητικής ερμηνείας του θα προσπαθήσουμε να εισάγουμε τον αναγνώστη στην φυσική των ημιαγωγών.

Β.2. Ημιαγωγοί - Διατάξεις

Είναι γνωστό ότι υπάρχουν υλικά με υψηλή αγωγιμότητα που ονομάζονται αγωγοί (π.χ. τα μέταλλα) και υλικά με υπερβολικά χαμηλή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αγωγιμότητα, πρακτικά μηδέν, που ονομάζονται μονωτές (π.χ. τα διηλεκτρικά). Φανταστείτε ποιές θα ήταν οι συνέπειες αν ξαφνικά κάθε μονωτής γινόταν αγωγός ή το αντίστροφο στην καθημερινή μας ζωή. Π.χ. το φως θα έσβηνε και ο κόσμος θα βυθίζονταν στο σκοτάδι, αφού είναι γνωστό ότι όλος ο πολιτισμός μας βασίζεται σ' αυτή την διάκριση. Για να πάρουμε όμως μια αίσθηση του μεγέθους της αγωγιμότητας και του αντιστρόφου της (της αντίστασης) ας δώσουμε πρώτα τους απαραίτητους ορισμούς.

Αν σε ένα κομμάτι σύρμα μήκους L και διατομής S εφαρμοσθεί στα άκρα δυναμικό τάσης V αυτό διαρρέεται από ρεύμα έντασης I που δίνεται από τον νόμο του Ohm:

$$I = V/R, \qquad (B.2)$$

όπου R είναι η αντίσταση του αγωγού. Το αντίστροφο της αντίστασης (1/R) καλείται συνήθως (γενική) αγωγιμότητα και από εμπειρία πρέπει να είναι μεγαλύτερη για μεγαλύτερο σύρμα και μικρότερη διατομή ώστε

$$1/R = \sigma\, S/L\ . \qquad (B.3)$$

Ο συντελεστής αναλογίας σ είναι η ηλεκτρική (ειδική) αγωγιμότητα του σύρματος που φυσιολογικά εξαρτάται απο το υλικό του αγωγού. Αν αντικαταστήσουμε την (B.3) στην (B.2) και ορίσουμε ως πυκνότητα ρεύματος j ως το ρεύμα που διαρρέει αγωγό μοναδιαίας διατομής ο νόμος του Ohm διατυπώνεται και ως εξής:

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}, \qquad (B.4)$$

όπου E = V/L είναι το μέτρο του ηλεκτρικού πεδίου στα άκρα του αγωγού λόγω της διαφοράς δυναμικού V. Η αγωγιμότητα σ στην εξ. (B.4) δέχεται τυπικές τιμές της τάξης του $10^4\ \Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ για τα μέταλλα ενώ φθάνει σε περισσότερο από 19 τάξεις μεγέθους χαμηλότερα για τα διηλεκτρικά. Στην περίπτωση που η πυκνότητα του ρεύματος είναι το διδιάστατο άνυσμα $\vec{j} = j_x\cdot\vec{x} + j_y\cdot\vec{y}$ στο επίπεδο xy η σ είναι τανυστής που δίνεται από έναν 2 X 2 πίνακα ($j_i = \sigma_{ik}E_k$, με i,k = x,y) και ανεξάρτητες συνιστώσες σ_{xx} και σ_{xy} ($\sigma_{yx} = -\sigma_{xy}$ και $\sigma_{yy} = \sigma_{xx}$). Ο αντίστοιχος τανυστής της αντίστασης δίνεται από ένα πίνακα 2 X 2 και $E_i = \varrho_{ik}\cdot j_k$, με i,k = x,y και $\varrho_{yx} = -\varrho_{xy}$ και $\varrho_{yy} = \varrho_{xx}$. Έτσι έχουμε

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\sigma_{xx} = \frac{\varrho_{xx}}{\varrho_{xx}^2 + \varrho_{xy}^2}, \quad \sigma_{xy} = -\frac{\varrho_{xy}}{\varrho_{xx}^2 + \varrho_{xy}^2}, \tag{B.5}$$

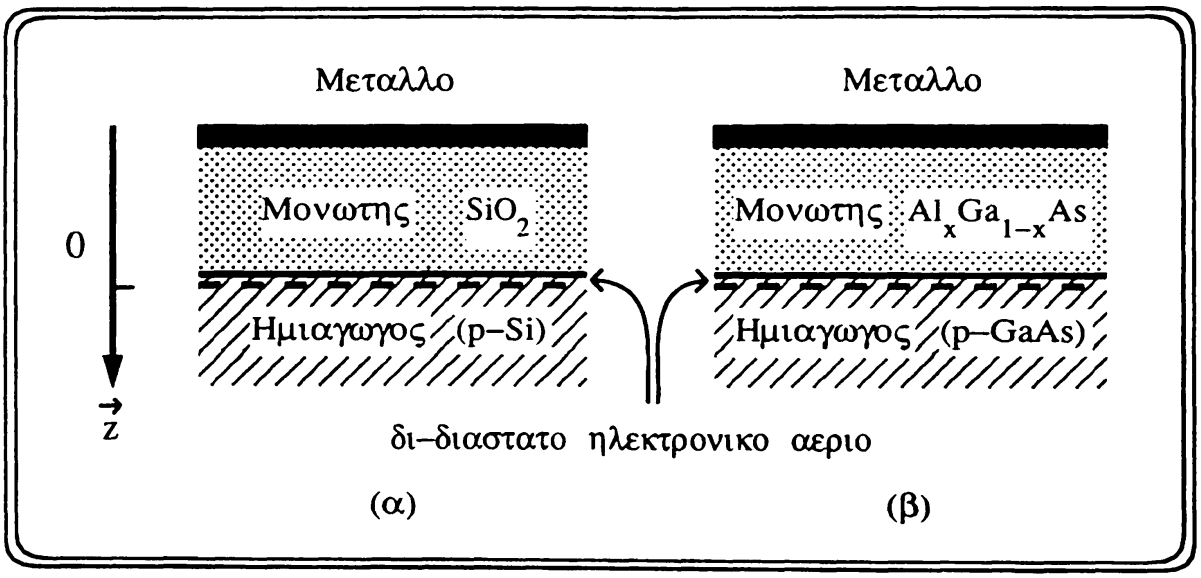
όπου ϱ_{xx} και ϱ_{xy} δίνονται από τις σχέσεις $\varrho_{xx} = E_x/j_x$, $\varrho_{xy} = -E_y/j_x = E_x/j_y$.

Είδαμε λοιπόν τυπικά μεγέθη αγωγιμότητας για αγωγούς και μονωτές. Υπάρχει όμως μια άλλη κατηγορία υλικών, οι ημιαγωγοί, με αγωγιμότητες σημαντικά μικρότερες των μετάλλων αλλά πολύ μεγαλύτερες των μονωτών. Οι αγωγιμότητες των ημιαγωγών κυμαίνονται στις ενδιάμεσες τιμές από 10^2 μέχρι $10^{-10}\ \Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$ και εμφανίζονται άλλες φορές ως μέταλλα και άλλες ως μονωτές. Π.χ. συμπεριφέρονται με διαφορετικό τρόπο απ' ότι τα μέταλλα στην επίδραση εξωτερικών παραγόντων όπως η θερμοκρασία. Από την άποψη θεωριών των ενεργειακών φασμάτων (ζωνών) η διαφορά μεταξύ ημιαγωγού και μονωτή είναι ποσοτική και προσδιορίζεται απο το εύρος του ενεργειακού χάσματος (περίπου 1eV για τους ημιαγωγούς και μερικά eV για τους μονωτές, ενώ το ενεργειακό χάσμα μηδενίζεται στα μέταλλα).

Η έρευνα στην φυσική των ημιαγωγών κατέχει εξέχουσα θέση στις μοντέρνες επιστήμες. Ο λόγος είναι ότι οι ημιαγωγοί αποτελούν το βασικό συστατικό ηλεκτρονικών συσκευών που όλοι γνωρίζουμε. Αυτές είναι οι γνωστές και με το όνομα διατάξεις που αποτελούν την βάση της σύγχρονης τεχνολογίας. Με την σειρά τους οι διατάξεις απαιτούν την ανάπτυξη σχεδόν τέλειων ημιαγώγιμων κρυστάλλων. Αυτό γίνεται με νέες πειραματικές τεχνικές όπως η επιταξία μοριακής δέσμης. Μια άμεση εφαρμογή των ημιαγωγών και ηλεκτρονικών διατάξεων με προφανείς συνέπειες για την τεχνολογική αναβάθμιση της χώρας είναι η χρησιμοποίησή τους ως ηλιακών συλλεκτών (όπως το πυρίτιο, Si, και μία τέτοια προσπάθεια άρχισε την τελευταία δεκαετία στο Ερευνητικό Κέντρο Κρήτης όπου είχα την χαρά να βρίσκομαι τα τελευταία χρόνια).

Επανερχόμεθα, μετά απο αυτό το σύντομο διάλειμμα, στις μετρήσεις του "ακεραίου" και του "κλασματικού" κβαντικού φαινομένου Hall όπου πρέπει να αναφέρουμε πως απαιτούν την μελέτη ενός διδιάστατου ηλεκτρονικού αερίου (αέριο φερμιονίων). Αυτό επιτυγχάνεται με δύο τρόπους: τις διατάξεις MOSFET και τις ετεροδομές GaAs. Στο Σχ. Β.3 φαίνονται οι διατομές σε ένα MOSFET πυριτίου (Metal-Oxide-Semiconductor-Field-Effect-Transistor) (Σχ. Β.3(a) όπου ο ημιαγωγός πυριτίου p-Si στην επιφάνεια είναι σε επαφή με ένα μονωτή SiO_2). Στο Σχ. Β.3(b) ο ημιαγωγός είναι p-GaAs ενώ ο μονωτής είναι

το κράμμα $AlGa_{1-x}As$ και η διάταξη είναι γνωστή ως ετεροδομή GaAs - $Al_xGa_{1-x}As$. Και στις δύο περιπτώσεις ένα ισχυρό ηλεκτρικό πεδίο περιορίζει την κίνηση των ηλεκτρονίων στην επιφάνειά του ημιαγωγού ώστε το διδιάστατο ηλεκτρονικό αέριο αποτελεί πραγματικότητα.



Σχ. Β. 3. Δύο διατάξεις δημιουργίας διδιάστατου ηλεκτρονικού αερίου φερμιονίων για την μέτρηση του Κβαντικού φαινομένου Hall στην επιφάνεια ημιαγωγού παρουσία εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου. **(α)** MOSFET πυριτίου **(β)** ετεροδομή GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$

Συγκεκριμένα, λόγω του πεδίου η ενέργεια που αντιστοιχεί στην κάθετη προς την διδιάστατη επιφάνεια κίνηση (δηλ. κατά μήκος του άξονα z) είναι κβαντισμένη σε ισαπέχουσες ενεργειακές στάθμες βήματος περίπου 20 MeV. Σε χαμηλές θερμοκρασίες και για όχι πολύ μεγάλη πυκνότητα φορέων μόνο μια στάθμη (η βασική) είναι κατειλημμένη και οι παραπάνω στάθμες μπορεί να αγνοηθούν, ώστε η κίνηση των ηλεκτρονίων να είναι για κάθε πρακτικό σκοπό διδιάστατη στο επίπεδο xy. Συνήθως η συγκέντρωση των φορέων (ηλεκτρόνια στην προκειμένη περίπτωση) είναι σταθερή για την ετεροδομή αλλά μεταβλητή στο MOSFET (αυτό επιτυγχάνεται με ένα άλλο δυναμικό που παράγει ηλεκτρόνια και είναι γνωστό ως δυναμικό θύρας).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Β.3. Διδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο (το κλασσικό φαινόμενο Hall)

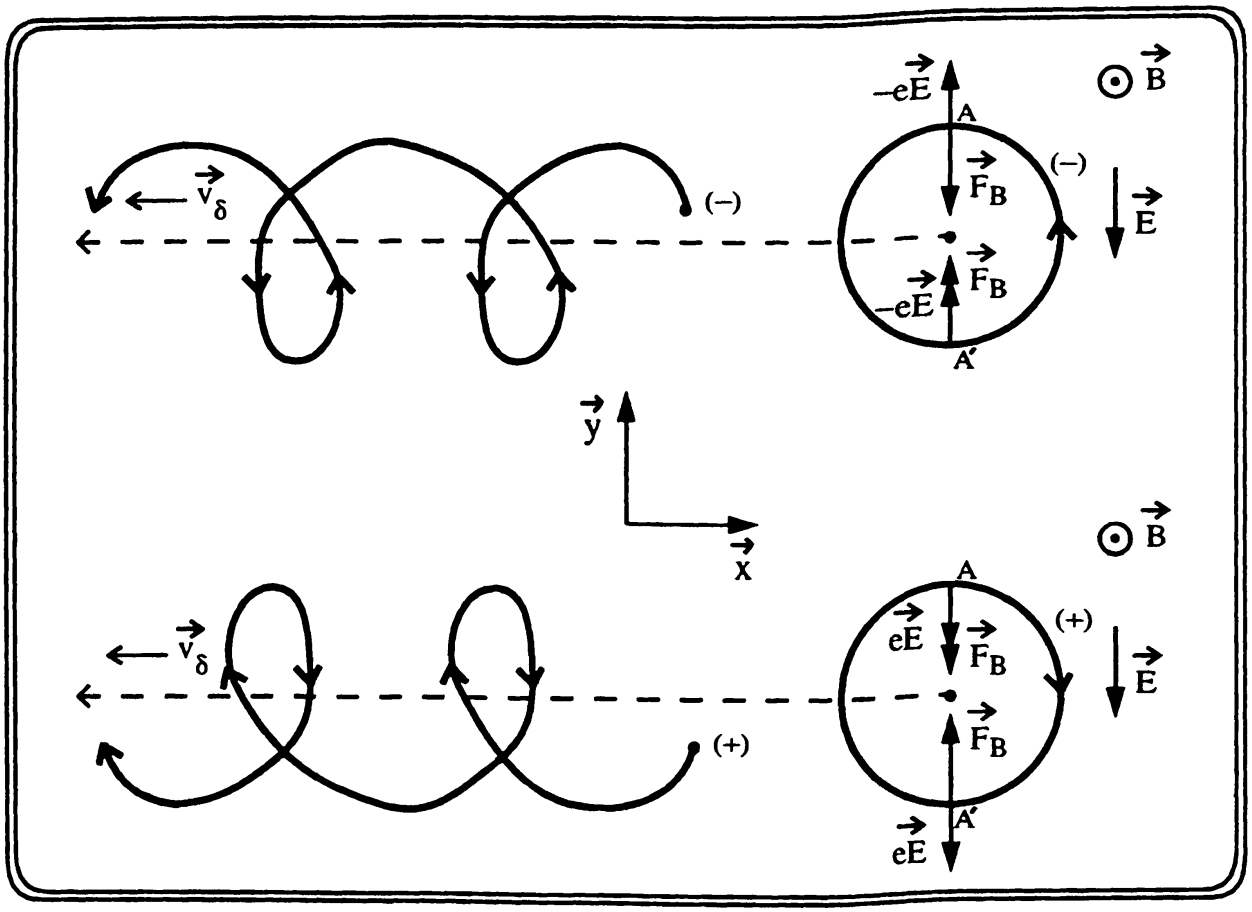
Η κίνηση ενός φορτίου q σε ηλεκτρικό πεδίο $\vec{E}$ και σταθερό μαγνητικό πεδίο $\vec{B}$ κάθετα μεταξύ τους διέπεται απο την δύναμη Lorenz

$$\vec{F} = q\,\vec{E} + \frac{q}{c}(\vec{v} \times \vec{B}) \qquad \text{(Β.6)}$$

με q το θετικό ή αρνητικό φορτίο. Όταν $\vec{E} = 0$ το σωμάτιο θα διαγράψει μιά κυκλική τροχιά στο επίπεδο xy, εφ' όσον έχει μιά αρχική ταχύτητα, λόγω του πεδίου $\vec{B}$. Το πεδίο $\vec{B}$ με φορά αυτήν του άξονα z εξασκεί στο σωμάτιο την δύναμη $(q/c)(\vec{v} \times \vec{B})$ με το φορτίο q θετικό ή αρνητικό ανάλογα με το φορτίο των σωματίων. Επειδή η διεύθυνση της δύναμης είναι κάθετη προς την ταχύτητα $\vec{v}$ και στο πεδίο $\vec{B}$ πρέπει να δράσει ως κεντρομόλος(Σχ. Β.4), με συνέπεια την κυκλική κίνηση του σωματίου. Η ακτίνα της κυκλικής τροχιάς (απο την εξίσωση των δυνάμεων $mv^2/r_B = qvB/c$) είναι $r_B = mvc/qB$. Επομένως, σε ισχυρότερα πεδία $\vec{B}$ οι τροχιές των σωματίων είναι μικρότερης ακτίνας r_B.

Αν το σωμάτιο, ταυτόχρονα με το μαγνητικό πεδίο ($\vec{B} = B\,\vec{z}$), τοποθετηθεί και σε ηλεκτρικό πεδίο $\vec{E}$ με αρνητική φορά στον άξονα των y ($\vec{E} = -E\,\vec{y}$) η σταθερής φοράς δύναμη λόγω του ηλεκτρικού πεδίου απο την εξ. (Β.6) αναμένεται να δημιουργήσει μιά συνεχή μεταβολή της κυκλικής τροχιάς. Απο το Σχ. Β.4.(α) φαίνεται πως για αρνητικά φορτισμένο σωμάτιο στο σημείο Α εξασκείται μικρότερη συνολικά δύναμη, αφού η συνιστώσα δύναμη λόγω του $\vec{B}$ κατευθύνεται πάντα προς το κέντρο του κύκλου, ενώ στο σημείο Α' μεγαλύτερη ενώ για το θετικά φορτισμένο σωμάτιο αναμένεται να συμβεί ακριβώς το αντίθετο. Επομένως, η ακτίνα της τροχιάς για το αρνητικά φορτισμένο σωμάτιο συνεχώς μειώνεται όταν το σωμάτιο διαγράφει την τροχιά απο το Α στο Α΄ ενώ συνεχώς αυξάνεται απο το Α΄ στο Α (Σχ. Β.4.(β). Αποτέλεσμα της συνδυασμένης δράσης των δύο δυνάμεων είναι μιά κυκλοειδής κίνηση.





Σχ. Β.4. Αναπαρίσταται η κλασσική κίνηση των αρνητικών (q=−e<0) και θετικών (q=e>0), όπου με e δηλώνεται η θετική τιμή του φορτίου, σε κάθετα μεταξύ τους ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία $\vec{E}$ και $\vec{B}$. Όταν $\vec{E} = 0$ το σωμάτιο παρουσία του μαγνητικού πεδίου εκτελεί κυκλική κίνηση στο επίπεδο. Με την ταυτόχρονη δράση και του ηλεκτρικού πεδίου η κίνηση γίνεται κυκλοειδής, γύρω απο ένα κέντρο οδήγησης με ταχύτητα διαφυγής v_δ.

Αν αναλύσουμε την κάθετη προς το $\vec{B}$ ταχύτητα $\vec{v}$ στις συνιστώσες $\vec{v}_\delta$ και $\vec{v}$

$$\vec{F} = q\,\vec{E} + \frac{q}{c}(\vec{v}_\delta \times \vec{B} + \vec{v} \times \vec{B}), \qquad \text{(B.7)}$$

ώστε $\vec{E} + \dfrac{\vec{v}_\delta \times \vec{B}}{c} = 0$ έχουμε

$$\vec{F} = \frac{q}{c}(\vec{v} \times \vec{B}) \qquad \text{(B.8)}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

που περιγράφει την κυκλική κίνηση. Για την επιπλέον ταχύτητα του σωματίου $\vec{v}_\delta$ απο την προηγούμενη συνθήκη ισχύει

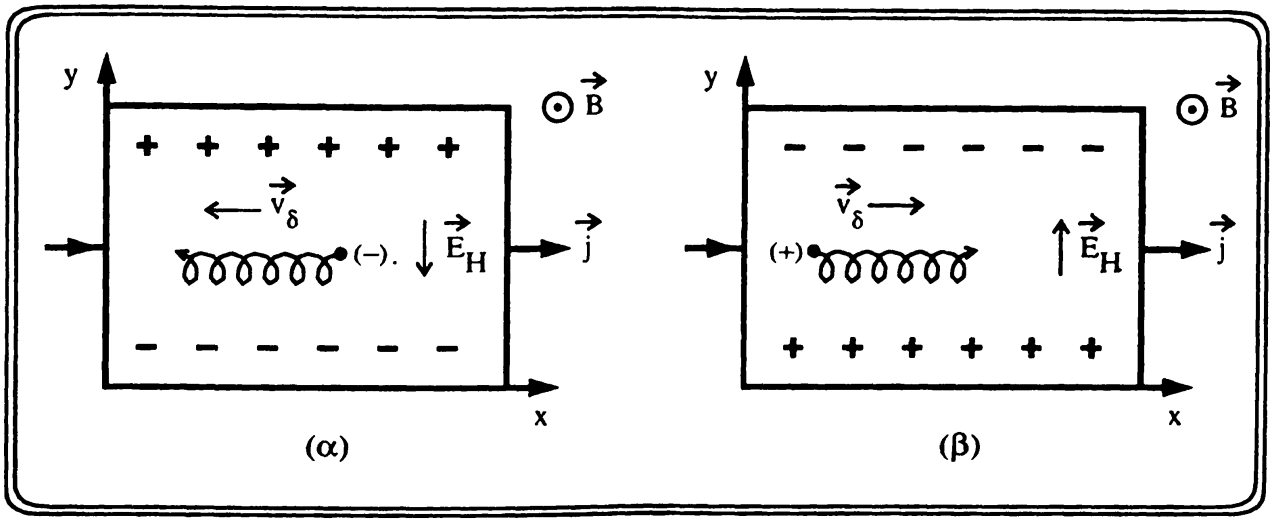
$$\vec{v}_\delta \times \vec{B} = -c\,\vec{E}$$

$$\vec{B} \times (\vec{v}_\delta \times \vec{B}) = -c\ \vec{B} \times \vec{E}$$

$$B^2 \vec{v}_\delta - (\vec{v}_\delta \cdot \vec{B})\ \vec{B} = c\ \vec{E} \times \vec{B} \qquad \text{(B.9)}$$

και αφού $\vec{v}_\delta \cdot \vec{B} = 0$ έπεται η σχέση

$$\vec{v}_\delta = c\,\frac{\vec{E} \times \vec{B}}{B^2}\ . \qquad \text{(B.10)}$$



Σχ. Β.5. Το κλασσικό φαινόμενο Hall για αρνητικούς (α) και θετικούς φορείς (β). Παρατηρούμε πως απο την μέτρηση της τάσης Hall V_H μέσω του πεδίου $\vec{E}_H$ προσδιορίζεται το πρόσημο των φορέων (ηλεκτρόνια ή οπές). Με μία παρόμοια διάταξη ο Hall το 1879 προσδιόρισε το αρνητικό φορτίο των ηλεκτρονίων που αργότερα επιβεβαίωσε ο Thomson. Με το ίδιο πείραμα μετρείται και η πυκνότητα των φορέων.

Η ταχύτητα $\vec{v}_\delta$ ονομάζεται ταχύτητα διαφυγής και είναι σταθερού μέτρου $v_\delta = cE/B$, ανεξάρτητη του είδους και της ποσότητας του κινουμένου φορτίου.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Επομένως, η κυκλοειδής κίνηση του σωματίου είναι δυνατόν να αναλυθεί σε μιά κυκλική ακτίνας αντιστρόφως ανάλογης του μαγνητικού πεδίου και μιά ευθύγραμμη κίνηση στην κάθετη διεύθυνση ως προς τα δύο πεδία με σταθερή ταχύτητα (την ταχύτητα διαφυγής v_δ). Προφανώς, η κυκλοειδής κίνηση εξαρτάται απο το πεδίο B. Για ισχυρά πεδία B το σωμάτιο εκετελεί την κυκλοειδή του κίνηση με κυκλική τροχιά μικρότερης ακτίνας και με μικρότερη ταχύτητα διαφυγής(εξ. B.10).

Εξοπλισμένοι τώρα με τις γνώσεις της κίνησης των φορτισμένων σωματίων σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο μπορούμε να περιγράψουμε το κλασσικό φαινόμενο Hall. Η διάταξη φαίνεται στο Σχ. B.1 με το ρεύμα $\vec{j}$ να διαρρέει την επιφάνεια με φορά προς τον θετικό άξονα x ενώ το διδιάστατο αέριο δέχεται και μαγνητική ροή λόγω του πεδίου $\vec{B}$ που έχει φορά προς τον κατακόρυφο άξονα z. Τα φορτισμένα σωμάτια (οι φορείς του ρεύματος) θα κινηθούν προς την κάθετη κατεύθυνση (τον y άξονα) και συσσωρεύονται στα άκρα δημιουργώντας ένα ηλεκτρικό πεδίο που αντιτίθεται σε περαιτέρω συσσώρευση. Το πεδίο αυτό ονομάζεται πεδίο Hall ($\vec{E}_H$) ενώ η διαφορά τάσης που δημιουργείται στα άκρα είναι το δυναμικό Hall V_H.

Όταν η ροή του ρεύματος είναι στον θετικό x άξονα $\vec{j} = j_x \vec{x}$ με $j_x>0$ οι αρνητικά φορτισμένοι φορείς (π.χ. ηλεκτρόνια) κινούνται με φορά προς τον αρνητικό x, λόγω της γνωστής σύμβασης, ενώ τα θετικά σωμάτια προς τον θετικό x, ώστε

$$j_x = \pm\, n_s\, e\, v_\delta \ , \qquad \text{(B.11)}$$

για θετικούς(+) η αρνητικούς(−) φορείς, ενώ n_s είναι η πυκνότητά τους (ο αριθμός τους ανα μονάδα επιφάνειας, στο διδιάστατο πρόβλημα). Σε συνθήκες ισορροπίας το πεδίο $\vec{E}_H$ ($=E_H\ \vec{y}$) δημιουργεί μιά δύναμη ($e\ E_H$) που αντισταθμίζει την δύναμη λόγω του $\vec{B}$ ($e\ v_\delta B/c$ με $v_\delta = j_x/n_s\, e$ απο την B.11) μηδενίζοντας έτσι την συνολική δύναμη στον y άξονα με πεδίο Hall

$$E_H = \pm\ \frac{B}{n_s\, e\, c}\, j_x \quad . \qquad \text{(B.12)}$$

Μπορεί να ορισθεί η ποσότητα, γνωστή και ως συντελεστής Hall,

$$R_H = \frac{E_H}{B\, j_x} = \pm\, \frac{1}{n_s\, e\, c} \quad , \qquad \text{(B.13)}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

που δεν εξαρτάται παρά απο την πυκνότητα των φορέων n_s και τις σταθερές e και c. Στην εξ. (B.13) η αρνητική τιμή του R_H αντιστοιχεί σε αρνητικούς φορείς (π.χ. ηλεκτρόνια) ενώ η θετική τιμή του σε θετικά φορτία (π.χ. οπές).

Οι μαγνητοαντίσταση $\rho_{xx} = E/j_x$ υπολογίζεται κατά μήκος της ροής του ρεύματος, είναι ανεξάρτητη του πεδίου B και δίνεται στο Σχ.B.2(α). Η αντίσταση Hall είναι ανάλογη του B αφού

$$\rho_{xy} = -E_H/j_x = -R_H B \quad , \qquad \text{(B.14)}$$

ενώ ο συντελεστής αναλογίας ($-R_H$) γίνεται θετικός ($R_H<0$) για ηλεκτρόνια. Από το Σχ.B.2(α) η κλίση της ευθείας επιτρέπει τον υπολογισμό του συντελεστή R_H.

Συνοψίζοντας, το κλασσικό φαινόμενο Hall μπορεί να ορισθεί ως η εμφάνιση ηλεκτρικού πεδίου $\vec{E}_H$ κάθετου στην ροή του ρεύματος που δημιουργείται απο την συσσώρευση φορτίων στα άκρα του δείγματος λόγω του πεδίου $\vec{B}$. Η κίνηση των φορέων γίνεται στο πεδίο $\vec{E}_H$ που σε συνδυασμό με το $\vec{B}$ δημιουργούν κυκλοειδείς τροχιές με διεύθυνση κάθετη στα πεδία και με σταθερή ταχύτητα μέτρου v_δ. Επιπλέον το κλασσικό φαινόμενο Hall επιτρέπει τον υπολογισμό του προσήμου (ηλεκτρόνια ή οπές) καθώς και της πυκνότητας των φορέων.

B.4. Η κβαντική περιγραφή

Η κίνηση σωματίου σε διδιάστατο επίπεδο και μαγνητικό πεδίο κάθετο $\vec{B}$ προς αυτό στα πλαίσια της κβαντικής μηχανικής περιγράφεται απο την Χαμιλτονιανή

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m}[\vec{p} - (e/c)\vec{A}]^2, \quad \text{με} \quad \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B} \quad . \qquad \text{(B.15)}$$

Για να διευκολύνουμε την ροή των πράξεων θα θέσουμε όλες τις σταθερές ħ, c, e και m ίσες με την μονάδα. Άρα, στην διδιάστατη περίπτωση

$$H_0 = \frac{1}{2}[\pi_x^2 + \pi_y^2], \qquad \text{(B.16)}$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με το διάνυσμα $\vec{\pi} = \vec{p} - \vec{A}$ να εκφράζει την γενικευμένη ορμή. Ο μεταθέτης των συνιστωσών της γενικευμένης ορμής είναι

$$[\pi_x, \pi_y] = [p_x - A_x , p_y - A_y]$$

$$= - [p_x, A_y] + [p_y, A_x]$$

$$= i (\partial A_y/\partial x) - i (\partial A_x/\partial y)$$

$$= i (\vec{\nabla} \times \vec{A})_z = i B \ . \qquad \text{(B.17)}$$

Παρατηρούμε οτι οι σχέσεις (B.16) και (B.17) είναι ανάλογες με τις σχέσεις που ισχύουν για τον μονοδιάστατο απλό αρμονικό ταλαντωτή όπου

$$H_o = \frac{1}{2} [p_x^2 + x^2], \qquad \text{(B.18)}$$

και

$$[x , p_x] = i \ . \qquad \text{(B.19)}$$

Αν ορίσουμε και στην περίπτωσή μας τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής

$$a = \frac{\pi_y - i \pi_x}{\sqrt{2B}} \quad \text{και} \quad a^+ = \frac{\pi_y + i \pi_x}{\sqrt{2B}} \ , \qquad \text{(B.20)}$$

είναι εύκολο να δειχθεί πως η Χαμιλτονιανή H_o γράφεται στην μορφή

$$H_o = B (a^+ a + \frac{1}{2}). \qquad \text{(B.21)}$$

Η H_o έχει ενεργειακό φάσμα ιδιοτιμών

$$\varepsilon_n = B (n + \frac{1}{2}), n=0, 1, 2, ... \ , \qquad \text{(B.22)}$$

που είναι γνωστό και ως φάσμα του Landau. Οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις είναι τα γνωστά πολυώνυμα Legendre. Στο βιβλίο των Landau και Lifshitz ο αντίστοιχος υπολογισμός γίνεται στην ειδική περίπτωση επιλογής βαθμίδας όπου το διανυσματικό δυναμικό έχει συνιστώσες $A_x = -By$ και $A_y = A_z = 0$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η κατανόηση της λύσης που δώσαμε επιτυγχάνεται πιο εύκολα σε μια οιονεί-κλασσική ερμηνεία, κατά την οποία οι συντεταγμένες του κύκλου της τροχιάς στην κλασσική κίνηση στο επίπεδο είναι

$$X = \frac{\pi_y}{B} + x \quad \text{και} \quad Y = -\frac{\pi_x}{B} + y \ , \tag{B.23}$$

με

$$[X \ , \ Y] = \frac{1}{i\,B} \ . \tag{B.24}$$

Επειδή οι συντεταγμένες του κέντρου του κύκλου X και Y μετατίθενται με την Χαμιλτονιανή υπάρχει ή δυνατότητα γνώσης των τιμών τους ξεχωριστά, όχι όμως και ταυτόχρονα λόγω της (B.24). Άρα υπάρχει απροσδιοριστία στην τοποθέτηση του κύκλου στο επίπεδο και αυτό μπορεί να γίνει με διαφορετικούς τρόπους δίνοντας όμως την ίδια ενέργεια (εκφυλισμός). Ο εκφυλισμός των σταθμών του Landau είναι ανάλογος του B αφού αν αποκατασταθούν οι μονάδες ($\hbar=h/2\pi$, e, c, m) είναι

$$\varepsilon_n = \hbar\,\omega_B\,(n + \frac{1}{2}), \qquad n=0, 1, 2, \ldots \ , \tag{B.25}$$

με

$$\omega_B = \frac{eB}{mc} \tag{B.26}$$

την χαρακτηριστική συχνότητα (κυκλότρου). Επειδή η πυκνότητα καταστάσεων στον διδιάστατο χώρο, με απουσία του σπιν, είναι όπως είδαμε στο Κεφ. 6, Ασκ.1, $Am/2\pi\hbar^2$ (ανεξάρτητη της ενέργειας) ο αριθμός καταστάσεων στο ενεργειακό διάστημα $\hbar\omega_B$ μεταξύ δύο διαδοχικών σταθμών Landau δίνεται απο το γινόμενο

$$N_o = \hbar\omega_B \ (Am/2\pi\hbar^2) = A\,\frac{eB}{hc}, \tag{B.27}$$

που προσδιορίζει τον εκφυλισμό της κάθε στάθμης Landau.

Ο εκφυλισμός που μόλις υπολογίσαμε μπορεί να εκτιμηθεί και απο το μοίρασμα του διαθέσιμου διδιάστατου χώρου A, όπως το μάθαμε στο Κεφ. 2. Οδηγούμεθα στην (B.27) αν πρώτα από την (B.24) (με αποκατάσταση των μονάδων ο μεταθέτης στην σχέση αυτή δίνει hc/ieB) σκεφθούμε πως κάθε μία

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κυκλική τροχιά καταλαμβάνει εμβαδόν hc/eB* και ο εκφυλισμός είναι το πηλίκο του A με αυτόν τον αριθμό.

Το βασικό αποτέλεσμα αυτού του κεφαλαίου για το διδιάστατο αέριο ελεύθερων ηλεκτρονίων παρουσία κάθετου μαγνητικού πεδίου ήταν η εμφάνιση των διακριτών ενεργειακών σταθμών του Landau. Επίσης, προσδιορίθηκε ο εκφυλισμός της κάθε μιάς στάθμης και ευρέθη ανάλογος του πεδίου B.

B.5. Το κβαντικό φαινόμενο Hall παρουσία τυχαιότητας

Είδαμε ότι η συμπεριφορά της μαγνητοαντίστασης ρ_{xx} και της αντίστασης Hall ρ_{xy} σε εξαιρετικά ισχυρά πεδία (περίπου 10^6 Gauss) και αρκετά χαμηλές θερμοκρασίες είναι πολύ διαφορετική απ' ότι για χαμηλότερα πεδία, στις συνηθισμένες συνθήκες του κλασσικού φαινομένου Hall. Οι παραπάνω συνθήκες αφορούν την ανακάλυψη του K. von Klitzing (Σχ.B.2 (β)) που είναι γνωστή με το όνομα κβαντικό φαινόμενο Hall. Η ρ_{xy} δείχνει μιά σειρά απο πλατώ σαν συνάρτηση του πεδίου B ενώ στα ίδια διαστήματα που εμφανίζονται τα πλατώ η ρ_{xx} μηδενίζεται. Για τις ενδιάμεσες τιμές του B η αντίσταση ρ_{xy} αυξάνει ομαλά ενώ η ρ_{xx} είναι διάφορη του μηδενός. Αλλά η παρουσία των πλατώ δεν είναι το μόνο εύρημα στο κβαντικό φαινόμενο Hall: Εμφανίζονται, επιπλέον, στα πλατώ ιδανικές τιμές της ρ_{xy} που δίνονται απο την εξ. (B.1) επιτρέποντας τον υπολογισμό βασικών σταθερών της κβαντικής με εξαιρετικά μεγάλη ακρίβεια. Τέλος εντύπωση προκαλεί στο κβαντικό φαινόμενο το γεγονός ότι η τυχαιότητα, λόγω της παρουσίας προσμίξεων του υποστρώματος ή απο άλλες αιτίες, δεν επηρεάζει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων και κυρίως τις ιδανικές τιμές της ρ_{xy}!

Παρ' όλο που η πλήρης εξήγηση του φαινομένου δεν έχει γίνει ακόμη υπάρχουν αρκετά ικανοποιητικές θεωρίες που ερμηνεύουν τα βασικά αποτελέσματα που εκθέσαμε παραπάνω. Αναφέρθηκε, ήδη, ότι το φαινόμενο όχι μόνο δεν το προέβλεψε καμμία θεωρητική μελέτη αλλά ούτε η παραμικρή υποψία δεν υπήρξε για την εμφάνισή του. Μπορούμε όμως για τα πλαίσια αυτού του συγγράμματος να περιορισθούμε σε μιά απλή ποιοτική εξήγηση που

* Ακριβώς όπως όταν $[x, p] = i\hbar$, παίρνουμε ότι το εμβαδόν μιας κβαντικής κατάστασης είναι $2\pi\hbar = h$.

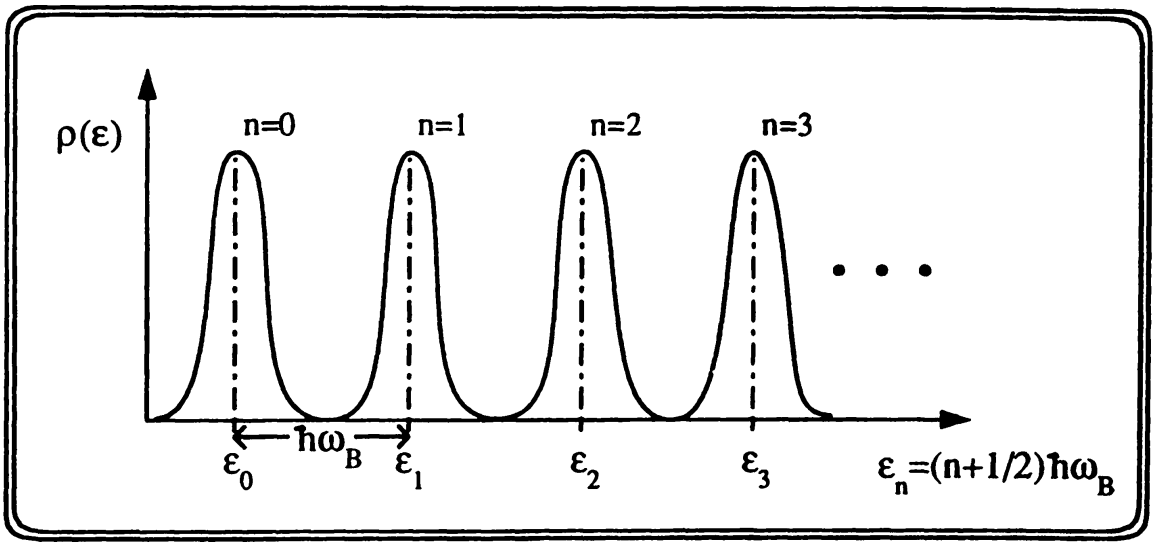
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

βασίζεται σε ιδέες της οιονεί-κλασσικής φυσικής και στην θεωρία του αερίου Fermi (Κεφ.6).

Απο την εξ. (B.14) η αντίσταση Hall γράφεται όταν οι φορείς είναι ηλεκτρόνια

$$\varrho_{xy} = \frac{B}{n_s e c} \quad . \tag{B.28}$$

ενώ επιπλέον, για ορισμένη τιμή του B, οι ενεργειακές στάθμες του Landau διατάσσονται όπως στο Σχ. B.6 με τις ενεργειακές ιδιοτιμές που δίνονται απο την εξ. (B.25) να είναι ισαπέχουσες με ενεργειακό βήμα $\hbar\omega_B$ ενώ για γνωστή πυκνότητα n_s των φορέων (στην περίπτωσή μας ηλεκτρόνια) ορίζεται και η



Σχ. B.6. Το ενεργειακό φάσμα του διδιάστατου ελεύθερου ηλεκτρονικού αερίου σε κάθετο μαγνητικό πεδίο μέτρου B μέσω της αντίστοιχης πυκνότητας καταστάσεων (με διακεκομμένες γραμμές). Κάθε ενεργειακή στάθμη Landau παρουσιάζει (εξ. B.27) εκφυλισμό N_0. Όταν στην Χαμιλτονιανή του ελεύθερου αερίου H_0 (εξ. B.16) προστεθεί και περιοδικό δυναμικό (π.χ. που οφείλεται στην παρουσία του περιοδικού πλέγματος) ή τυχαίο δυναμικό που οφείλεται σε προσμίξεις (ή ατέλειες) οι ενεργειακές στάθμες γίνονται ζώνες (με συνεχείς γραμμές). Οι ζώνες είναι γνωστές και με το όνομα υποζώνες του Landau. Στα άκρα κάθε ζώνης παρουσία του τυχαίου δυναμικού οι καταστάσεις είναι εντοπισμένες (δεν άγουν ρεύμα) και αντιστοιχούν στα πλατώ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ενέργεια Fermi ε_F (Κεφ. 6). Αφού η ε_F δηλώνει την ενέργεια της υψηλότερης κατειλημμένης στάθμης όταν ευρίσκεται ανάμεσα απο τις στάθμες n και n+1 τότε

$$n_s = n \frac{N_o}{A} \quad , \tag{B.29}$$

όπου N_0 είναι ο εκφυλισμός της κάθε μιάς στάθμης (προσδιορίσθηκε στην εξ. B.27). Ο n N_0 είναι ο ολικός αριθμός καταστάσεων στις γεμισμένες στάθμες, μέχρι και την στάθμη n, με ίσο αριθμό ηλεκτρονίων N_0 σε κάθε μία από αυτές, και A το εμβαδόν της επιφάνειας. Απο την εξ. (B.27) αντικαθιστούμε τον εκφυλισμό της κάθε στάθμης N_0, ώστε

$$n_s = n \frac{eB}{hc} \quad , \tag{B.30}$$

και με αντικατάσταση στην (B.28)

$$\varrho_{xy} = \frac{h}{ne^2} \quad , \tag{B.31}$$

που για N=n ισοδυναμεί με την (B.1). Επομένως συμπεραίνουμε πως ο ακέραιος αριθμός N στην εξίσωση (B.1) αντιπροσωπεύει το γέμισμα των N χαμηλότερων διαδοχικών σταθμών του Landau.

Άρα, σε μία ισοδύναμη περιγραφή με αυτήν του Σχ.B.2 όπου τώρα υπολογίζονται η διαμήκης τάση (V) και η κάθετη τάση (V_H) στο δείγμα συναρτήσει της ενέργειας Fermi ε_F (την αυξάνουμε δίνοντας περισσότερα ηλεκτρόνια στο σύστημα), για τιμές της ε_F μεταξύ των σταθμών του Landau η διαμήκης τάση V = 0 ενώ η τάση Hall V_H (έχει τιμή μερικών mV) δίνει τα πλατώ. Οι τιμές της τάσης Hall στα πλατώ είναι $V_H = \varrho_{xy}$ I, όπου η ϱ_{xy} δίνεται απο την εξ. (B.31) και χαρακτηρίζεται επίσης απο τον (ακέραιο) αριθμό N που μετράει τον αριθμό των γεμισμένων σταθμών του Landau. Άν αλλάξει η τιμή του B σε μιά ισοδύναμη περιγραφή, προφανώς, αλλάζει το ενεργειακό βήμα μεταξύ των σταθμών Landau αλλά και ο εκφυλισμός της κάθε στάθμης. Επομένως, με αύξηση του B, αφού αυξάνουν και ο εκφυλισμός και το ενεργειακό βήμα, μικραίνει ο ακέραιος N, ώστε τώρα, για σταθερή τιμή της ενέργειας Fermi, μπορούν να υπολογισθούν οι γραφικές παραστάσεις του Σχ. B.2 (δηλ. των αντιστάσεων συναρτήσει του πεδίου B).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Η παραπάνω διερεύνηση εξηγεί την παρουσία των ακέραιων τιμών της αντίστασης στην εξ. (Β.1) απο το γέμισμα των αντίστοιχων σταθμών Landau αυξάνοντας την ενέργεια Fermi. Όμως, απο αυτή την εξήγηση προβλέπεται μεν η παρουσία των πλατώ στις ιδανικές τιμές με μιά απότομη σκάλα για την αντίσταση Hall, όχι όμως και των ενδιάμεσων πεπερασμένων διαστημάτων μεταξύ των πλατώ. Για να δικαιολογηθούν αυτά πρέπει το εύρος της κάθε στάθμης του Landau απο σημειακό να γίνει πεπερασμένο. Με άλλα λόγια, απο τις ατομικές ενεργειακές στάθμες πρέπει να πάμε σε συνεχείς ενεργειακές ζώνες του Landau (ή υποζώνες Landau). Πως όμως θα γίνει αυτό;

Η περιγραφή του ελεύθερου ηλεκτρονικού αερίου μπορεί να βελτιωθεί αν προστεθεί και το περιοδικό δυναμικό V(x,y) λόγω του διδιάστατου πλέγματος, ώστε

$$H = H_0 + V(x,y), \qquad (B.32)$$

με

$$V(x,y) = \cos(ax) + C\cos(ay), \quad C=\sigma\tau\alpha\theta. \ , \qquad (B.33)$$

όπου a η απόσταση μεταξύ των θέσεων του πλέγματος. Σε αυτήν την περίπτωση μπορεί να δειχθεί (μετά απο πράξεις που ξεφεύγουν τα πλαίσια αυτού του βιβλίου, στα όρια ισχυρού πεδίου B και ασθενούς δυναμικού V) ότι, παρ' όλο που το πρόβλημα είναι διδάστατο, καταλήγουμε σε μία μονοδιάστατη εξίσωση! Στην διακριτή μορφή η εξίσωση αυτή του Schrondinger (για a=1) είναι του τύπου

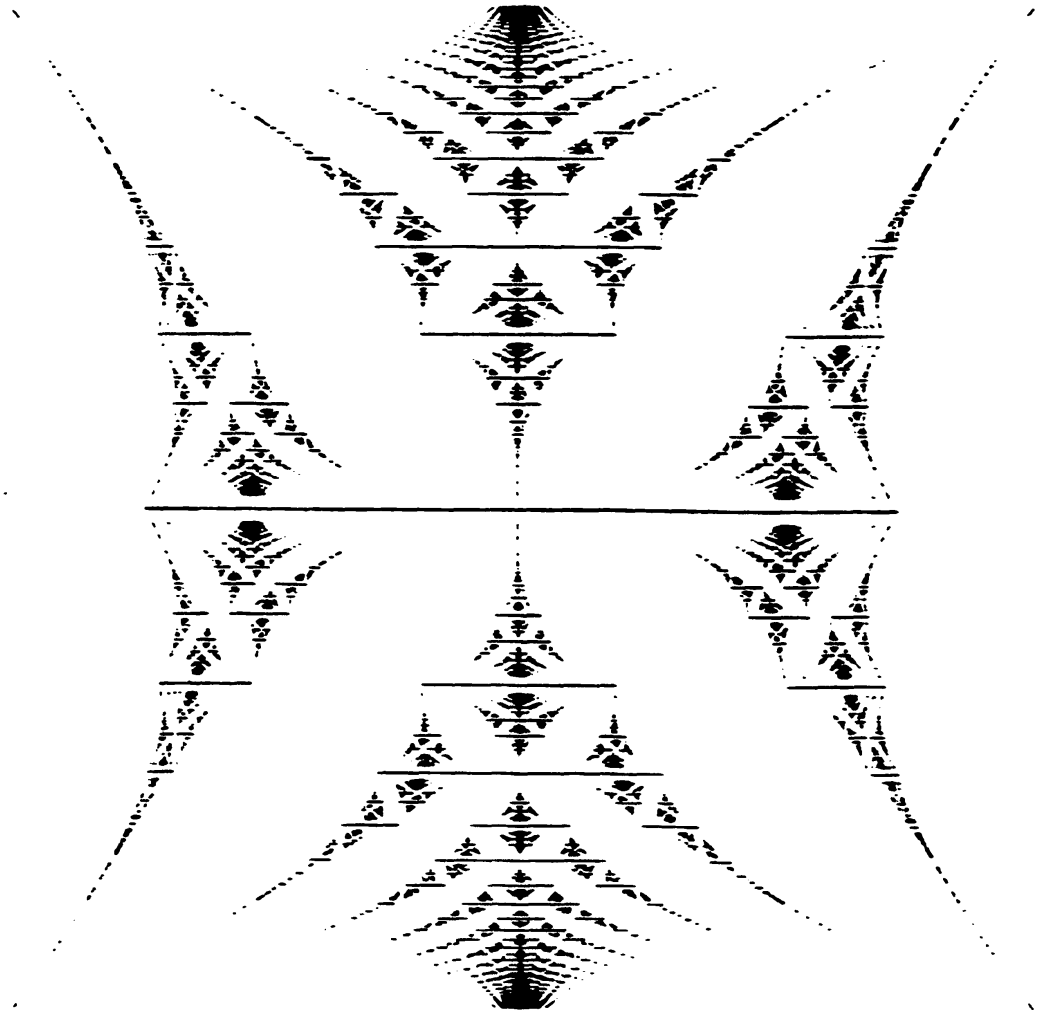
$$\varepsilon \Psi_m = 2\cos(2\pi\, m\, \alpha)\, \Psi_m + \Psi_{m-1} + \Psi_{m+1}, \quad m=1,2,..., \qquad (B.34)$$

όπου $\alpha = \Phi/\Phi_0$ είναι ο λόγος της μαγνητικής ροής είναι $\Phi = B\, a^2$ λόγω του πεδίου B που διαρρέει την στοιχειώδη πλεγματική επιφάνεια (κυψελίδα) a^2 διά το κβάντο ροής $\Phi_0 = hc/e$ και μετράει τον αριθμό των κβάντων ροής ανά πλεγματική κυψελίδα. Το ενεργειακό φάσμα της εξ. (Β.34) συναρτήσει του αριθμού α δίνεται στο Σχ.Β.7 που δείχνει μια μορφοκλασματική δομή που μοιάζει με πεταλούδα. Για ρητούς αριθμούς α=p/q εμφανίζονται ακριβώς q υποζώνες του Landau. Την εξίσωση αυτή για άρρητο α την έχουμε μελετήσει (και προσωπικά), ποικιλοτρόπως, στα πλαίσια της θεωρίας του ηλεκτρονικού αερίου σε οιονεί-περιοδικό δυναμικό. Το οιονεί περιοδικό δυναμικό αποτελεί

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

μιά ενδιάμεση περίπτωση. Δεν είναι ούτε περιοδικό αλλά ούτε και τυχαίο δυναμικό.

Γιά τυχαίο δυναμικό V(x,y) που μεταβάλλεται στατιστικά σε κάθε θέση του χώρου x και y ο αντίστοιχος διδιάστατος υπολογισμός είναι εξαιρετικά δύσκολος και πρέπει να καταφύγουμε σε προσεγγιστικούς τρόπους λύσης. Οι στάθμες του Landau και σε αυτήν την περίπτωση διευρύνονται ενεργειακά ενώ μόνο στο κέντρο της κάθε ζώνης οι καταστάσεις είναι εκτεταμένες σε όλο το σύστημα, ενώ στα άκρα είναι εντοπισμένες και αντιστοιχούν στα πλατώ για



Σχ. Β.7. Οι ενεργειακές ζώνες Landau απο την εξ. (Β.34) για τιμές της παραμέτρου α(που εξαρτάται απο το μαγνητικό πεδίο Β). Στον οριζόντιο άξονα είναι οι ζώνες του Landau για το άπειρο διδιάστατο πλέγμα με ενέργεια στο διάστημα [−4,4] ενώ ο κατακόρυφος άξονας είναι ο αριθμός α στο διάστημα [0,1]. Παρατηρούμε πως όταν α=p/q, υπάρχουν q ενεργειακές ζώνες (π.χ. για α=1/3 ή 2/3 εμφανίζονται 3 ζώνες). Αν ο α είναι άρρητος αριθμός ($q\to\infty$) τότε οι ζώνες γίνονται μορφοκλασματικής δομής (μέτρου μηδέν).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

την ρ_{xy} και στη μηδενική αντίσταση για ρ_{xx}. Στις κεντρικές καταστάσεις κάθε ζώνης αντιστοιχεί αυξάνουσα ρ_{xy} και μη μηδενικές τιμές της αντίσταση ρ_{xx}. Το αποτέλεσμα αυτό απαρουσιάζει μιά ασυνέπεια σε σχέση με την θεωρία του εντοπισμού αφού αναμένεται ότι όλες οι καταστάσεις είναι εντοπισμένες στον διδιάστατο χώρο.

Το συμπέρασμα, όμως, αυτό πρέπει να τροποποιηθεί παρουσία μαγνητικού πεδίου που φαίνεται να επιτρέπει, τουλάχιστον, μία μη εντοπισμένη κατάσταση στο κέντρο της κάθε υποζώνης του Landau και την παρουσία του ρεύματος Hall! Στην τρέχουσα ερευνητική προσπάθεια πλήρους ερμηνείας του κβαντικού φαινομένου Hall συμμετέχουμε και προσωπικά με την μελέτη της κβαντικής μηχανικής των ηλεκτρονίων παρουσία τυχαίου δυναμικού και της αντίστοιχης κβαντικής μετάβασης μετάλλου (μη εντοπισμένες κυματοσυναρτήσεις)-μονωτή (εντοπισμένες κυματοσυναρτήσεις).

Β.6. Συμπεράσματα-εφαρμογές

Είδαμε τα αποτελέσματα των μετρήσεων για το ηλεκτρονικό αέριο στις δύο διαστάσεις που έγινε πραγματικότητα χάρις στις κατάλληλες ηλεκτρονικές διατάξεις. Πρέπει να σημειωθεί πως το κβαντικό φαινόμενο Hall απαιτεί υπέρμετρα μεγάλες τιμές του μαγνητικού πεδίου Β ενώ τα αποτελέσματα είναι ανεξάρτητα του υλικού στο οποίο γίνονται οι μετρήσεις αλλά και της αταξίας που ενδεχομένως αυτό παρουσιάζει. Γι' αυτό απετέλεσε μιά έκπληξη πρώτου μεγέθους η ανακάλυψή του φαινομένου κυρίως λόγω της ακρίβειας με την οποία επιτρέπει την εκτίμηση των βασικών κβαντικών σταθερών. Η εξήγησή του βασίζεται στην κβάντωση των ενεργειακών σταθμών παρουσία μαγνητικού πεδίου (στάθμες του Landau). Το κλασματικό φαινόμενο Hall που εμφανίζεται για μη ακέραιες τιμές του N (εξ. Β.1) απαιτεί επιπλέον για την ερμηνεία του νέες ιδέες, όπως τα ανιόνια (σωμάτια κλασματικού φορτίου), κ.λ.π., ξεφεύγοντας απο τους σκοπούς του παρόντος συγγράμματος.

Η φυσική της συμπυκνωμένης ύλης έχει το πλεονέκτημα να παρουσιάζει μιά ποικιλία εφαρμογών, π.χ. οι νέες διατάξεις χρησιμοποιούνται στην κατασκευή μικροκυκλωμάτων, κ.λ.π. Το κβαντικό φαινόμενο Hall όμως έχει, κυρίως, εφαρμογές στον εργαστηριακό χώρο όπως τον κλάδο της μετρολογίας

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

που ασχολείται με την βελτίωση της ακρίβειας των τιμών για τις θεμελιώδεις σταθερές ενώ είναι προφανής η ωφέλεια απο την ύπαρξη βελτιωμένων σταθερών σε όλους τους κλαδους της φυσικής. Τα αποτελέσματα με το κβαντικό φαινόμενο Hall είναι εφάμιλλα, αν όχι καλύτερα, π.χ. για την σταθερά της λεπτής υφής, απο την ακρίβεια των τιμών που προκύπτει απο άλλες μεθόδους.

Τέλος, η ανακάλυψη του φαινομένου, που σας περιέγραψα τα αδρά χαρακτηριστικά, είναι προιόν πειραματικής έρευνας με φαντασία και επιμονή. Αποτελεί ένα καλό παράδειγμα για το πως πρέπει να γίνεται αυτή η έρευνα που έχει ως σκοπό να μελετήσει τα φυσικά φαινόμενα και να ανακαλύψει τους νόμους που τα διέπουν. Το κβαντικό φαινόμενο Hall, που συμβαίνει εκεί που δεν το περιμένουμε, είναι ιδιαίτερα σημαντικό γιατί δείχνει την κβαντική μηχανική του μικρόκοσμου σε μακροσκοπική κλίμακα. Τέτοια φαινόμενα είναι λίγα στην φυσική (π.χ. το φαινόμενο Josephson στην θεωρία της υπεραγωγιμότητας) και αξίζουν το ενδιαφέρον μας για την προσεκτική μελέτη τους.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Λίγες αναφορές:

1. **Halperin B.I.,** Scientific American, Τεύχος Απριλίου , σελ.40 (1986).
2. **von Klitzing K.,** Rev. Mod. Phys., 58, 519, (1986).
3. **Landau L. and Lifshitz E.M.,** "Quantum Mechanics" , Pergamon Press.
4. **Ashcroft and Mermin,** "Solid State Physics" , (1976).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ

ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΔΙΗΘΗΣΗΣ

Γ.1 Μη περιοδικά συστήματα

Γ.2 Το πρόβλημα της διήθησης

Γ.3 Ορισμοί: p_c, $P(p)$, $\sigma(p)$

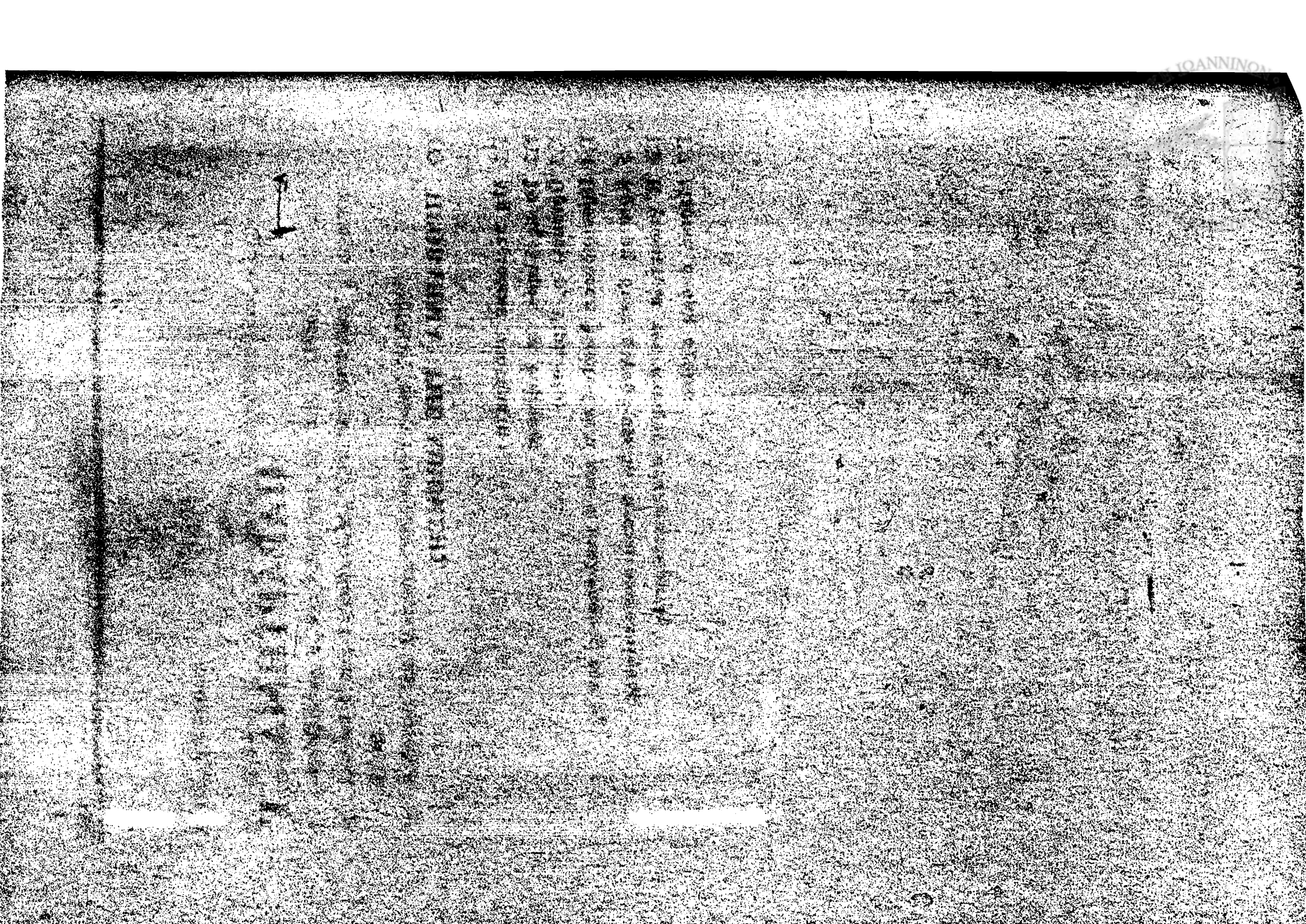
Γ.4 Προσομοίωση Monte-Carlo και ο υπολογισμός του p_c

Γ.5 Κρίσιμη συμπεριφορά-ομάδα ανακανονικοποίησης

Γ.6 Η γεωμετρία του άπειρου συσσωματώματος

Γ.7 Μερικά ακόμη σχόλια

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΔΙΗΘΗΣΗΣ

Γ.1. Μή περιοδικά συστήματα

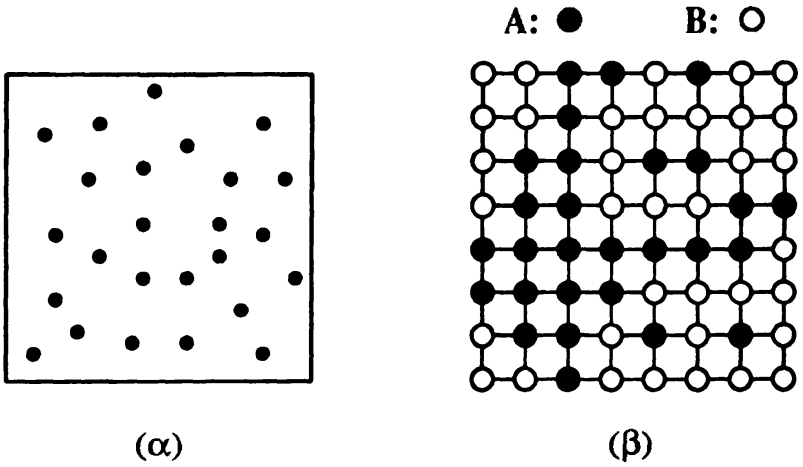
Στην περιοχή της φυσικής της συμπυκνωμένης ύλης τα περιοδικά πλεγματικά συστήματα παρουσιάζουν τάξη σε μεγάλη εμβέλεια. Για τις ηλεκτρονικές ιδιότητες των κρυστάλλων υπάρχει στα πλαίσια της στατιστικής φυσικής μια ενοποιημένη θεωρία, γνωστή και ως θεωρία ζωνών, που εκμεταλεύεται την περιοδικότητα του κρυστάλλου με την εφαρμογή του θεωρήματος του Bloch. Γιά την εξήγηση των αντίστοιχων ιδιοτήτων στους σιδηρομαγνήτες Heisenberg και Ising απαιτούνται οι έννοιες της σπασμένης συμμετρίας, της μιας παραμέτρου τάξης, του θεωρήματος του Goldstone (για τον σιδηρομαγνήτη του Heisenberg) κ.λ.π., που αποδεικνύονται ικανές για την δημιουργία απλών θεωριών μέσου πεδίου που έχουν γενική ισχύ.

Το παρόν κεφάλαιο ασχολείται με άτακτα (ή άμορφα) συστήματα στα οποία τον πρωτεύοντα ρόλο παίζει η τυχαιότητα. Τα περισσότερα υλικά που υπάρχουν στην φύση περιέχουν, αναγκαστικά, ένα μικρό ή μεγάλο ποσοστό αταξίας, π.χ. η αταξία υπάρχει στα γυαλιά, τα πολυμερή, τα γυαλιά από σπιν, κ.λ.π. Νέες θεωρήσεις και έννοιες που προκύπτουν από την μελέτη των μη περιοδικών στερεών είναι ο εντοπισμός των ιδιοσυναρτήσεων (Anderson, 1958), η ματαιοπονία (Toulouse, 1977), η σπασμένη συμμετρία των ανακατασκευών και οι πολλές παράμετροι τάξης (Parisi, 1980), κ.λ.π. Η παρουσία της αταξίας εκτός απο την φυσική της συμπυκνωμένης ύλης είναι ιδιαίτερα σημαντική, με άμεσες συνέπειες, και σε άλλους κλάδους των επιστημών, όπως π.χ. στην βιολογία.

Τα περιοδικά συστήματα παρουσιάζουν συμμετρία σε μετατοπίσεις με αυτό το αποτέλεσμα να οδηγεί σε μια πλήρη περιγραφή του κρυστάλλου. Φανταστείτε, τώρα, ένα υγρό. Σε αυτό δεν υπάρχει κανενός είδους συμμετρία στην δομή παρά μόνο ισχυρές αλληλεπιδράσεις και συσχετίσεις των ατόμων που το αποτελούν. Στην πιό ακραία περίπτωση ένα αέριο είναι αυτό που, αναμφισβήτητα, επιδεικνύει την απόλυτη αταξία. Εδώ θα μας απασχολήσει περισσότερο η αταξία στα στερεά και αναφέρουμε, ευθύς αμέσως, δύο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

τουλάχιστον τρόπους για την επίτευξή της: (i). Η αταξία δόμησης που ορίζεται με την απουσία τάξης στην δόμηση του στερεού ενώ επιτυγχάνεται με το απότομο πάγωμα ενός υγρού ώστε οι θέσεις των ατόμων του να είναι πλήρως τυχαίες στον χώρο. Σε αυτή την περίπτωση απουσιάζει παντελώς η τάξη που εκδηλώνεται με την απουσία του κρυσταλλικού πλέγματος (Σχ. Γ.1.(α)). (ii). Όταν η αταξία υπάρχει στην περιορισμένη επιλογή του είδους των ατόμων (π.χ. Α ή Β) που καταλαμβάνουν με τυχαίο τρόπο τις θέσεις ενός περιοδικού πλέγματος εμφανίζεται η αταξία αντικατάστασης. Η μορφή αυτή της αταξίας υπάρχει στα κράμματα και φαίνεται στο Σχ. Γ. 1. (β) ενώ θα μας απασχολήσει εκτενέστερα σε αυτό το κεφάλαιο.



Σχ. Γ. 1. (α) Αταξία δόμησης στο γυαλί SiO_2. **(β)** Αταξία αντικατάστασης σε τυχαίο κράμμα δύο ειδών υλικού Α και Β.

Η τυχαιότητα εκδηλώνεται στην ύλη με ποικίλες μορφές και όπως είδαμε στα παραπάνω παραδείγματα δεν υπάρχει συνολική συμμετρία αλλά ισχυρές συσχετίσεις και επιρροές μεταξύ των επιμέρους συστατικών που ευρίσκονται στις διάφορες θέσεις ενός κρυσταλλικού πλέγματος. Εδώ για να διευκολύνουμε τον αναγνώστη θα του υπενθυμίσουμε μερικούς ορισμούς και ορισμένα ακόμη αποτελέσματα από τη θεωρία πιθανοτήτων και την μαθηματική στατιστική. Αρχικώς, επειδή στα συστήματα συμπυκνωμένης ύλης για να ορισθεί,

θεωρητικά, η μέση συμπεριφορά του μακροσκοπικού συστήματος πρέπει να παρατηρηθούν και να καταμετρηθούν με ακρίβεια όλες οι μακροσκοπικές κινήσεις των πολλών ($\approx 10^{23}$) ανεξαρτήτων συστατικών του υλικού ένας τρόπος μελέτης, συχνά και ο μοναδικός, είναι μέσω της τεχνικής της προσομοίωσης. Η τεχνική αυτή επιτυγχάνεται μόνο με την χρήση του ηλεκτρονικού υπολογιστή, μέσω της εκτέλεσης υπολογιστικών πειραμάτων, που μοιάζουν με τα πειράματα της φυσικής πραγματικότητας. Η παρουσία της τυχαιότητας προσθέτει επιπλέον δυσκολίες σ' αυτήν την μελέτη, αλλά ταυτόχρονα κάνει και πιο επιτακτική την ανάγκη να καταφύγουμε στην προσομοίωση. Με άλλα λόγια τυχαιότητα και ύλη αποτελούν δύο συνυφασμένες έννοιες, που είναι αλληλένδετες με την τεχνική της αριθμητικής προσομοίωσης.

Σε προβλήματα προσομοίωσης παρουσία τυχαιότητας υπάρχει συνήθως μια μεταβλητή που παίρνει σε κάθε πλεγματική θέση μια τιμή, ορισμένη κατά τυχαίο τρόπο από ένα σύνολο τιμών. Στη στατιστική είδαμε πως μια τέτοια μεταβλητή ονομάζεται και τυχαία μεταβλητή και, ενώ το σύνολο των δυνατών τιμών της καθώς και η συχνότητα εμφάνισης της κάθε μιας είναι γνωστές με ακρίβεια, η συγκεκριμένη τιμή της σε μια δεδομένη στιγμή είναι τελείως άγνωστη. Όπως ακριβώς η πρόβλεψη του αποτελέσματος στη ρίψη ενός νομίσματος είναι αδύνατη ενώ οι δυνατές τιμές του (τα αποτελέσματα Κορώνα ή Γράμματα) και η πιθανότητα εμφάνισής των είναι επίσης γνωστά ($p(K) = p(\Gamma) = 1/2$). Το αποτέλεσμα της ρίψης ενός νομίσματος αποτελεί το πιο γνωστό παράδειγμα μιάς τυχαίας μεταβλητής.

Στα προβλήματά μας των μη περιοδικών συστημάτων αν το πλέγμα έχει Ν θέσεις η παρουσία της τυχαιότητας στο πλέγμα θα απαιτήσει μια ακολουθία Ν τυχαίων αριθμών που εκφράζουν την τυχαιότητα, π.χ. στις συντεταγμένες της θέσης. Πώς όμως παίρνουμε αυτούς τους τυχαίους αριθμούς; Τυχαίοι αριθμοί είναι δυνατόν να ληφθούν με διάφορους τρόπους. Ο πιο απλοϊκός από όλους θα ήταν να γράφαμε όλα τα δυνατά αποτελέσματα σε μικρά χαρτάκια, να τα τοποθετήσουμε σε μικρές μπαλλίτσες και στην συνέχεια όλα μαζί μέσα σε ένα κουτί. Μετά από ένα γερό ανακάτεμα αν πάρουμε μια από τις μπαλλίτσες αυτή μας δίνει έναν "τυχαίο" αριθμό, η δεύτερη, επίσης διαλεγμένη τυχαία, έναν δεύτερο "τυχαίο" αριθμό, κ.λ.π. Γιατί όμως η λέξη τυχαίος έχει γραφεί μέσα σε αποστρόφους; μήπως αυτοί οι αριθμοί δεν είναι 100% τυχαίοι; επίσης, υπάρχει πιο αποτελεσματικός τρόπος δημιουργίας τυχαίων αριθμών;

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Αυτό που απαιτείται στις περισσότερες περιπτώσεις είναι η δημιουργία τυχαίων αριθμών σταθερής πιθανότητας στο διάστημα από μηδέν μέχρι ένα. Το ερώτημα που προκύπτει είναι μήπως θα μπορούσε ο υπολογιστής, ο οποίος είναι απαραίτητος στην τεχνική της προσομοίωσης άτακτων συστημάτων, να χρησιμοποιηθεί στην δημιουργία τέτοιων "τυχαίων" αριθμών; Αν και η ιδέα αυτή ηχεί κάπως παράξενα, αφού είναι γνωστό ότι ο υπολογιστής δίνει ακριβώς ότι ζητήσει ο προγραμματιστής μέσω του προγράμματος, γεγονός που αποκλείει την εισαγωγή του στοιχείου της τυχαιότητας στο πρόγραμμα. Είναι, πράγματι, αληθές ότι δεν υπάρχει τυχαιότητα ούτε και γεννήτριες πραγματικά τυχαίων αριθμών στον υπολογιστή. Μπορούμε όμως να δημιουργήσουμε εύκολα αριθμούς ψευδο-τυχαίους ή "τυχαίους", που συμπεριφέρονται σαν τυχαίοι στις περισσότερες περιπτώσεις. Γι' αυτό τον λόγο βάζουμε και τις αποστρόφους στη λέξη "τυχαίος".

Ένας ιδιαίτερα εύκολος τρόπος δημιουργίας "τυχαίων" αριθμών στον υπολογιστή βασίζεται σε μια απλή τεχνική: δίνουμε μια αρχική τιμή x_0 στην τυχάια μεταβλητή μας x και υπολογίζουμε τις επόμενες x_n τιμές για n = 1, 2, 3,... από την απλή αναδρομική σχέση (δείτε επίσης την λογιστική απεικόνιση του ΠΑΡΑΡΤ. Δ)

$$x_{n+1} = (k \cdot x_n + c) \cdot \text{mod} m \ , \qquad (\Gamma.1)$$

όπου k, c και m είναι σταθερές ενώ ως $a \cdot \text{mod} m$ ορίζεται το υπόλοιπο της διαίρεσης a δια m (π.χ. αν a = 21 και m = 8 τότε $a \cdot \text{mod} m = 5$, αν a = 3 και m = 8 τότε $a \cdot \text{mod} m = 3$, κ.λ.π.). Επειδή πάντα ισχύει πως $a \cdot \text{mod} m < m$, προκύπτει αμέσως πως οι αριθμοί x_n/m είναι κατανεμημένοι από το μηδέν μέχρι το ένα, δηλαδή είναι "τυχαίοι" αριθμοί με σταθερή πυκνότητα πιθανότητας στο ως άνω διάστημα. Το ερώτημα που γεννάται στη συνέχεια είναι αν οι αριθμοί είναι "τυχαίοι" για κάθε τιμή του n.

Η απάντηση στο παραπάνω ερώτημα είναι όχι, γιατί οι αριθμοί x_n από την σχέση (Γ.1) επαναλαμβάνονται, ακριβώς οι ίδιοι, από ένα αριθμό x_{n_0} και πέρα. Αυτό συμβαίνει επειδή ο υπολογιστής μας δίνει αριθμούς με ακρίβεια περιορισμένη σε έναν ορισμένο αριθμό δεκαδικών ψηφίων(π.χ. 16) ενώ είναι επίσης γνωστό πως οι n-ψήφιοι αριθμοί είναι ακριβώς 10^n σε αριθμό (π.χ. οι διαφορετικοί 1-ψήφιοι αριθμοί είναι ακριβώς 10^1, οι διαφορετικοί 2-ψήφιοι είναι 10^2, κ.λ.π.). Άρα ένας αριθμός x_n θα πρέπει, αναγκαστικά, να επαναληφθεί αργά ή γρήγορα απο την αναδρομική σχέση μας, πράγμα που

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

εξαρτάται από τον βαθμό ακρίβειας του υπολογιστή μας. Όταν αυτό συμβεί, δηλ. για κάποιο n_0 ισχύσει $x_{n_0} = x_{n_0-l}$, τότε η ακολουθία των τυχαίων αριθμών x_{n_0-l+n} με $n = 0, 1, 2, ..., l-1$ θα επαναλαμβάνεται περιοδικά με περίοδο l. Όμως κάνοντας την επιλογή $k=5^{17}$, $c=0$, $m = 2^{40}$ και με μια περιττή αρχική τιμή x_0 στην σχέση (Γ.1) μπορούμε να εξασφαλίσουμε μια πολύ μεγάλη περίοδο επανάληψης l, ώστε οι αριθμοί x_n/m να είναι σταθερής πυκνότητας από μηδέν μέχρι ένα "τυχαίοι" αριθμοί, με την έννοια του τυχαίου όπως την ορίσαμε που είναι επαρκής για τους περισσότερους σκοπούς (π.χ. στην επιλογή μας αυτή προκύπτει μια περίοδος $l \approx 10^{11}$). Τέλος, υποδεικνύουμε στον αναγνώστη και έναν τρόπο βελτίωσης του αλγορίθμου (Γ.1) μέσω της δημιουργίας 2^8 θέσεων στην μνήμη του υπολογιστή που τις γεμίζουμε με αντίστοιχους "τυχαίους" αριθμούς από την (Γ.1). Στην συνέχεια σε κάθε απαίτηση δημιουργίας ενός "τυχαίου" αριθμού καλούμε την (Γ.1) δύο ακόμη φορές: ο πρώτος "τυχαίος" αριθμός που παίρνουμε μας χρησιμεύει για να επιλέξουμε κατά "τυχαίο" τρόπο μια από τις 2^8 θέσεις που περιέχει τον "τυχαίο" αριθμό που χρησιμοποιούμε για τον σκοπό μας. Ο δεύτερος "τυχαίος" αριθμός που δημιουργούμε απλώς καταλαμβάνει το κενό που υπήρχε στην συγκεκριμένη θέση.

Στα υπολογιστικά πειράματα προσομοίωσης είναι προφανώς αδύνατον να χρησιμοποιήσουμε έναν άπειρα μεγάλο αριθμό πλεγματικών θέσεων N. Ο N περιορίζεται από τον διαθέσιμο χώρο αποθήκευσης στη μνήμη αλλά και την ταχύτητα του υπολογιστή μας. Επομένως, αν επιθυμούμε τον υπολογισμό μιας ποσότητας x (π.χ. την κρίσιμη πιθανότητα p_c ώστε να έχουμε το φαινόμενο της διήθησης, που θα συναντήσουμε σε λίγο), για πεπερασμένο μέγεθος του πλέγματος N η τιμή της x προφανώς θα εξαρτάται από αυτό. Ο τρόπος υπολογισμού της μεταβλητής x για πεπερασμένο N επιτυγχάνεται με την εκτέλεση n παρόμοιων πειραμάτων. Για το πρώτο πείραμα μέσω της (Γ.1) δημιουργούμε μια ακολουθία N τυχαίων αριθμών ενώ η λύση του προβλήματος που προκύπτει μας δίνει μια τιμή για το x που την ονομάζουμε x_1. Έτσι για τις n συνολικά εκτελέσεις του πειράματος δημιουργούμε, απαραιτήτως, n ακολουθίες από N τυχαίους αριθμούς στην κάθε μία και παίρνουμε για το x τις τιμές $x_1, x_2, ..., x_n$. Ο παρατηρητικός αναγνώστης θα αναγνώρισε πως έτσι έχουμε κατασκευάσει ένα στατιστικό ensemble στο οποίο θα υπολογίσουμε τις μέσες τιμές και τις απαραίτητες διακυμάνσεις.

Ως μέση τιμή της τυχαίας μεταβλητής x ορίζεται η ποσότητα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\langle x \rangle = \sum_i x_i/n \quad , \qquad (\Gamma.2)$$

ενώ ως διασπορά της ίδιας μεταβλητής η

$$\sigma^2 = \sum_i (x_i - \langle x \rangle)^2/ n$$

$$= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad . \qquad (\Gamma.3)$$

Η θετική τετραγωνική ρίζα της σ απο την εξ. (Γ.3) είναι η τυπική απόκλιση σ της τυχαίας μεταβλητής x. Δεν πρέπει, βέβαια, να λησμονούμε ότι οι ποσότητες $\langle x \rangle$ και σ είναι συναρτήσεις του N. Επιπλέον, οι τυχαίες τιμές x_1, x_2, ..., x_n είναι διακριτές και ακριβώς όσες και οι επαναλήψεις (n) του πειράματος. Αν μια τυχαία τιμή x_k εμφανιστεί n_k φορές η ίδια στις n εκτελέσεις του πειράματος τότε η πιθανότητα εμφάνισής της $p(x_k)$ δίνεται απο την συχνότητα εμφάνισης n_k/n. Άρα, από τις εξ. (Γ.2) και (Γ.3) προκύπτουν οι

$$\langle x \rangle = \sum_k x_k \cdot p(x_k) \qquad (\Gamma.4)$$

$$\sigma^2 = \sum_k (x_k - \langle x \rangle)^2 \cdot p(x_k), \qquad (\Gamma.5)$$

ενώ τα αθροίσματα ως προς το k καλύπτουν όλες τις δυνατές τιμές εμφάνισης της μεταβλητής x. Αφού $\sum_k n_k = n$ πρέπει, απαραιτήτως, να ισχύει και η συνθήκη κανονικοποίησης $\sum_k p(x_k)=1$. Επομένως η μεταβλητή x είναι μία, επίσης, τυχαία μεταβλητή για δεδομένο (και πεπερασμένο) μέγεθος του συστήματος N με μέση τιμή την $\langle x \rangle$ και η τυπική απόκλιση την σ όπως δίνονται από τις σχέσεις (Γ.4) και (Γ.5).

Όταν ο αριθμός εκτέλεσης πειραμάτων n (που ορίζει και το μέγεθος του στατιστικού μας ensemble) είναι πολύ μεγάλος η τυχαία μεταβλητή x μπορεί να θεωρηθεί και ως οιονεί-συνεχής, που είναι ουσιαστικά μια συνεχής μεταβλητή για όλους τους πρακτικούς σκοπούς. Επιπλέον, όπως συνήθως συμβαίνει στην φυσική ως αποτέλεσμα του θεωρήματος του κεντρικού ορίου, η

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κατανομή της x ακολουθεί τον νόμο του Gauss. Άρα, η x υπακούει στην κανονική κατανομή μέσης τιμής <x> και διακύμανσης σ^2 για δεδομένο N. Οι σχετικές διακυμάνσεις απο την μέση τιμή <x>, όπως μετρώνται απο την σχετική τυπική απόκλιση σ/ <x>, τείνουν στο μηδέν για μεγάλο αριθμό επαναλήψεων n. Επίσης, η τυπική απόκλιση σ εξαρτάται απο τον αριθμό N και είναι μεγάλη όταν ο N είναι μικρός αριθμός αλλά γίνεται όλο και πιο μικρή όσο ο N αυξάνει, ακολουθώντας την κανονική κατανομή που γίνεται όλο πιό στενή και πιό ψηλή. Για $N\to\infty$ οι σχετικές διακυμάνσεις τείνουν στο μηδέν και η x δεν είναι πλέον μια τυχαία μεταβλητή αλλά έχει μια ορισμένη τιμή, ενώ η κατανομή της γίνεται μια συνάρτηση- δ.

Είδαμε, λοιπόν, ότι σε ένα πεπερασμένο σύστημα δεν παίρνουμε μια ακριβή τιμή για μια μεταβλητή x, π.χ. είναι γνωστό ότι η απότομη μετάβαση φάσης σε μια ορισμένη τιμή της θερμοκρασίας T_c ισχύει μόνο για το άπειρο σύστημα, ενώ για πεπερασμένα συστήματα λαμβάνουμε ένα εύρος τιμών T_c που υπακούει στην κανονική κατανομή. Στα υπολογιστικά πειράματα προσομοίωσης, εφ' όσον είναι αδύνατη η μελέτη του άπειρου συστήματος αρκούμεθα στην εκτέλεση ενός μεγάλου αριθμού πειραμάτων n, για δεδομένο μέγεθος N, ώστε να υπολογιστεί η μέση τιμή της <x> και η διακύμανση σ^2 από τις εξ. (Γ.4) και (Γ.5). Επομένως γνωρίζουμε την ακριβή τιμή <x> (είναι η μέση τιμή <x>) με μια ακρίβεια που υποδεικνύεται από την τιμή της τυπικής απόκλισης σ. Όσο μεγαλώνει το μέγεθος N η σ μικραίνει σχετικά με την <x>, συνήθως με αντίστροφο νόμο δύναμης, και έτσι αυξάνει η ακρίβεια υπολογισμού της <x>. Προφανώς για $N\to\infty$ το εύρος των διακυμάνσεων τείνει στο μηδέν και όλες οι τιμές συμπυκνώνονται σε ένα σημείο, ώστε η μεταβλητή x να είναι πλέον απόλυτα ορισμένη.

Αφού αναπτύξαμε την γενική φιλοσοφία της προσομοίωσης άτακτων συστημάτων, στην συνέχεια αυτού του κεφαλαίου θα γνωρίσουμε έναν υπολογισμό που αφορά μή περιοδικά συστήματα. Πρώτα όμως πρέπει να αναφερθεί πως μεταβάσεις φάσης δεύτερης τάξης (ονομάζονται έτσι γιατί συμβαίνουν με συνεχή τρόπο σε μια ορισμένη τιμή της δεδομένης παραμέτρου, π.χ. της πιθανότητας διήθησης, της ενέργειας, της θερμοκρασίας, κ.λ.π.), σε άτακτα συστήματα της συμπυκνωμένης ύλης, διακρίνουμε στις εξής περιπτώσεις: (i) μετάβαση της διήθησης σε μια ορισμένη κρίσιμη πιθανότητα κατάληψης, γνωστή ως το κατώφλι διήθησης p_c, (ii) την μετάβαση μετάλλου-μονωτή (σε μια ορισμένη τιμή της ενέργειας γνωστής και ως άκρον

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

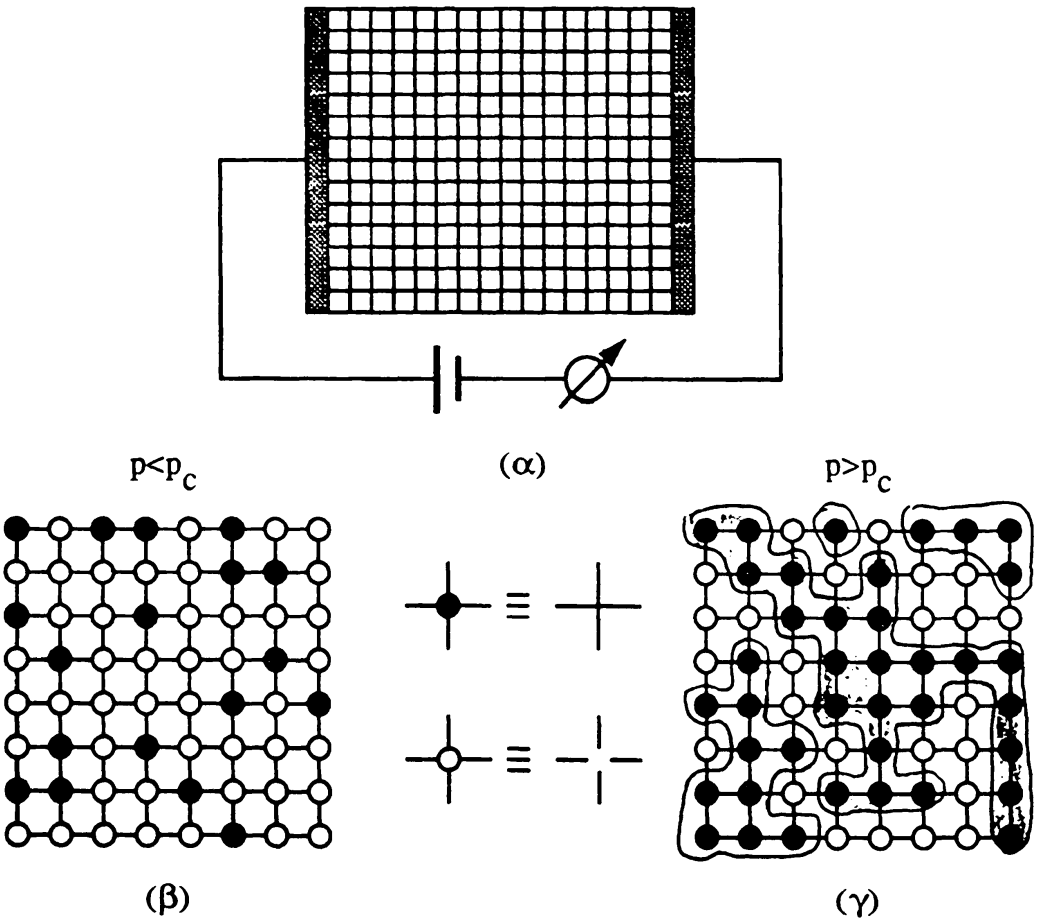
κινητικότητας E_c) και τέλος την (iii) μετάβαση στα γυαλιά-σπιν σε μια κρίσιμη θερμοκρασία T_c. Η μελέτη αυτών των προβλημάτων ευρίσκεται σαφώς στην πρώτη γραμμή της γνώσης ενώ νέες ιδέες και μοντέρνες θεωρίες της στατιστικής φυσικής αναπτύχθηκαν για την εξήγησή τους. Η αυτο-ομοιότητα όπως την γνωρίσαμε στην ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι και η τεχνική της ομάδας ανακανονικοποίησης παίζουν σπουδαίο ρόλο σε αυτήν την μελέτη. Στην περίπτωση των γυαλιών σπιν μια ιδιότυπη θεωρία μέσου πεδίου από τον Parisi εισάγει την νέα έννοια της υπερμετρικότητας για την επιφάνεια της ελεύθερης ενέργειας (όπου συνυπάρχουν ελάχιστα μέσα σε άλλα ελάχιστα, κ.ο.κ.). Θα πρέπει επίσης να αναφερθεί πως οι απλές θεωρίες μέσου πεδίου στην περίπτωση της μετάβασης της διήθησης ισχύουν μόνο για διαστάσεις $d > d_c$ όπου $d_c = 6$, ενώ η κρίσιμη διάσταση χώρου d_c πάνω από την οποία ισχύει η αντίστοιχη θεωρία μέσου πεδίου για την σιδηρομαγνητική μετάβαση φάσης είναι $d_c = 4$. Δεν είναι ακόμη γνωστή η κρίσιμη διάσταση για τις μεταβάσεις (ii) και (iii). Τελευταίες εκτιμήσεις ανεβάζουν την κρίσιμη διάσταση σε $d_c = 8$ για την μετάβαση μετάλλου μονωτή και σε $d_c = 26$ (!) για την μετάβαση του γυαλιού-σπιν. Προφανώς στις ρεαλιστικές τιμές της διάστασης χώρου (π.χ. για $d = 3$) δεν υπάρχει ικανή απλή θεωρία για να περιγράψει αυτές τις μεταβάσεις φάσης γι' αυτό πολύ συχνά πρέπει, αναγκαστικά, να καταφύγουμε στην τεχνική της προσομοίωσης.

Γ.2. Το πρόβλημα της διήθησης

Φανταστείτε μια περιοδική διευθέτηση τετραγώνων όπως αυτή στο Σχ.Γ. 2(α). Οι φυσικοί την αποκαλούν τετραγωνικό πλέγμα ($d = 2$, δηλ. διδιάστατο στο σχήμα) ενώ συνήθως λαμβάνεται αρκετά μεγάλο σε μέγεθος ώστε να μην υπάρχουν φαινόμενα λόγω ύπαρξης των πεπερασμένων ορίων του. Οι Watson και Leath, το 1974, εκτέλεσαν ένα μάλλον ασυνήθιστο πείραμα. Δημιούργησαν ένα τετραγωνικό πλέγμα φτιαγμένο από ... σύρματα, που περιείχε 137X137 κόμβους (πλεγματικές θέσεις) ενώ το μήκος μεταξύ δύο κοντινότερων κόμβων ήταν περίπου 0.6cm. Στα άκρα του το πλέγμα συνδέθηκε με κύκλωμα μέτρησης ηλεκτρικής αντίστασης και τα πειράματα έγιναν παρουσία ενός ποσοστού μη-

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

κατειλημμένων (άσπρων) θέσεων αποκόβοντας τους δεσμούς προς τις γειτονικές μη-κατειλημμένες θέσεις (Βλέπε τα Σχ. Γ.2.(β), (γ)).

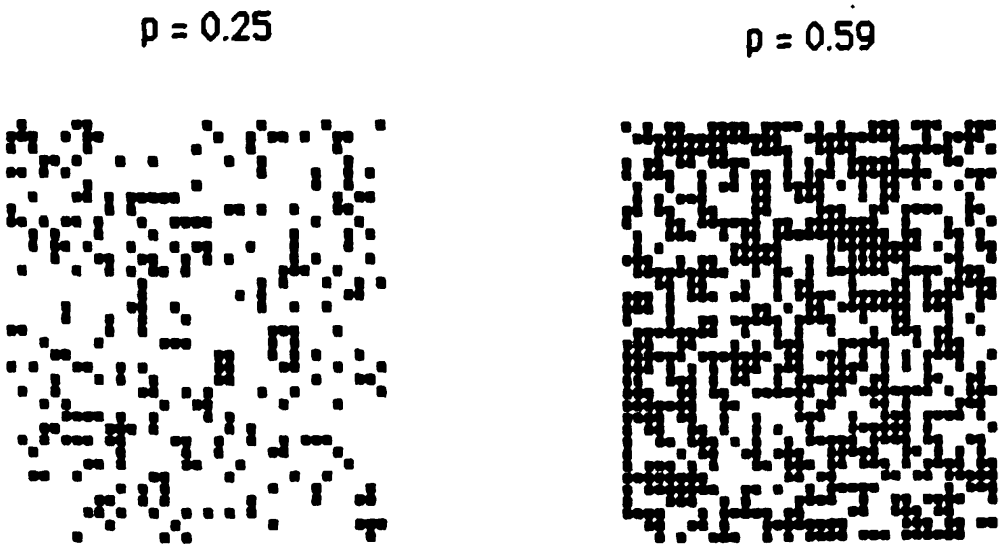


Σχ. Γ.2. (α) Σχηματική αναπαράσταση ενός διδιάστατου τετραγωνικού πλέγματος 15 x 17. Τα σχήματα (β) και (γ) δείχνουν το πλέγμα για δύο τιμές συγκέντρωσης κατειλημμένων θέσεων (με μαύρο) και μη κατειλημμένων (με άσπρο) κάτω ($p<p_c$) και πάνω ($p>p_c$) από την πιθανότητα p_c, γνωστή ως το κατώφλι της διήθησης. Παρατηρείστε ότι για $p>p_c$ υπάρχει ένα "άπειρο" συσσωμάτωμα (γραμμοσκιασμένο σχήμα) που εκτείνεται από τη μια άκρη μέχρι την άλλη του πλέγματος και είναι δυνατή η διήθηση (τα συσσωματώματα είναι μέσα σε περίγραμμα). Ακριβώς στην τιμή της πιθανότητας κατάληψης p_c συμβαίνει η διηθητική μετάβαση.

Δημιουργούνται έτσι συσσωματώματα που αποτελούνται από σύνολα κατειλημμένων συνδεδεμένων μαύρων θέσεων, με μια μεγάλη ποικιλία αριθμού θέσεων για το καθένα. Ως κατώφλι διήθησης ορίζεται η ελάχιστη

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

συγκέντρωση των κατηλημμένων θέσεων (μαύρων) θέσεων p_c ώστε να υπάρχει ένα συσσωμάτωμα που εκτείνεται μέχρι τις άκρες του πλέγματος (Σχ. Γ.3.(β)). Για μέγεθος του πλέγματος $N = \infty$ το συσσωματωμα, αυτό είναι προφανώς "άπειρο", μια ονομασία που διατηρείται εντός αποστρόφων για τα πεπερασμένα πλέγματα. Για $p<p_c$ παρατηρούνται μόνο πεπερασμένα συσσωματώματα (Σχ. Γ.3.(β)) σε σχέση με το μέγεθος του πλέγματος N, ενώ το "άπειρο" συσσωμάτωμα παρατηρείται μόνο για $p>p_c$. Βέβαια, στην τελευταία περίπτωση υπάρχουν και πεπερασμένα συσσωματώματα ενώ στο κύκλωμα κυκλοφορεί ρεύμα μόνο όταν υπάρχει το "άπειρο" συσσωμάτωμα (αυτό συμβαίνει για $p > p_c$).



Σχ. Γ.3. (α) Τα συσσωματώματα στο διδιάστατο πλέγμα για $p = 0.25$. (β) Για $p = p_c = 0.59$.

Γνωρίσαμε, λοιπόν, την ουσία του προβλήματος της δίηθησης με το πείραμα των Watson και Leath. Ένας από τους σκοπούς του πειράματος ήταν και ο υπολογισμός της πιθανότητας p_c ή του κατωφλίου διήθησης όπως συνηθίζεται να λέγεται. Στο πλέγμα των 137X137 θέσεων, μετά από πολλές εκτελέσεις του πειράματος με διαφορετικούς τυχαίους αριθμούς κάθε φορά για

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

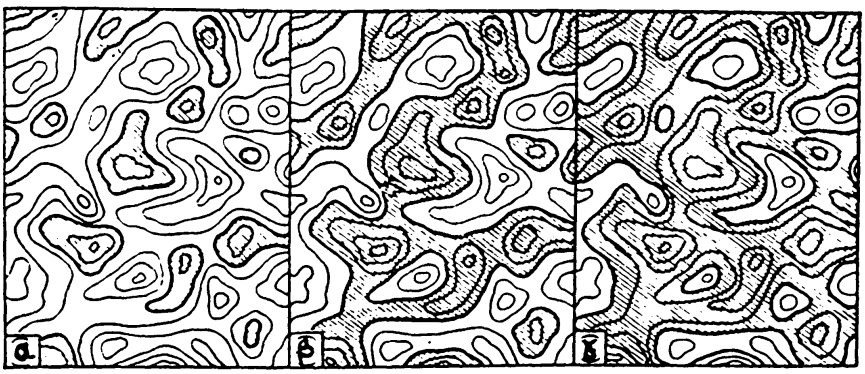
μια δεδομένη πιθανότητα p κοντά στην p_c, προέκυψε, με ακρίβεια δύο δεκαδικών ψηφίων, η τιμή $p_c = 0.59$. Βλέπουμε, λοιπόν, ότι απαιτείται η δυνατότητα τουλάχιστον 59% από τις θέσεις του πλέγματος να είναι κατειλημμένες προκειμένου να υπάρχει μια διέξοδος μεταξύ αριστερού και δεξιού άκρου του πλέγματος, όπου τοποθετούνται τα ηλεκτρόδια, ώστε το κύκλωμα να διαρρέεται από ρεύμα.(Σχ.Γ.3). Θα δούμε ότι υπολογιστικά πειράματα που μπορεί να διεξαχθούν σε ακόμη μεγαλύτερα πλέγματα επιτρέπουν με ακόμη μεγαλύτερη ακρίβεια τον υπολογισμό της τιμής του p_c.

Εδώ πρέπει να αναφερθεί ότι το πρόβλημα της διήθησης είναι σχετικά πρόσφατο. Διατυπώθηκε για πρώτη φορά από τον Hammersley το 1957 όταν ο φίλος του Broadnent που εργάζονταν στην Βρεττανική εταιρία κάρβουνου του πρότεινε ένα "απλό" πρόβλημα δημιουργίας μιας μάσκας αερίου που να αποτελείται από μικρά πεπιεσμένα σωμάτια κάρβουνου διαφόρων μεγεθών. Το πρόβλημα αρχικά τέθηκε ως εξής: αν η πίεση μεταξύ των κομματιών κάρβουνου είναι μεγάλη ο αέρας που περνάει διά μέσου είναι καθαρός αλλά δυσκολεύει την αναπνοή. Αντίθετα για μικρή πίεση ο αέρας δεν είναι καθαρός ενώ η αναπνοή γίνεται κανονικά. Το ερώτημα ήταν: ποιά είναι η κατάλληλη πίεση, που εξαρτάται προφανώς από το μέγεθος των σωματίων κάρβουνου, ώστε να επιτευχθεί η διάδοση καθαρού αέρα χωρίς, ταυτοχρόνως, να δυσκολεύεται η αναπνοή; Δεν γνωρίζω αν επιλύθηκε το πρακτικό αυτό πρόβλημα όμως το θεωρητικό πρόβλημα συνεχίζει, παρ' όλη την απλότητά του, να απασχολεί έναν συνεχώς, αυξανόμενο αριθμό ερευνητών. Άλλα παραδείγματα διήθησης παρατηρούνται στην ροή υγρών σε πορώδη υλικά, στην βελτίωση της ποιότητας υλικών π.χ. σε κράμματα όπως το ατσάλι, στους διαλυτούς μαγνήτες με μαγνητικά και μη-μαγνητικά υλικά, στην δεντροφύτευση ώστε να ελαχιστοποιείται ο κίνδυνος πυρκαγιάς, στην διάδοση ασθενειών, κ.λ.π.

Το θεωρητικό πρόβλημα της διήθησης ενδιέφερε στην αρχή μόνο τους μαθηματικούς ενώ σήμερα με το πρόβλημα ασχολούνται κυρίως οι φυσικοί. Ως τώρα είδαμε την διήθηση θέσης ενώ μια εναλλακτική θώρηση είναι η γνωστή και ως διήθηση δεσμού που ορίζεται ως εξής: όλες οι θέσεις είναι τώρα κατειλημμένες, αλλά είναι οι δεσμοί που συνδέουν δύο γειτονικές θέσεις που είναι κατειλημμένοι ("ανοιχτός") ή όχι ("κλειστός") με πιθανότητα p και 1–p, αντίστοιχα. Το συσσωμάτωμα τώρα δημιουργείται απο το σύνολο των θέσεων που συνδέονται με "ανοιχτούς" δεσμούς. Άλλα είδη διήθησης λαμβάνουμε όταν

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

κατανείμουμε κύκλους στις δύο διαστάσεις (ή σφαίρες στις τρεις διαστάσεις) διαφόρων μεγεθών. Όταν δημιουργηθεί ένα συσσωμάτωμα που αποτελείται από σφαίρες που συνδέονται και εκτείνεται μέχρι τα άκρα του συστήματος λέμε ότι είμαστε πάνω από το κατώφλι διήθησης. Αντί για κύκλους μπορούμε, επίσης, να κατανείμουμε τυχαία σχήματα (όπως και στο αρχικό πρόβλημα του Hammersley), που η ένωσή τους ορίζει τα συσσωματώματα. Το τελευταίο αυτό πρόβλημα κατανοείται ευκολότερα αν φανταστεί κανείς έναν κατακλυσμό όπου οι κορυφές των βουνών και λόφων που εξέχουν για ορισμένο ύψος στάθμης του νερού αποτελούν τα πεπερασμένα συσσωματώματα. Αν το ύψος της στάθμης του νερού κατέβει αρκετά τότε δημιουργείται ένα αρκετά μεγάλο



Σχ.Γ. 4. Σχηματική αναπαράσταση της διήθησης κατακλυσμού.

νησί που εκτείνεται μέχρι τις άκρες ενώ υπάρχουν ταυτόχρονα νησάκια και λιμνούλες διαφόρων μεγεθών (Σχ.Γ.4). Αντίστοιχα, σε μία συμπληρωματική θεώρηση μπορούμε να ορίσουμε και την διήθηση του νερού έτσι ώστε τα συσσωματώματα να είναι οι λίμνες. Έχει αποδειχτεί ότι στην περίπτωση της διήθησης κατακλυσμού με αταξία της μορφής "λευκού θορύβου", δηλ. κατανομή Gauss αλλά διαφορετική για κάθε θέση του χώρου, τα αποτελέσματα του κρίσιμου ποσοστού κατειλημμένου χώρου ώστε να παρατηρείται η διήθηση, είναι κοντά σε αυτά της διήθησης δεσμού (Πίνακας 1).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Γ.3. Ορισμοί: p_c, $P(p)$, $\sigma(p)$

Είδαμε ότι η μετάβαση διήθησης και η δημιουργία του "άπειρου" συσσωματώματος παρατηρούνται σε μια κρίσιμη τιμή της συγκέντρωσης, ή της πιθανότητας κατάληψης, p_c, που ονομάζεται κατώφλι διήθησης. Από την συζήτηση που προηγήθηκε προκύπτει ότι για πεπερασμένο μέγεθος πλέγματος Ν θέσεων η p_c είναι μια τυχαία μεταβλητή κατανεμημένη κατά συνεχή σχεδόν τρόπο με τον νόμο του Gauss (υπακούει δηλαδή στην κανονική κατανομή). Από n εκτελέσεις του πειράματος και τους τύπους (Γ.4) και (Γ.5) είναι δυνατόν να υπολογιστεί η μέση τιμή $p_c(N)$ και η τυπική της απόκλιση σ(N) για δεδομένο Ν. Η κρίσιμη περιοχή της μετάβασης είναι εύρους ανάλογου της τυπικής απόκλισης σ(N) που τείνει στο μηδέν για αυξανόμενο μέγεθος του πλέγματος, ώστε

$$p_c = \lim_{N\to\infty} p_c(N) \qquad (\Gamma.6)$$

και η p_c είναι πλέον μια ορισμένη μεταβλητή. Σε μια ισοδύναμη διατύπωση θα λέγαμε πως η απότομη μετάβαση φάσης παρατηρείται μόνο στο "άπειρο" σύστημα.

Ακριβώς για την τιμή της πιθανότητας κατάληψης της κάθε θέσης $p = p_c$ (για κάθε θέση καλούμε έναν "τυχαίο" αριθμό από το μηδέν μέχρι το ένα και αν αυτός είναι μικρότερος του p_c τότε η θέση θεωρείται κατειλημμένη, ενώ αν ο "τυχαίος" αριθμός είναι μεταξύ του p_c και του ένα δεν είναι κατειλημμένη, αφού φυσικά η p είναι πάντα στο διάστημα απο 0 μέχρι 1) παρατηρείται ένα "άπειρο" διηθητικό συσσμάτωμα που διαπερνά από τη μια άκρη ως την άλλη το πλέγμα. Το "άπειρο" συσσωμάτωμα μέσω του οποίου επιτυγχάνεται η διήθηση παραμένει για κάθε $p > p_c$ και διαρκώς αυξάνει ανάλογα με την πιθανότητα κατάληψης p. Στό όριο p = 1 όλες οι θέσεις του πλέγματος είναι κατειλημμένες και ανήκουν πλέον στο "άπειρο" συσσωμάτωμα.

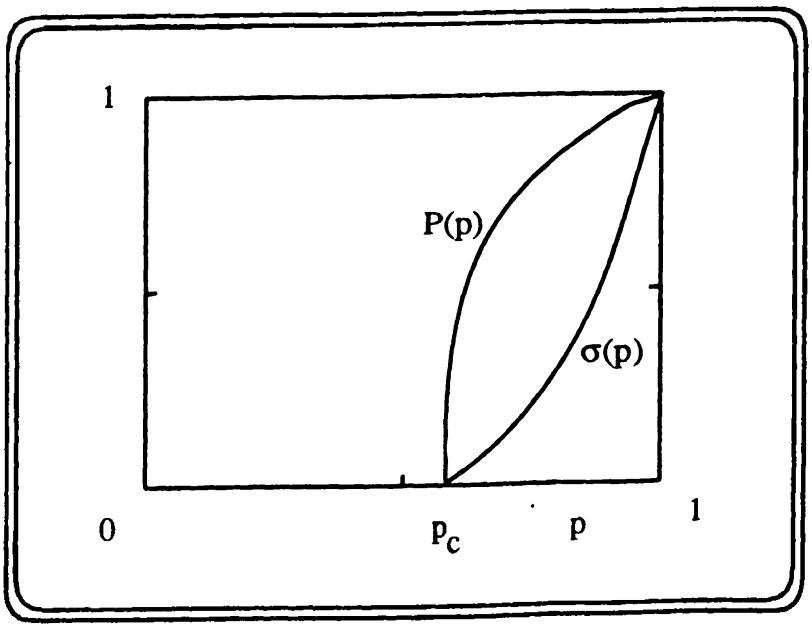
Όπως ήδη προαναφέρθηκε το πραγματικά άπειρο συσσωμάτωμα (αυτό που μπορεί να δηλωθεί χωρίς αποστρόφους) παρατηρείται μόνο στο άπειρο πλέγμα. Για πεπερασμένο μέγεθος πλέγματος Ν θέσεων και δεδομένη πιθανότητα κατάληψης $p(>p_c)$ μετά από εκτελέσεις n πειραμάτων προκύπτει πως ο μέσος

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αριθμός θέσεων N_o που ανήκουν στο "άπειρο" συσσωμάτωμα δεν εξαρτάται από το N και ισχύει

$$P(p) = \lim_{N\to\infty} (N_o/N), \qquad (\Gamma.7)$$

με ορισμένο όριο P(p) για $p > p_c$. Όταν ο N τείνει στο άπειρο και ο N_o τείνει επίσης στο άπειρο η (Γ.7) έχει το σαφώς ορισμένο όριο P(p), που ονομάζεται πιθανότητα διήθησης. Ισοδύναμα η P(p) ορίζεται και ως η πιθανότητα ώστε μια τυχούσα θέση του πλέγματος να ανήκει στο "άπειρο" συσσωμάτωμα, ενώ προφανώς η πιθανότητα της ίδιας θέσης να ανήκει σε ένα οποιοδήποτε συσσωμάτωμα είναι p. Η P(p) όπως ορίσθηκε από την εξίσωση (Γ.7) είναι στην γλώσσα των μεταβάσεων φάσης η παράμετρος τάξης στην μετάβαση διήθησης επειδή η τιμή της γίνεται μή μηδενική στο σημείο μετάβασης. Επομένως για $p<p_c$ δεν υπάρχει "άπειρο" συσσωμάτωμα και ισχύει $P(p) \equiv 0$ ενώ για $p > p_c$ η P(p) είναι διάφορη του μηδενός και αυξάνει ως συνάρτηση του p. Για την τιμή $p = 1$ η P(p) παίρνει την μεγίστη τιμή της $P(p)=1$ (Σχ.Γ.5).



Σχ. Γ.5. Οι καμπύλες της πιθανότητας διήθησης P(p) και της αγωγιμότητας σ(p) ως συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης p για ένα διδιάστατο πλέγμα με ένα ποσοστό (100.p) από κατειλημμένες θέσεις. Από το σχήμα παρατηρείται ότι η συμπεριφορά των P(p) και σ(p) είναι τελείως διαφορετική για p κοντά στο p_c (εξ.Γ.17, Γ.18). Η συμπεριφορά αυτή διαπιστώθηκε για πρώτη φορά από το πείραμα των Last και Thouless (1971) σε ένα αγώγιμο χαρτί με ένα ποσοστό 100(1−p) από τρύπες.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Μπορεί, επίσης, να οριστεί και μια άλλη ποσότητα, η αγωγιμότητα σ(p). Αν κάθε κατειλημμένη θέση θεωρείται ως μεταλλική ενώ κάθε άδεια (μη-κατειλημμένη) θέση ως μονωτική τότε, όπως στο Σχ. Γ.2 συνεχές ηλεκτρικό ρεύμα διαπερνά το κύκλωμα μόνον όταν υπάρχει ένα "άπειρο" διηθητικό συσσωμάτωμα, δηλαδή όταν $p > p_c$. Το ερώτημα που τίθεται τώρα είναι: πόσο ρεύμα διαπερνά το υπερκυβικό πλέγμα $N = L^d$ θέσεων όταν στα άκρα του εφαρμοστεί τάση V ίση με τη μονάδα; Η απάντηση δίνεται μέσω της σχέσης $I = \sigma . L^{d-1} . V/L$, όπου L^{d-1} είναι η διατομή του πλέγματος κάθετη προς την ροή του ρεύματος ενώ στον παρονομαστή L είναι μήκος του πλέγματος παράλληλα στην ροή. Η σταθερά αναλογίας στην προηγούμενη σχέση ορίζει την αγωγιμότητα

$$\sigma = L^{2-d} . I/V \quad . \qquad (\Gamma.8)$$

Είναι φανερό ότι για κάθε $p < p_c$ η σ είναι μηδέν αφού δεν υπάρχει κύκλωμα άρα ούτε και ρεύμα. Ταυτόχρονα με την εμφάνιση του "άπειρου" συσσωματώματος η αγωγιμότητα αρχίζει να αυξάνει ομαλά και παίρνει μη-μηδενικές τιμές για $p > p_c$. Στην τιμή $p = 1$ η σ(p) παίρνει, προφανώς, την μεγίστη τιμή της που αυθαίρετα μπορούμε να την θεωρήσουμε ως $\sigma(p=1) = 1$ (Σχ.Γ.5).

Οι Last και Thouless εκτέλεσαν ένα ακόμη περίεργο "πείραμα" το 1971. Υπολόγισαν την αγωγιμότητα σ(p) σε ένα χαρτί από γραφίτη με ένα ποσοστό (=100(1−p)%) από "τρύπες" που έγιναν με μια απλή μηχανή. Οι προσδοκίες των ερευνητών ήταν ότι η συμπεριφορά της καμπύλης σ(p) ως συνάρτηση της πιθανότητας p θα έμοιαζε με αυτήν της P(p) (Σχ. Γ.5). Το "πείραμα" όμως έδειξε το μη αναμενόμενο αποτέλεσμα ότι η σ(p) παρουσιάζει, κοντά στο κατώφλι διήθησης p_c, μηδενική κλίση ενώ η P(p) στο ίδιο σημείο εμφανίζει άπειρη κλίση. Πού όμως οφείλεται αυτή η συμπεριφορά; Η απάντηση είναι πως οφείλεται στα νεκρά άκρα (δηλ. στις θέσεις με έναν μόνο δεσμό προς τους γείτονές τους) που ενώ συνεισφέρουν μεν στην "μάζα" του "άπειρου" συσσωματώματος, άρα και στην P(p), δεν δίνουν καμμία συνεισφορά στην αγωγιμότητα σ(p) αφού δεν τα διαπερνά το ρεύμα. Αν αφαιρέσουμε όλα τα νεκρά άκρα, δηλαδή τους δεσμούς αυτούς που μοιάζουν με μονόδρομους αν φαντασθούμε το διηθητικό συσσωμάτωμα σαν ένα δίκτυο δρόμων, παίρνουμε την "ραχοκοκκαλιά" του "άπειρου" συσσωματώματος. Ούτε όμως και η "μάζα" της ραχοκοκκαλιάς, που εκτιμάται απο την αντίστοιχη πιθανότητα $P_B(p)$ μια

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

τυχούσα θέση να ανήκει στην ραχοκοκαλιά τού "άπειρου" συσσωματώματος (και να μην ανήκει στα νεκρά άκρα), είναι ανάλογη της αγωγιμότητας σ(p).

Γ.4. Προσομοίωση Monte-Carlo και ο υπολογισμός του p_c

Στο πρόβλημα της διήθησης η μέθοδος της προσομοίωσης Monte-Carlo είναι ιδιαίτερα χρήσιμη. Το όνομα Monte-Carlo προέρχεται από την ύπαρξη τυχαιότητας και ως γνωστόν η πόλη του Monte-Carlo είναι, πράγματι, συνώνυμη της τυχαιότητας λόγω της ύπαρξης πολλών καζίνων σε αυτή! Ακριβείς μαθηματικές αποδείξεις υπάρχουν λίγες στο πρόβλημα της διήθησης, περιορισμένες συνήθως στην μία ή τις δύο διαστάσεις και το απειροδιάστατο πλέγμα του Bethe. Άρα, είναι αναγκαία η χρήση της τεχνικής της προσομοίωσης με την βοήθεια του υπολογιστή για να πάρουμε ενδιαφέροντα και χρήσιμα αποτελέσματα. Με την τεχνική αυτή, όπως ήδη μάθαμε, το p_c υπολογίζεται με μια ορισμένη ακρίβεια ως η μέση τιμή μιας τυχαίας μεταβλητής, για ορισμένο μέγεθος του πλέγματος. Προφανώς οι τιμές των P(p) και σ(p) υπολογίζονται αριθμητικά με παρόμοιο τρόπο από τις εξισώσεις (Γ.7) και (Γ.8), με ακρίβεια που εξαρτάται πάλι από το μέγεθος του πλέγματος N. Στον Πίνακα 1. φαίνονται τιμές του κατωφλίου διήθησης p_c για τις διαφορετικές πλεγματικές δομές.

Πίνακας 1. Οι τιμές των διηθητικών κατωφλίων p_c για διδιάστατα και τριδιάστατα πλέγματα:

πλέγμα	Διήθηση θέσης	Διήθηση δεσμού
Εξαγωνικό	0.6962	0.65271
τετραγωνικό	0.59275	0.50000
τριγωνικό	0.50000	0.34729
διαμαντιού	0.428	0.388
απλό κυβικό	0.3117	0.2992
BCC	0.245	0.178
FCC	0.198	0.119

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

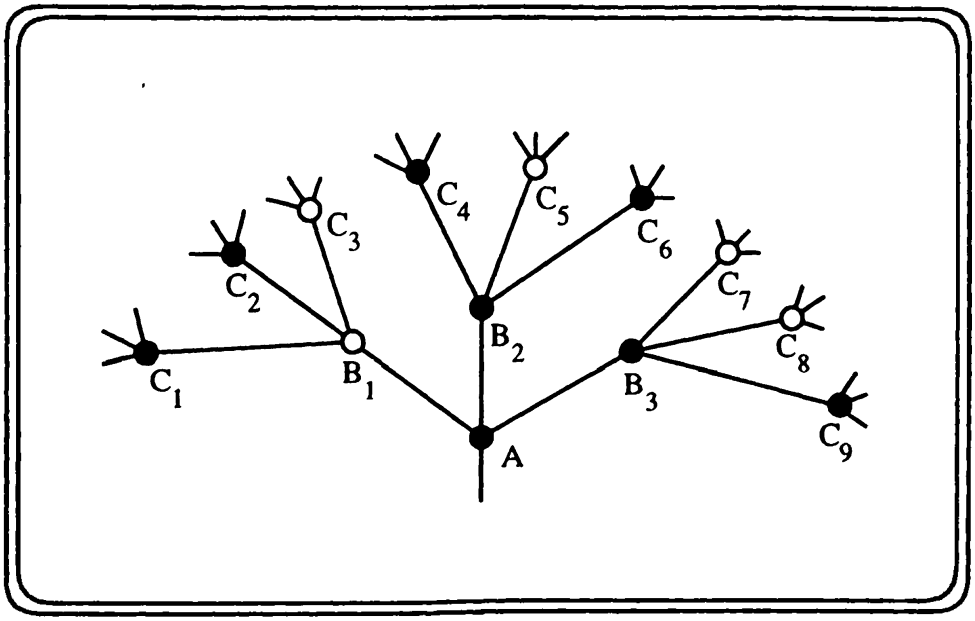
Οι τιμές ελήφθησαν από προσομοίωση Monte-Carlo με ακρίβεια μικρότερη και του τελευταίου δεκαδικού ψηφίου που φαίνεται στον Πίνακα 1. Χρησιμοποιήθηκαν πλέγματα μεγάλου αριθμού θέσεων N και έγινε αρκετά μεγάλος αριθμός υπολογιστικών πειραμάτων η κάθε φορά, ώστε να επιτευχθεί η επιθυμητή ακρίβεια.

Ένας απλός αλγόριθμος, που υπάρχει π.χ. στο βιβλίο του Stauffer, επιτρέπει την αναγνώριση όλων των συσσωματωμάτων, τον υπολογισμό του p_c και άλλων διαφόρων ποσοτήτων. Παρατηρούμε πως ενώ για $p < p_c$ υπάρχουν πολλά συσσωματώματα διαφόρων μεγεθών, όσο η πιθανότητα κατάληψης p πλησιάζει την τιμή p_c, αυτά παίρνουν περίεργα σχήματα και γι' αυτό επικράτησαν και με την ονομασία "πλεγματικά ζώα" (!). Για τιμή της p ίση με την p_c ή ακόμη μεγαλύτερη της p_c υπάρχει ένα μόνο "άπειρο" συσσωμάτωμα (πεπερασμένου μεγέθους που εκτείνεται μέχρι τα άκρα σε πεπερασμένα πλέγματα), ταυτόχρονα παρατηρείται όμως και μια ποικιλία πεπερασμένων συσσωματωμάτων. Προσέξτε όμως τι συμβαίνει: για p μέχρι και 10% πάνω απο το p_c τα πεπερασμένα συσσωματώματα συνδέονται γρήγορα στο "άπειρο" συσσωμάτωμα, έτσι ο αριθμός τους μειώνεται δραστικά και απότομα ως συνάρτηση του p. Δηλαδή για p όχι πολύ μεγαλύτερο του p_c υπάρχει πρακτικά μόνο το "άπειρο" συσσωμάτωμα, ενώ για $p=p_c$ ένα σχετικά μικρό ποσοστό των κατειλημμένων θέσεων ανήκουν στο "άπειρο" συσσωμάτωμα. Η συμπεριφορά αυτή προκύπτει και από την μορφή της καμπύλης P(p) που φαίνεται στο Σχ. Γ.5.

Στο Σχ. Γ.6 φαίνεται ένα πλέγμα Bethe με αριθμό κοντινότερων γειτόνων Z = 4 και συνεκτικότητα που ορίζεται ως K = Z−1 = 3. Χαρακτηριστικά αυτού του πλέγματος είναι: (i). Η απουσία κλειστών θηλειών (όπως είναι π.χ. ένα τετράγωνο) ενώ τέτοιες θηλειές υπάρχουν στα πεπερασμένα πλέγματα d-διαστάσεων (d>1). (ii) Αν οι θέσεις διευθετηθούν σε φλοιούς A, B, C,... παρατηρείστε ότι ο πρώτος φλοιός περιέχει μόνο τη θέση A, ο δεύτερος 3^1, ..., ο δέκατος $3^{10} = 59049$, κ.λ.π, Επομένως ακόμη κι αν συμπεριλάβουμε και λίγους φλοιούς (π.χ. 10) το πλέγμα ήδη αυξάνει υπέρμετρα (με εκθετικό και όχι πολυωνυμικό νόμο όπως συμβαίνει στα πραγματικά πλέγματα). Λέγεται, λοιπόν, ότι το πλέγμα αυτό δεν προσαρμόζεται στον d-διάστατο χώρο. (iii). Ο αριθμός των θέσεων στην επιφάνεια ως προς τον ολικό αριθμό θέσεων N για μεγάλο δείκτη φλοιού n είναι περίπου μονάδα. Άρα, οι πιο πολλές θέσεις σε αυτό το ψευδοπλέγμα

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

είναι στην επιφάνεια, με αποτέλεσμα να δημιουργείται μια παθολογική κατάσταση στον υπολογισμό διαφόρων ποσοτήτων. Οι υπολογισμοί στο πλέγμα Bethe είναι δυνατοί λόγω ακριβώς της απουσίας κλειστών θηλειών και της ύπαρξης αναδρομικών σχέσεων μεταξύ των τιμών σε δύο διαδοχικές θέσεις. Επιπλέον τα αποτελέσματα στο πλέγμα του Bethe ισχύουν και για τα πραγματικά πλέγματα μεγάλων διαστάσεων d και κατά κάποιον τρόπο συμπίτουν με τις θεωρίες μέσου πεδίου, που ισχύουν για τις μεγάλες διαστάσεις του χώρου. Το πλέγμα Bethe όμως έχει και μονοδιάστατο χαρακτήρα, π.χ. για Z = 2 (K = 1) παίρνουμε το μονοδιάστατο πλέγμα.



Σχ. Γ.6. Το πλέγμα Bethe για K = 3 και πιθανότητα κατάληψης θέσεων p = 0.6. (μαύροι κύκλοι). Το "άπειρο" συσσωμάτωμα αποτελείται στην περίπτωση αυτή απο τις θέσεις A,B_2,C_4, C_6, B_3 και C_9. Η κρίσιμη τιμή είναι $p_c = 1/K = 0.33$.

Επιστρέφουμε πάλι στο αρχικό πρόβλημα, όπου ένα ποσοστό (100 p%) των θέσεων A, B, C, ... είναι κατατειλημμένο με πιθανότητα p και τίθεται το ερώτημα: Για ποιά ελάχιστη τιμή της p επιτρέπεται ο σχηματισμός ενός "άπειρου" συσσωματώματος στο πλέγμα Bethe; Προφανώς η απάντηση σε αυτό το ερώτημα μας εξασφαλίζει την τιμή του p_c. Η πορεία προς την λύση αρχίζει με την παρατήρηση ότι η πιθανότητα μιας τυχούσας θέσης να ανήκει στο "άπειρο" συσσωμάτωμα είναι P(p) επομένως η πιθανότητα της ίδιας θέσης να μην ανήκει σε αυτό είναι, προφανώς,

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$Q(p) = 1 - P(p) . \qquad (\Gamma.9)$$

Θα επιχειρήσουμε τώρα τον υπολογισμό της Q(p) η οποία προκύπτει από δύο ανεξάρτητα γεγονότα, επομένως είναι και άθροισμα δύο πιθανοτήτων. Η θέση που επιλέχτηκε τυχαία είναι μη κατειλημμένη (με πιθανότητα 1−p) ή είναι κατειλημμένη (με πιθανότητα p) και διακόπτεται το άπειρο συσσωμάτωμα με πιθανότητα W(p) σε παραπάνω φλοιό. Η πιθανότητα pW(p) είναι το γινόμενο δύο ανεξάρτητων γεγονότων, που πρέπει να συμβαίνουν ταυτόχρονα, και αντιπροσωπεύει το γεγονός η θέση μας ανήκει στις κατειλημμένες (πιθανότητα p) αλλά έτσι ώστε σε μια από τις K θέσεις του επόμενου φλοιού με τις οποίες συνδέεται να διακόπτεται η δημιουργία του "άπειρου" συσσωματώματος (με πιθανότητα W(p)). Προφανώς η W(p) που δίνει την πιθανότητα ώστε οι K γείτονες της θέσης μας να μην ανήκουν στο "άπειρο" συσσωμάτωμα μπορεί να εκφρασθεί με το γινόμενο για κάθε μια να μην ανήκει, δηλ. είναι $[Q(p)]^K$. Επομένως για πλέγμα Bethe συνεκτικότητας K λαμβάνουμε την αναδρομική σχέση

$$Q(p) = 1 - p + p\,[Q(p)]^K. \qquad (\Gamma.10)$$

Η (Γ.10) λόγω της (Γ.9) γράφεται

$$[1 - P(p)]^K \; p + P(p) - p = 0 \qquad (\Gamma.11)$$

Οι λύσεις της (Γ.11) για K = 2 είναι P(p) = 0 και 2 − 1/p. Αν p>1/2, μόνο η δεύτερη λύση έχει φυσικό νόημα (είναι θετική ως πιθανότητα) ενώ για p<1/2 η P(p) είναι αρνητική και επομένως μη αποδεκτή. Άρα για K = 2 έχουμε $p_c = 1/2$, όμως εν γένει το $[1 - P(p)]^K$ είναι δυνατόν να αναπτυχθεί σε δυναμοσειρά και αν κρατήσουμε τους τρεις πρώτους όρους

$$[1 - P(p)]^K = 1 - K\,P(p) + [K(K-1)/2]\cdot P(p)^2 \qquad (\Gamma.12)$$

απ' όπου προκύπτει ότι

$$P(p) = 2(p-1/K)/p(K-1) . \qquad (\Gamma.13)$$

Η λύση της εξ. (Γ.13) γίνεται μηδέν όταν p =1/K που σημαίνει ότι

$$p_c = 1/K \qquad (\Gamma.14)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

στο πλέγμα Bethe.

Η λύση (Γ.13) είναι σωστή για $p > p_c$ και για p κοντά στο p_c, λόγω της ανάπτυξης (Γ.12) που προηγήθηκε. Επομένως αν στον παρονομαστή της (Γ.13) θέσουμε όπου p το 1/K τότε

$$P(p) = 2(p - 1/K)K/(K - 1) \quad , \qquad (Γ.15)$$

για τιμές του p στην κρίσιμη περιοχή, δηλαδή κοντά στο κατώφλι διήθησης p_c.

Για πραγματικά d-διάστατα πλέγματα οι προβλέψεις (Γ.14) και (Γ.15) για την p_c και την P(p) ισχύουν μόνο όταν για την διάσταση του χώρου d ισχύει $d \geq 6$. Φυσικά πρέπει να προηγηθεί η αντικατάσταση του K από $2d - 1$ (αφού $Z = 2d$ είναι ο αριθμός των γειτόνων στα υπερκυβικά πλέγματα, εν γένει, π.χ. για d=2 οι γείτονες είναι Z=4, κ.λ.π.). Η διάσταση $d_c = 6$ ονομάζεται και κρίσιμη διάσταση διήθησης γιατί για $d \geq d_c$ υπάρχει και ισχύει η απλή θεωρία μέσου πεδίου που προέκυψε από την λύση στο πλέγμα Bethe. Για d=1 (K=2) ισχύει $p_c = 1$ όπως αναμένεται αφού στην μία διάσταση η ύπαρξη έστω και μιας μη-κατειλημμένης (κενής) θέσης αποκλείει την ύπαρξη ενός "άπειρου" συσσωματώματος".

Είδαμε επομένως την αναλυτική λύση που προέκυψε μέσω της θεωρίας μέσου πεδίου για την μετάβαση της διήθησης. Η θεωρητική αυτή ανάλυση επιτεύχθηκε σχετικά εύκολα χάρις στο πλέγμα Bethe όπου η λύση είναι δυνατή λόγω της απουσίας κλειστών θηλειών, γεγονός που οδήγησε στην αναδρομική σχέση (Γ.10). Τα αποτελέσματα, όπως προαναφέρθηκε, είναι ακριβή για $d \geq d_c = 6$, δηλαδή ισχύουν σε ρεαλιστικά πλέγματα σε μεγάλες διαστάσεις d αφού είναι γνωστό ότι λόγω του μεγάλου αριθμού γειτόνων ($Z = 2d$) η παρουσία των κλειστών θηλειών γίνεται όλο και λιγότερο σημαντική.

Γ.5. Κρίσιμη συμπεριφορά-ομάδα ανακανονικοποίησης

Είδαμε ότι η τιμή του κατωφλίου διήθησης p_c δεν είναι η ίδια για κάθε πλέγμα αλλά διαφέρει όχι μόνο ανάλογα με τη διάσταση d αλλά και την τοπολογία του πλέγματος (Πίνακ. 1). Πιστεύεται όμως, σε αναλογία με την γενικότερη θεωρία των μεταβάσεων φάσης ότι η κρίσιμη συμπεριφορά κοντά στο p_c ιδιοτήτων όπως η πιθανότητα P(p) και η αγωγιμότητα σ(p) είναι

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

συμπαντική, δηλ. ανεξάρτητη της συμμετρίας του πλέγματος και εξαρτάται μόνον από την διάσταση του χώρου d. Η συμπεριφορά αυτή είναι συνέπεια της ύπαρξης ενός μόνο χαρακτηριστικού μήκους για όλα τα προβλήματα διήθησης, γνωστό και ως διηθητικό μήκος συσχέτισης που συμβολίζεται με ξ. Το μήκος αυτό απειρίζεται (μετρούμενο σε σχέση με την σταθερά πλέγματος a = 1) για p κοντά στο p_c με τον νόμο

$$\xi \approx | p - p_c |^{-\nu} \qquad (\Gamma.16)$$

που ορίζει τον εκθέτη μήκους συσχέτισης ν. Για $p < p_c$ το ξ μετράει το γραμμικό μέγεθος του μεγαλύτερου από τα πεπερασμένα συσσωματώματα, ενώ αντίθετα για $p > p_c$ ως ξ ορίζεται το τυπικό γραμμικού μήκους του μεγαλύτερου συσσωματώματος που αποτελείται από τις μη κατειλημμένες θέσεις. Για p πολύ κοντά στο p_c το ξ μεγαλώνει αφάνταστα, ενώ η τοπική δομή και οι αλληλεπιδράσεις σε μικρότερες κλίμακες από το ξ δεν επηρεάζουν τις φυσικές ιδιότητες του συστήματος.

Η κρίσιμη συμπεριφορά των P(p) και σ(p) για p (κοντά) στο p_c δίνεται από τις σχέσεις νόμων δύναμης

$$P(p) \approx (p - p_c)^{\beta} \qquad (\Gamma.17)$$

και

$$\sigma(p) \approx (p - p_c)^{t}, \qquad (\Gamma.18)$$

που ορίζουν τους κρίσιμους εκθέτες β και ν. Αντίστοιχοι κρίσιμοι εκθέτες ορίζονται και για όλες τις ποσότητες που απειρίζονται ή αυξάνουν με νόμο δύναμης στο κατώφλι διήθησης p_c, ενώ ένας από τους κυριότερους στόχους της θεωρίας και πειράματος είναι ο υπολογισμός αυτών των κρίσιμων εκθετών. Για μεγέθη μικρότερα του ξ είδαμε ότι το "άπειρο" συσσωμάτωμα εμφανίζει αυτοομοιότητα και μορφοκλασματική δομή σε διαφορετικές κλίμακες μεγέθους. Ο αριθμός των θέσεων στο "άπειρο" συσσωμάτωμα N_0 συμπεριφέρεται ως νόμος δύναμης (με την στατιστική έννοια), ώστε

$$N_0 \approx L^{d_f}, \qquad (\Gamma.19)$$

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με εκθέτη την μορφοκλασματική διάσταση d_f που δηλώνει τον διαθέσιμο χώρο στον οποίο γίνεται η διηθητική ροή. Όπως αναφέρθηκε και στην ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι για πεπερασμένο μέγεθος πλέγματος ισχύει $N = L^d$ στον d-διάστατο χώρο. Άρα, έχουμε (εξ.(Γ.7))

$$P(p) = N_o/L^d \quad , \qquad (Γ.20)$$

όπου N_o ο αριθμός θέσεων του "άπειρου" συσσωματώματος ενώ ακριβώς για $p = p_c$ έχουμε $\xi = L$ ώστε από τις εξ. (Γ.16), (Γ.17), (Γ.19) και (Γ.20) προκύπτει

$$d_f = d - \beta/\nu \qquad (Γ.21)$$

Για $d = 2$, αφού $\beta = 5/36$, $\nu = 4/3$ έχουμε $d_f = 91/48$. Βλέπουμε ότι η μορφοκλασματική διάσταση d_f είναι μικρότερη του d.

Για διάσταση d μεγαλύτερη ή ίση της $d_c = 6$ ισχύουν οι εκθέτες που προέκυψαν απο την λύση στο πλέγμα Bethe (π.χ. $\nu = 1/2$), ενώ στις ίδιες διαστάσεις χώρου από τις εξισώσεις (Γ.15) και (Γ.17) για τον εκθέτη της P(p) έχουμε $\beta=1$ ενώ για τον εκθέτη της αγωγιμότητας προκύπτει $t=3$. Παρατηρείστε ότι για $d \geq 6$ αυτοί οι κρίσιμοι εκθέτες παραμένουν οι ίδιοι ως συνάρτηση της διάστασης του χώρου d με τις τιμές τους που προκύπτουν από τη λύση στο πλέγμα του Bethe. Για διαστάσεις $1 < d < 6$ υπάρχει η εξής σχέση μεταξύ των εκθετών

$$t/\nu = (3d - 4 - \beta/\nu)/2, \qquad (Γ.22)$$

που ισχύει προσεγγιστικά. Από την εξ. (Γ.22) εμφανίζεται μια νέα διάσταση d_s που είναι γνωστή ως η διάσταση των φρακτονίων ή φασματική διάσταση. Η d_s αφορά την διάχυση και την πυκνότητα κατάστασης των φωνονίων ή μαγνονίων στο διηθητικό συσσωμάτωμα για p κοντά στο p_c ενώ ισχύει ότι $d_s \approx 4/3$ για κάθε διάσταση d. Στον Πιν. 2 φαίνονται οι τιμές των κρίσιμων εκθετών συναρτήσει της διάστασης του χώρου d.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

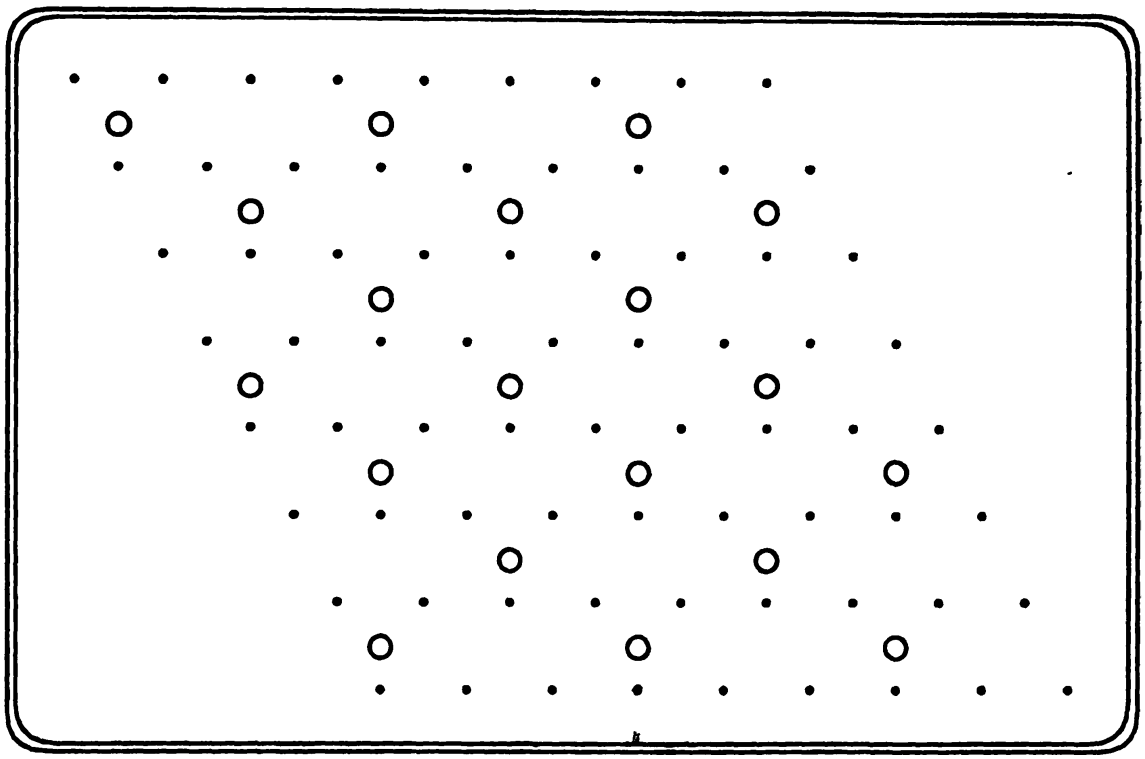
Πίνακας 2. **Τιμές των κρίσιμων εκθετών στην διήθηση**

d	d_f	β	ν	t
2	91/48	5/36	4/3	1.3
3	2.52	0.4	0.9	2.
≥ 6	4.	1.	0.5	3.

Η αυτοομοιότητα υπάρχει στο διηθητικό συσσωμάτωμα, προσεγγιστικά, για όλες τις κλίμακες μεγέθους μικρότερες του μήκους ξ (για $p=p_c$ λόγω της εξ. (Γ.16) προσέξτε ότι $\xi = \infty$), αρκεί φυσικά να είναι μεγαλύτερες της πλεγματικής σταθεράς a=1. Η τεχνική της ομάδας ανακανονικοποίησης μας οδηγεί κατευθείαν στην συμπαντικότητα των μεταβάσεων φάσης και στην απόδειξη της εξάρτησης των κρίσιμων εκθετών μόνο από την διάσταση του χώρου d. Ένα τέτοιο παράδειγμα απλής εφαρμογής αυτής της μεθόδου στον πραγματικό χώρο αποτελεί η μέθοδος του αποδεκατισμού, όπου οι μεταβλητές του πλέγματος μετασχηματίζονται με ταυτόχρονο περιορισμό ενός ποσοστού των πλεγματικών θέσεων.

Εφαρμόζουμε την μέθοδο του αποδεκατισμού στο τριγωνικό πλέγμα (d=2) για τον υπολογισμό p_c. Από το πλέγμα με τις τελείες (Σχ. Γ.7) μπορούμε να σχηματίσουμε ένα υπερπλέγμα που αποτελείται από τους κύκλους, αν στο κέντρο κάθε τριγώνου τοποθετήσουμε μια υπερθέση και κρατήσουμε μόνο αυτές τις υπερθέσεις έτσι ώστε κάθε τρεις θέσεις του αρχικού πλέγματος να ανήκουν σε μια μόνο υπερθέση (Σχ. Γ.7). Αν η πλεγματική σταθερά (που εκφράζει και το μήκος του δεσμού) είναι a η πλεγματική σταθερά του υπερπλέγματος, που είναι πάλι τριγωνικό, θα είναι $a' = b\,a$, όπου ο συντελεστής $b = \sqrt{3}$ (γιατί στο επίπεδο το πλέγμα περιέχει $b^2 = 3$ φορές περισσότερες θέσεις από το υπερπλέγμα, αφού για κάθε τρείς θέσεις του πλέγματος αντιστοιχεί μία θέση στο υπερπλέγμα). Αν οι πιθανότητες κατάληψης θέσης στο πλέγμα και στο υπερπλέγμα είναι p και p', αντίστοιχα, η p΄ υπολογίζεται συναρτήσει της p ως εξής: μία θέση του υπερπλέγματος είναι κατειλημμένη (με πιθανότητα p΄) όταν υπάρχει ένα συνδεδεμένο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ.Γ.7. Ανακανονικοποίηση του τριγωνικού πλέγματος στον πραγματικό χώρο. Οι τελείες είναι οι θέσεις του αρχικού πλέγματος ενώ οι κύκλοι αποτελούν το υπερπλέγμα (όπου η κάθε νέα θέση αποτελείται απο υπερθέση τριών αρχικών θέσεων). Οι κύκλοι αποτελούν ένα τριγωνικό (πάλι) υπερπλέγμα πλεγματικής απόστασης $a' = \sqrt{3}.a$, αν a είναι η πλεγματική απόσταση του αρχικού.

συσσωμάτωμα μεταξύ των θέσεων του αρχικού πλέγματος. Αυτό συμβαίνει όταν και οι τρεις θέσεις είναι κατειλημμένες (επειδή έχουμε ανεξάρτητα γεγονότα η πιθανότητα είναι p^3) ή δύο στις τρεις και αυτό συμβαίνει με τρεις τρόπους, άρα έχει πιθανότητα $3p^3(1-p)$. Επομένως,

$$p' = p^3 + 3p^2(1-p) \qquad (\Gamma.23)$$

και ακριβώς στο κρίσιμο σημείο p_c πρέπει να έχουμε απόλυτη ομοιότητα των δύο πλεγμάτων ($p' = p$), αφού το σύστημα δεν βλέπει την αλλαγή στην κλίμακα που προέκυψε λόγω του αποδεκατισμού. Η συγκέντρωση p^* για την οποία $p' = p$ δίνει το σταθερό σημείο του μετασχηματισμού και απο την λύση της εξ. (Γ.23) προκύπτει

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

$$p^* = 0,\ 1/2 \text{ και } 1\ . \qquad (\Gamma.24)$$

Απο τις τιμές της εξ. (Γ.24) η μη απλοϊκή τιμή δίνει σαφώς $p^* = p_c = 1/2$, που είναι ακριβώς το αποτελέσμα που προβλέπεται από τον Πίνακα 1 για το τριγωνικό πλέγμα. Λόγω του μετασχηματισμού $a' = ba$, εφ' όσον το μήκος συσχέτισης παραμένει άπειρο και μετρείται σε σχέση με την νέα πλεγματική σταθερά, $\xi/a = |p - p_c|^{-\nu}$ ενώ $\xi'/ba = |p' - p_c|^{-\nu}$ ισχύει

$$b|p' - p_c|^{-\nu} = |p - p_c|^{-\nu}, \qquad (\Gamma.25)$$

από την οποία αν λογαριθμήσουμε τα μέλη της παίρνουμε τον εκθέτη ν

$$1/\nu = \log[(p' - p_c)/(p - p_c)]/\log(b)\ . \qquad (\Gamma.26)$$

Στην συνέχεια μπορούμε να αναπτύξουμε την σχέση (Γ.23) κοντά στο $p^* = p_c$ ώστε

$$p' = p^* + \lambda(p - p^*) + \text{τάξεις } O[(p - p^*)^2]\ . \qquad (\Gamma.27)$$

Αν αγνοήσουμε τις παραπάνω τάξεις η σχέση (Γ.27) είναι γραμμική ως προς $(p - p^*)$ και ο συντελεστής λ είναι

$$\lambda = dp'/dp = 6p - 6p^2 = 3/2 \text{ για } p = p^* = p_c = 1/2\ , \qquad (\Gamma.28)$$

αφού ο μετασχηματισμός είναι γραμμικός $p' = p^* + 3/2\ (p - p^*)$. Από τις (Γ.28) και (Γ.26) προκύπτει το αποτέλεσμα

$$\nu = \log(b)/\log(\lambda) = \log(3^{1/2})/\log(3/2) = 1.355, \qquad (\Gamma.29)$$

που είναι πολύ κοντά στο ακριβές αποτέλεσμα για d=2 (ν = 4/3).

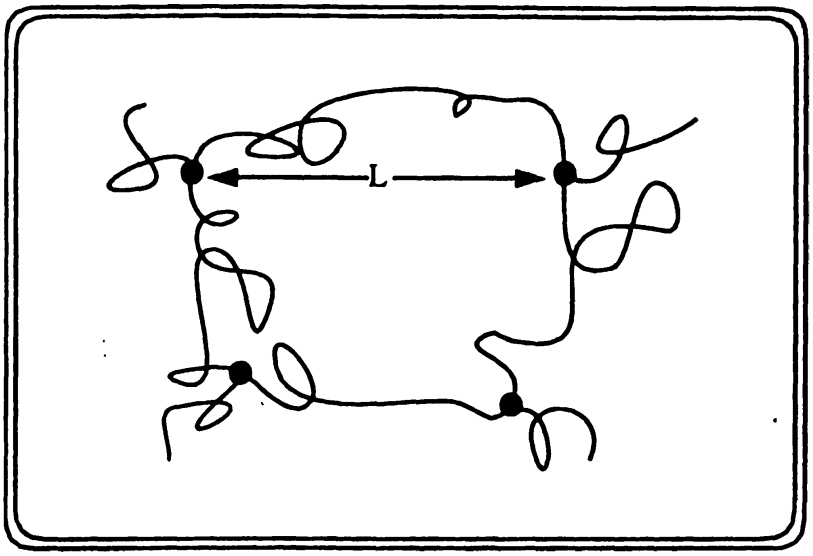
Δυστυχώς η υπέροχη συμφωνία με τα ακριβή αποτελέσματα που είδαμε δεν επιτυγχάνεται πάντα με την χρήση της απλής αυτής μεθόδου ομάδας ανακανονικοποίησης που χρησιμοποιήσαμε. Μια σαφώς επιτυχέστερη μέθοδος ομάδας ανακανονικοποίησης είναι ο συνδυασμός της με τεχνικές της προσομοίωσης σε μικρά πλέγματα, που είναι γνωστή ως κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους. Στην μέθοδο αυτή επιλύονται "ακριβώς" με αριθμητικό τρόπο μικρά πλέγματα (που είναι εξ' άλλου σχετικά εύκολο με τις σημερινές υπολογιστικές δυνατότητες) και οι ιδιότητες του "άπειρου" πλέγματος λαμβάνονται κατόπιν εξέτασης πλεγμάτων διαδοχικών

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

πεπερασμένων μεγεθών. Την μέθοδο αυτή την χρησιμοποιούν σήμερα πολλοί ερευνητές (... και ο συγγραφέας μαζί) και δίνει πολύ καλά αποτελέσματα σε πολλών ειδών μεταβάσεων φάσης, ακόμη και για τις κβαντικές μεταβάσεις σε μη περιοδικά συστήματα που αποτελούν το κύριο ενδιαφέρον μου (μετάβαση μετάλλου-μονωτή). Το παράδειγμα που είδαμε αποτελεί την απλοϊκότερη μορφή της ομάδας ανακανονικοποίησης στις δύο διαστάσεις και το χρησιμοποιήσαμε για να δώσουμε στον αναγνώστη μια ιδέα για την μέθοδο.

Γ.6. Η γεωμετρία του άπειρου συσσωματώματος

Το άπειρο συσσωμάτωμα για p κοντά στο p_c έχει ιδιαίτερα πολύπλοκη δομή. Από ότι ξέρουμε, κυρίως από υπολογιστικές προσομοιώσεις, μοιάζει με



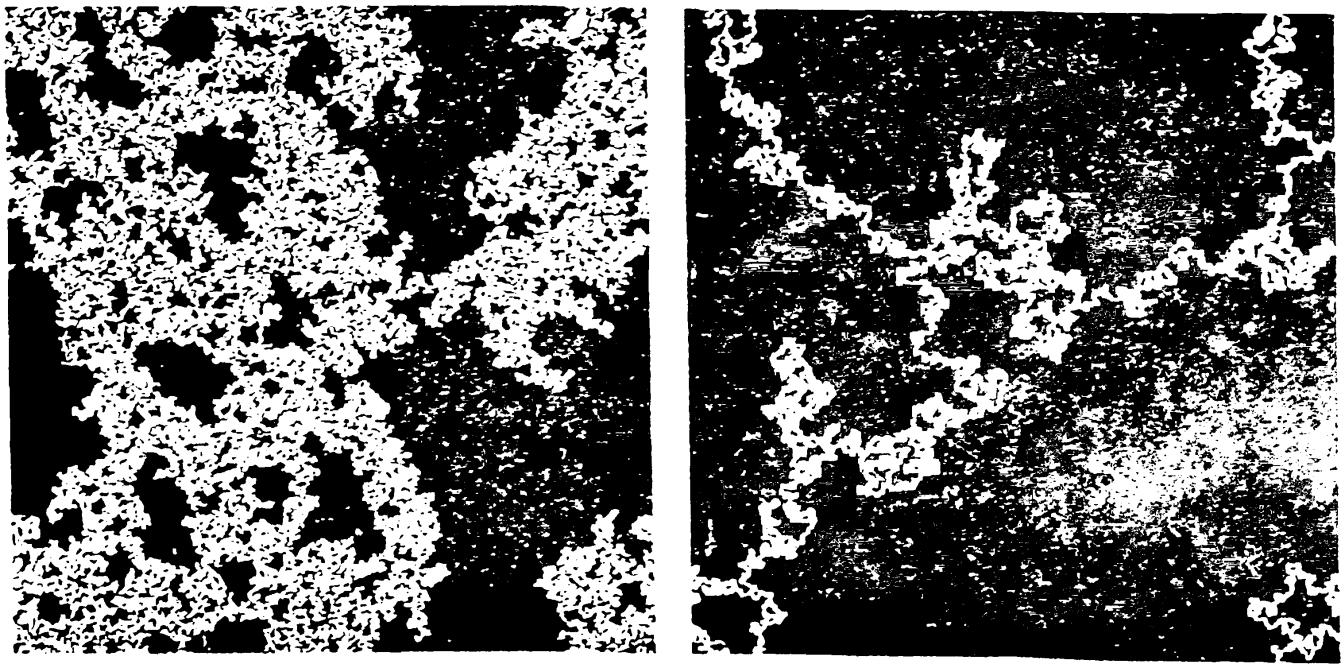
Σχ. Γ.8. Σχηματική παράσταση των μονοδιάστατων δεσμών, κόμβων (σημεία συνάντησης των δεσμών) και θηλειών (που φαίνονται ως κύκλοι με συσσωρευμένες θέσεις) στο "άπειρο" συσσωμάτωμα για p πολύ κοντά στο p_c. Τα νεκρά άκρα είναι αυτά που φεύγουν προς τα έξω (δεν τα διαπερνάει το ρεύμα) και μόνο μερικά έχουν σχεδιαστεί, αν και η περισσότερη μάζα ανήκει στα νεκρά άκρα.

ένα δίκτυο δρόμων, με βασικές λεωφόρους, χώρους παρκαρίσματος αλλά και μονόδρομους (νεκρά άκρα). Οι λεωφόροι αντιπροσωπεύουν τους μονοδιάστατους συνδέσμους που συναντώνται σε κόμβους σε απόσταση περίπου ίση με ξ.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Αποτελούνται κυρίως από "κόκκινους" δεσμούς που ονομάζονται έτσι γιατί διαμέσου αυτών γίνεται η ροή του ρεύματος ενώ αν διακοπούν την αγωγιμότητα γίνεται μηδέν (Σχ. Γ.8). Οι χώροι παρκαρίσματος είναι οι θηλειές στο Σχ. Γ.8 που αποτελούνται κύρια από "μπλε" δεσμούς που κι αν διακοπούν η αγωγιμότητα δεν μηδενίζεται. Επίσης υπάρχουν και τα νεκρά άκρα που είναι οι μονόδρομοι στο Σχ. Γ.8, οι οποίοι δεν άγουν ρεύμα και αποτελούνται από "κίτρινους" δεσμούς. Σε απουσία των νεκρών άκρων η δόμηση που προκύπτει (σύνδεσμοι-κόμβοι-φουσκάλες) αποτελούν την ραχοκοκκαλιά του συσσωματώματος. Οι Skal, Schklovskii και De Gennes πρότειναν το μοντέλο του Σχ. Γ.8, χωρίς τα νεκρά άκρα, για να αναπαραστήσουν τη ραχοκοκκαλιά του "άπειρου" συσσωματώματος.

Πρέπει εδώ να αναφερθεί ότι η μορφή του "άπειρου" συσσωματώματος περιγράφεται με τις ιδέες των μορφοκλασματικών (ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. Ι). Ένας γενικός κανόνας είναι πως ο ολικός αριθμός των θέσεων συμπεριφέρεται ως



Σχ. Γ.9. (α). Το διηθητικό συσσωμάτωμα για $p = p_c$. **(β)** Η ραχοκοκκαλιά του.

νόμος δύναμης με το μέγεθος και ορίζει τον εκθέτη d_f για το "άπειρο" συσσωμάτωμα και τον αντίστοιχο εκθέτη d_B για την ραχοκοκκαλιά. Επίσης ο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

αριθμός των "κόκκινων" , "μπλέ" και "κίτρινων" δεσμών αντίστοιχα ορίζουν τους εκθέτες $d_{κο}$, $d_{μπ}$ και $d_{κι}$!

Στο μοντέλο των Skal, Schklovskii και De Gennes μια τυπική απόσταση μεταξύ δύο γειτονικών κόμβων είναι περίπου ίση με ξ αλλά αν η αλυσίδα μεταξύ δύο κόμβων τεντωθεί το μήκος της είναι πολύ μεγαλύτερη και ίσο με

$$L \approx (p - p_c)^{-\zeta}, \qquad (Γ.30)$$

όπου $\zeta > \nu$ (εξ. Γ.16). Για $p \to p_c$ ο λόγος L/ξ τείνει στο άπειρο και η χρήση του εκθέτη ζ δικαιολογείται μόνον όταν ισχύει $\zeta > \nu$. Εν τούτοις έχει αποδειχτεί ότι $\zeta=1$ για όλες τις διαστάσεις d, γιατί ο αριθμός των "κόκκινων" δεσμών σε ένα τμήμα του πλέγματος μεγέθους L^d υπακούει στη σχέση δύναμης $L^{1/\nu}$ (δηλ. $d_{κο} = 1/\nu$). Αφού όμως για $d = 2$ έχουμε $\nu = 4/3$ (>1) ο αριθμός των "κόκκινων" δεσμών δεν πρέπει να είναι ιδιαίτερα σημαντικός. Πράγματι, αυτό ισχύει γενικά ότι στις χαμηλές διαστάσεις, όπου οι μονοδιάστατοι σύνδεσμοι δεν είναι σημαντικής επιρροής. Αντίθετα για μεγαλύτερες διαστάσεις, π.χ. d=3, έχουμε $\nu<1$ και $\zeta>\nu$ επομένως το μοντέλο των συνδέσμων-κόμβων-θηλειών είναι το πιο κατάλληλο για την περιγραφή του "άπειρου συσσωματώματος". Για $d \geq 6$ που παρατηρούνται μονοδιάστατοι δεσμοί και καθόλου οι θηλειές ή οι "μπλε" δεσμοί το μοντέλο αυτό γίνεται ακόμη πιό κατάλληλα και τα αποτελέσματα συμπίπτουν με αυτά του πλέγματος του Bethe.

Εφ' όσον το μοντέλο των συνδέσμων-κόμβων-θηλειών αποτυγχάνει για τις χαμηλές διαστάσεις του χώρου d, μια διαφορετική περιγραφή απαιτείται εκεί για να προσεγγίσει το "άπειρο" συσσωμάτωμα ή την ραχοκοκκαλιά του. Οι παρουσία των θηλειών είναι οι πλέον απαραίτητη σε μια τέτοια περιγραφή και η προσέγγισή τους με μη-τυχαία μορφοκλασματικά δίνει πολύ καλά αποτελέσματα(ΣΤΑΤ. ΦΥΣ. I). Οι μονοδιάστατοι σύνδεσμοι είναι πλέον ασήμαντοι για τον υπολογισμό κρίσιμων μεγεθών στις χαμηλές d ενώ οι θηλειές που περιέχουν άλλες θηλειές, κ.λ.π., παίζουν τον πρωτεύοντα ρόλο. Είναι εύκολο να δομήσουμε μορφοκλασματικά μοντέλα για την περιγραφή της ραχοκοκκαλιάς ώστε η μάζα της να αυξάνει με το μήκους με δύναμη d_B. Ένα τέτοιο παράδειγμα αποτελεί το Sierpinski gasket που δίνει $d_B \approx 1.585$ για d=2, ($d_f \approx 1.89$), πολύ κοντά στην τιμή που λαμβάνεται από υπολογιστικές προσομοιώσεις.



Γ.7. Μερικά ακόμη σχόλια

Γνωρίσαμε ένα απλό πρόβλημα μετάβασης φάσης γεωμετρικού τύπου με πλούτο όμως φαινομένων στην κρίσιμη περιοχή. Επίσης προσφέρει ένα παράδειγμα τυχαίου (στατιστικού) μορφοκλασματικού με την παρουσία του "άπειρου" διηθητικού συσσωματώματος και δείχνει την συμπαντικότητα (δηλ. εξάρτηση των κρίσιμων εκθετών μόνο απο την διάσταση d) στο κρίσιμο σημείο. Είδαμε πειράματα σε απλές διατάξεις (π.χ. σε χαρτί από γραφίτη) γνωρίσαμε όμως και τα υπολογιστικά πειράματα με την τεχνική της προσομοίωσης. Έτσι εκτός από μια καλή εισαγωγή στις μεταβάσεις φάσης παρουσιάσαμε και μια εισαγωγή στο πεδίο των προσομοιώσεων με ηλεκτρονικο υπολογιστή. Τα μεγαλύτερα δυνατά συστήματα ($\approx 10^{10}$ θέσεων) που έχουν προσομοιωθεί αφορούν την διήθηση.

Από την σκοπιά του πειραματικού φυσικού υπάρχουν πάρα πολλά πειραματικά δεδομένα που ανάγονται στο πρόβλημα της διήθησης, σε περιπτώσεις που ο χώρος καλύπτεται κατά τυχαίο τρόπο με δύο διαφορετικά είδη υλικών π.χ. μετάλλου-μονωτή, αδιαφανή-διαφανή, υπεραγώγιμα-φυσιολογικά μέταλλα, υγρά-στερεά,. κ.λ.π. Οι ερωτήσεις που πρέπει να απαντηθούν αφορούν την αγωγιμότητα, υπεραγωγιμότητα, τις μαγνητικές και μηχανικές ιδιότητες, κ.λ.π. Επίσης, έχουν μετρηθεί κατώφλια διήθησης και εν γένει όλες οι ιδιότητες που προκύπτουν από πραγματικά πειράματα συγκρίνονται με θεωρητικές προβλέψεις και υπολογιστικά πειράματα (Deutscher, 1986).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Λίγες αναφορές:

1. **Stauffer D.** "Introduction to percolation theory", Taylor & Francis, (1985).
2. **Efros A.L.** "Physics and Geometry of Disorder", Mir Publishers, (1986).
3. **Deutscher G.** "Percolation" στο "Chance and Matter" -Les Houches, (1986).

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ

ΤΟ ΚΛΑΣΣΙΚΟ ΧΑΟΣ

Δ.1 Εισαγωγή
Δ.2 Από την τάξη στο χάος
Δ.3 Ευαισθησία στις αρχικές συνθήκες - το φαινόμενο της πεταλούδας
Δ.4 Τρεις περιπτώσεις χάους
Δ.5 Μέθοδοι χαρακτηρισμού του χάους - εκθέτες Lyapunov
Δ.6 Επίλογος

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

MITSATAI

ΤΟ ΚΛΑΣΣΙΚΟ ΧΑΟΣ

Δ.1. Εισαγωγή

Η επιστήμη έχει ως σκοπό την πρόβλεψη των μελλοντικών συμβάντων και τον περιορισμό του απρόβλεπτου στην χρονική εξέλιξη. Εφοδιασμένοι με την γνώση, μέσω της πρατήρησης και του πειράματος, πιστεύουμε πως μπορούμε να γνωρίζουμε εκ των προτέρων την εξέλιξη ενός φυσικού (ή μη) φαινομένου, την εξέλιξη μιας αντίδρασης στη χημεία, την αλλαγή του καιρού, κ.λ.π. Πώς όμως γίνεται ποσοτικά αυτή η πρόβλεψη; Με την επίλυση των κατάλληλων εξισώσεων που περιγράφουν το σύστημα, μαζί με τις απαραίτητες αρχικές συνθήκες, μπορούμε να οδηγηθούμε στο τελικό αποτέλεσμα μετά από ορισμένους μαθηματικούς (ή αριθμητικούς με την υπολογιστική μηχανή) υπολογισμούς. Όμως, παρ' όλο που υπάρχει η συγκεκριμένη αυτή διαδικασία πολύ συχνά ή τυχαιότητα και το απρόβλεπτο βρίσκουν τον τρόπο και παρεισφρύουν στο τελικό αποτέλεσμα.

Στο φυσικό μας κόσμο μια ποικιλία φαινομένων παρουσιάζει πολύπλοκη απρόβλεπτη και τυχαία συμπεριφορά, που είναι γνωστή με το όνομα χάος. Παραδείγματα τέτοιας συμπεριφοράς έχουμε

(i) στην τυρβώδη ροή των ρευστών (π.χ. οι στρόβιλοι σ' έναν τυφώνα),

(ii) στη μακρόχρονη πρόβλεψη του καιρού, ή ακόμη και

(iii) στο σχήμα που παίρνει η κρέμα μέσα στον καφέ μας μετά από ένα ανακάτεμα. Αυτά τα λίγα παραδείγματα δείχνουν πως η τυχαιότητα βασιλεύει στο φυσικό κόσμο και η πρόβλεψη του μέλλοντος σε πολλές περιπτώσεις είναι πολύ περιορισμένης έκτασης.

Θα μπορούσε κάποιος να αποδώσει την μη προβλεψιμότητα στην πολυπλοκότητα του προβλήματος, λόγω του μεγάλου αριθμού των παραμέτρων που πρέπει να καθορισθούν και να υπολογισθούν για κάθε επόμενη χρονική στιγμή. Π.χ. στο πρόβλημα της πρόγνωσης του καιρού χρειάζεται ένας φανταστικά μεγάλος αριθμός από εξισώσεις για να περιγράψουμε όλα τα μόρια του αέρα, πράγμα που οδηγεί στο γνωστό μοριακό ή στατιστικό χάος. Όμως τα τελευταία χρόνια η φυσική επιστήμη έδειξε πως

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και ένα πλήρως ορισμένο (αιτιοκρατικό) σύστημα είναι δυνατόν να οδηγηθεί σε μη προβλέψιμη συμπεριφορά ακόμη κι όταν περιγράφει ένα μόνο μόριο με μια μόνο εξίσωση! Αυτό συμβαίνει γιατί οι αντίστοιχες εξισώσεις είναι μη γραμμικές, ώστε να μην διασπώνται στα επιμέρους στοιχεία τους και το άθροισμα δύο λύσεών τους δεν αποτελεί πάλι λύση. Επειδή η συντριπτική πλειοψηφία των φυσικών φαινομένων περιλαμβάνει τέτοιες μη γραμμικές εξισώσεις, έστω κι αν πολύ συχνά στην φυσική περιοριζόμαστε σε γραμμικές προσεγγίσεις, το χάος είναι αναπόφευκτο όπως και η ταυτόχρονη αδυναμία μας να προβλέψουμε το μέλλον.

Δ.2. Από την τάξη στο χάος

Ο Θαλής ο Μιλήσιος (624-546 π.Χ.) πρόβλεψε με επιτυχία μια έκλειψη ηλίου που έγινε κατά τη διάρκεια μιας μάχης μεταξύ Λήδων και Μήδων, ένα γεγονός που του έδωσε μεγάλη φήμη. Το 1580 ο Γαλιλαίος στην Pisa της Ιταλίας διαπίστωσε πως ένας πολυέλαιος που ταρακουνιόταν με το αεράκι είχε σταθερή περίοδο ταλάντωσης. Τον χρόνο τον μέτρησε χρησιμοποιόντας σαν ρολόϊ τον παλμό του χεριού του. Το 1910 ο κομήτης του Halley πέρασε πολύ κοντά από τη γή. Επανήλθε πάλι, με σχετική ακρίβεια, το 1986. Τέτοια φαινόμενα, όπως οι εκλείψεις του ηλίου και της σελήνης, οι παλίροιες, οι τροχιές των κομητών κ.λ.π. εμφανίζουν τάξη και χαρακτηρίζονται από περιοδικότητα και κανονικότητα στην εμφάνισή τους. Έτσι μικρά λάθη στις αρχικές συνθήκες αναμένεται να δώσουν, πάλι, μικρά λάθη στον αντίστοιχο προσδιορισμό τους σε επόμενες χρονικές στιγμές.

Τα παραπάνω φαινόμενα περιγράφονται από την κλασσική μηχανική μέσω της επίλυσης των κατάλληλων εξισώσεων. Όπως πολύ καλά γνωρίζουμε, οι εξισώσεις της κλασσικής μηχανικής, π.χ οι τρεις νόμοι του Newton, διατυπώνονται με διαφορικές μορφές που περιλαμβάνουν όχι μόνο τα φυσικά μεγέθη αλλά και τους αντίστοιχους ρυθμούς μεταβολής τους, δηλ. τις παραγώγους. Π.χ. στην ελεύθερη πτώση ενός σώματος η θέση x και ο ρυθμός μεταβολής της θέσης, η ταχύτητα $\dot{x}$, δεν είναι σταθερές. Κατά την κίνηση αυτή μόνο ο ρυθμός μεταβολής της ταχύτητας, η επιτάχυνση $\ddot{x}$, παραμένει σταθερή. Π.χ. η πληθώρα των αστρονομικών φαινομένων εξηγείται με αυτές τις

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

κλασσικές εξισώσεις, αν χρησιμοποιηθούν, απαραιτήτως, και οι κατάλληλες αρχικές συνθήκες (ΑΣ). Στα πλαίσια αυτά ο Laplace τον 18ο αιώνα συμπέρανε πως το σύμπαν ακολουθεί μια μοναδική προδιαγραμμένη πορεία, στο χρόνο. Με άλλα λόγια, ζούμε σε ένα ωρολογιακό κόσμο όπου όλα είναι προκαθορισμένα!

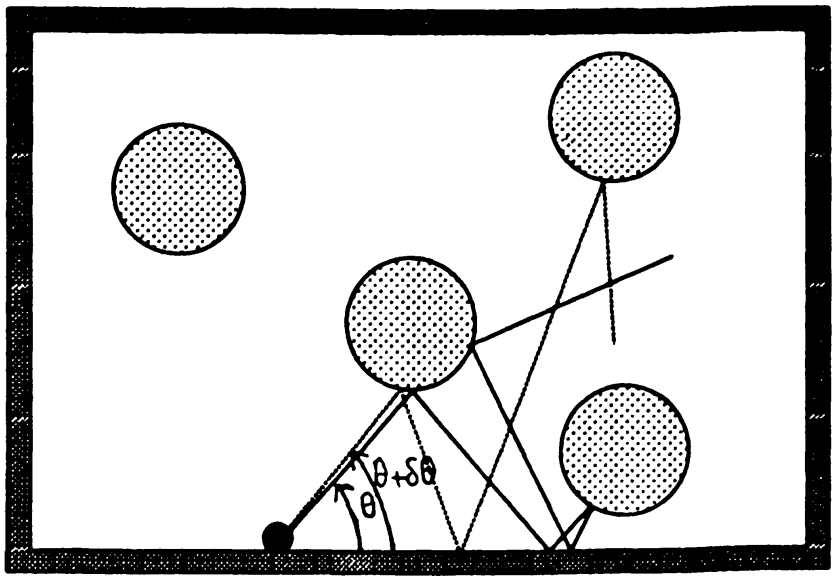
Κλασσικό χάος ονομάζεται η δυνατότητα ακόμη και απλών μη γραμμικών εξισώσεων να παράγουν κίνηση τόσο πολύπλοκη και ευαίσθητη στις δεδομένες Α.Σ. ώστε να είναι εντελώς τυχαία και απρόβλεπτη αναιρώντας την υπόθεση του Laplace. Τα χαοτικά συστήματα είναι υπερβολικά ευαίσθητα στις Α.Σ. ώστε η τελική τους κατάσταση καταλήγει να είναι ανεξάρτητη από αυτές, με όσο μεγάλη ακρίβεια κι αν τις έχουμε προσδιορίσει. Με άλλα λόγια ένα απειρο-ελάχιστο σφάλμα στις Α.Σ. μπορεί να οδηγήσει σε ένα τεράστιο σφάλμα στο τελικό αποτέλεσμα και, πρακτικά, οποιαδήποτε εξέλιξη μπορεί να συμβεί. Επομένως, η χρονική εξέλιξη χαρακτηρίζεται εντελώς τυχαία, στατιστική και απρόβλεπτη και ισοδυναμεί με τη ρίψη, σε κάθε χρονική στιγμή, ενός νομίσματος!

Δ.3. Ευαισθησία στις Α.Σ. - Το φαινόμενο της πεταλούδας

Η ευαίσθητη εξάρτηση από τις Α.Σ. που παρουσιάζουν πολλά φυσικά συστήματα και ακούει στο όνομα χάος εκφράζεται με το γεγονός ότι το αρχικό σφάλμα στον προσδιορισμό των Α.Σ. επιδέχεται μια εκθετική αύξηση. Η εκθετική αυτή αύξηση μας οδηγεί πολύ γρήγορα σε ανεξέλεγκτα μεγάλους αριθμούς π.χ. παρατηρείστε πως αν βάλουμε ένα χρηματικό ποσό σε μια Τράπεζα με τόκο 10% σε 5 χρόνα θα γίνει 2.5 φορές μεγαλύτερο, σε 10 χρόνια 6.2 φορές και σε 20 χρόνια θα πάρουμε 38, περίπου, φορές το αρχικό ποσό! Η εκθετική αύξηση των Α.Σ. φαίνεται και στο Σχ. Δ.1 όπου μια μικρή αλλαγή δθ στη γωνία θ της κατεύθυνσης της μπάλλας του μπιλιάρδου οδηγεί σε μια τελείως διαφορετική τροχιά.

Άρα, είναι δυνατόν ένα απλό αιτιοκρατικό (determinstic) σύστημα που περιγράφεται με συγκεκριμένες εξισώσεις και Α.Σ. να λειτουργήσει ως τυχαίο. Το εργαλείο για τη μελέτη της χαοτικής κίνησης είναι ο ηλεκτρονικός υπολογιστής που μπορεί να αποκαλύψει αυτή την ακραία εξάρτηση από τις

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. Δ.1. Η συνεχής γραμμή εκφράζει την τροχιά μιας μπάλλας μπιλλιάρδου που σκεδάζεται στα τοιχώματα και με τις άλλες μπάλλες, έχοντας σαν Α.Σ. τη γωνία θ. Η διακεκομένη γραμμή περιγράφει την τροχιά με Α.Σ. θ + δθ, όπου δθ <<θ.

Α.Σ. Το κλασσικό παράδειγμα αποτελεί το "φαινόμενο της πεταλούδας" του Lorentz. Μόλις το 1961 ο Lorentz μπόρεσε να ανάγει το πρόβλημα του καιρού στην επίλυση τριών μη γραμμικών διαφορικών εξισώσεων

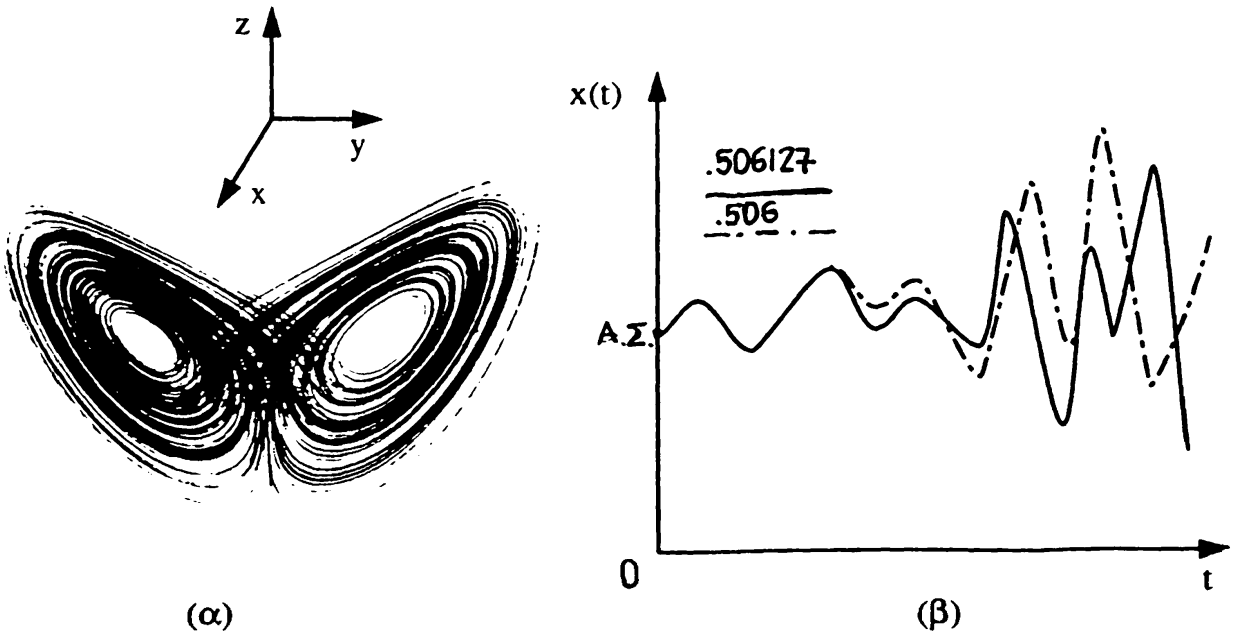
$$\boxed{\dot{x} = -10x + 10y} \qquad (\Delta.1)$$

$$\boxed{\dot{y} = 28x - y - xz} \qquad (\Delta.2)$$

$$\boxed{\dot{z} = -\frac{8}{3}z + xy}\ , \qquad (\Delta.3)$$

για τις μεταβλητές x, y, z που περιγράφουν γενικά χαρακτηριστικά του καιρού π.χ. πίεση, ταχύτητα ανέμου, κ.λ.π. Οι εξισώσεις του Lorentz πρέπει να αντιμετωπισθούν σαν μια χοντρική προσέγγιση στο πρόβλημα του άπειρου αριθμού εξισώσεων που πρέπει να διατυπωθούν για να αντιμετωπισθεί το φυσικό πρόβλημα. Οι εξ.(Δ.1-3) επιλύονται με τη βοήθεια του ηλεκτρονικού υπολογιστή και η αριθμητική τους λύση δίνει μια εικόνα (Σχ. Δ.2) που δείχνει την τρισδιάστατη εξέλιξη του συστήματος στο χρόνο.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



Σχ. 2. (α). Ο ελκυστής του Lorenz σε μορφή πεταλούδας. Κάθε σημείο της τροχιάς περιγράφει την κατάσταση της ατμόσφαιρας, μέσω των x(t), y(t) και z(t), σε μια ορισμένη χρονική στιγμή t.

(β). Η χρονική εξέλιξη της μεταβλητής x(t) με Α.Σ. x(0) = .506127 (συνεχής γραμμή) και x(0) = .506 (διακεκομμένη γραμμή). Φαίνεται η ακραία ευαισθησία από τις Α.Σ.

Στο Σχ. Δ.2(β) φαίνεται πως μια διαφορά της τάξης ενός χιλιοστού στις Α.Σ. οδηγεί σε δραματικές συνέπειες στην εξέλιξη της μεταβλητής x μετά από ένα χρονικό διάστημα. Η λογική (... γραμμικού τύπου σκέψης) υπόθεση θα ήταν πως ένα μικρό σφάλμα στις Α.Σ. δεν θα άλλαζε συμαντικά την εξέλιξη του καιρού ματά από ένα χρονικό διάστημα. Παρ' όλα αυτά, όμως, η μικρή αυτή διαφορά μεγενθύνεται εκθετικά και οδηγεί σε εντελώς απρόβλεπτη, τυχαία και χαοτική συμπεριφορά.

Το παραπάνω φαινόμενο είναι γνωστό και ως "φαινόμενο της πεταλούδας", λόγω της μορφής της εικόνας Σχ. Δ.2(α) που περιγράφει τη χρονική εξέλιξη. Η εικόνα αυτή είναι γνωστή ως ο "παράξενος ελκυστής του Lorentz". Επίσης, η ευαίσθητη εξάρτηση στις Α.Σ μπορεί να συνοψισθεί και με το εκλαικευμένο παράδειγμα μιας πεταλούδας που χτυπάει τα φτερά της, ας πούμε κάπου στα Γιάννινα, και μπορεί να επηρεάσει μετά από μερικές ημέρες τον καιρό π.χ. της Σιγκαπούρης ή ακόμη να δημιουργήσει έναν τυφώνα στο Tokyo. Έτσι, λόγω της ακραίας εξάρτησης από τις Α.Σ., μικρές τοπικές επιρροές παρ' όλο που φαίνονται λεπτομέρειες για την πρόβλεψη, δεν είναι!

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ

Είναι, σήμερα, γνωστό ότι η πρόβλεψη του καιρού είναι αδύνατη για το διάστημα μετά από 5 ημέρες.

Η ιδέα αυτής της ακραίας ευαισθησίας των χαοτικών συστημάτων από τις Α.Σ. δεν είναι καινούργια, ακόμη και στο κοινωνιολογικό επίπεδο. Από το 1650 ο Pascal είχε πει πως αν η μύτη της Κλεοπάτρας δεν ήταν τόσο καλοσχηματισμένη αλλά ελάχιστα πιο κοντή, η ιστορία της ανθρωπότητας μπορεί να ήταν τελείως διαφορετική. Αυτό γιατί έπεται η αλληλουχία: δεν θα ερωτεύονταν την Κλεοπάτρα ο Αντώνιος, δεν θα ερχόταν σε πόλεμο με τον Οκτάβιο, δεν θα κατέρρεε η Ρωμαϊκή αυτοκρατορία, κ.λ.π. Σε πιο πρακτικό επίπεδο, αν πάθουμε ένα ατύχημα μας είναι αδύνατον να μη σκεφθούμε: "άν είχα φύγει 2 λεπτά νωρίτερα θα είχα αποφύγει την σύγκρουση στο φανάρι". Τα παραπάνω παραδείγματα ισοδυναμούν, επίσης, με την περίπτωση ενός τεράστιου βράχου που είναι έτοιμος να ξεκολλήσει από την πλαγιά ενός βουνού, πράγμα που συμβαίνει μόλις 2-3 μυρμήγκια σκαρφαλώσουν πάνω του ...

Η θεωρία του χάους ανοίγει το κουτί της Πανδώρας. Είναι γνωστή σε όλους μας η αδυναμία μακρόχρονης πρόβλεψης, π.χ. στην εξέλιξη των τιμών στο χρηματιστήριο, στην εξέλιξη της οικονομίας κ.λ.π., που αποτελούν περιπτώσεις χαοτικής εξέλιξης. Άρα το σύμπαν, κι εμείς μαζί, ή οι αναπαραστάσεις του που παίρνουμε μέσω του ηλεκτρονικού υπολογιστή, εξελισσόμαστε με απρόβλεπτο τρόπο. Με το χάος παρά με την σκοπιμότητα.

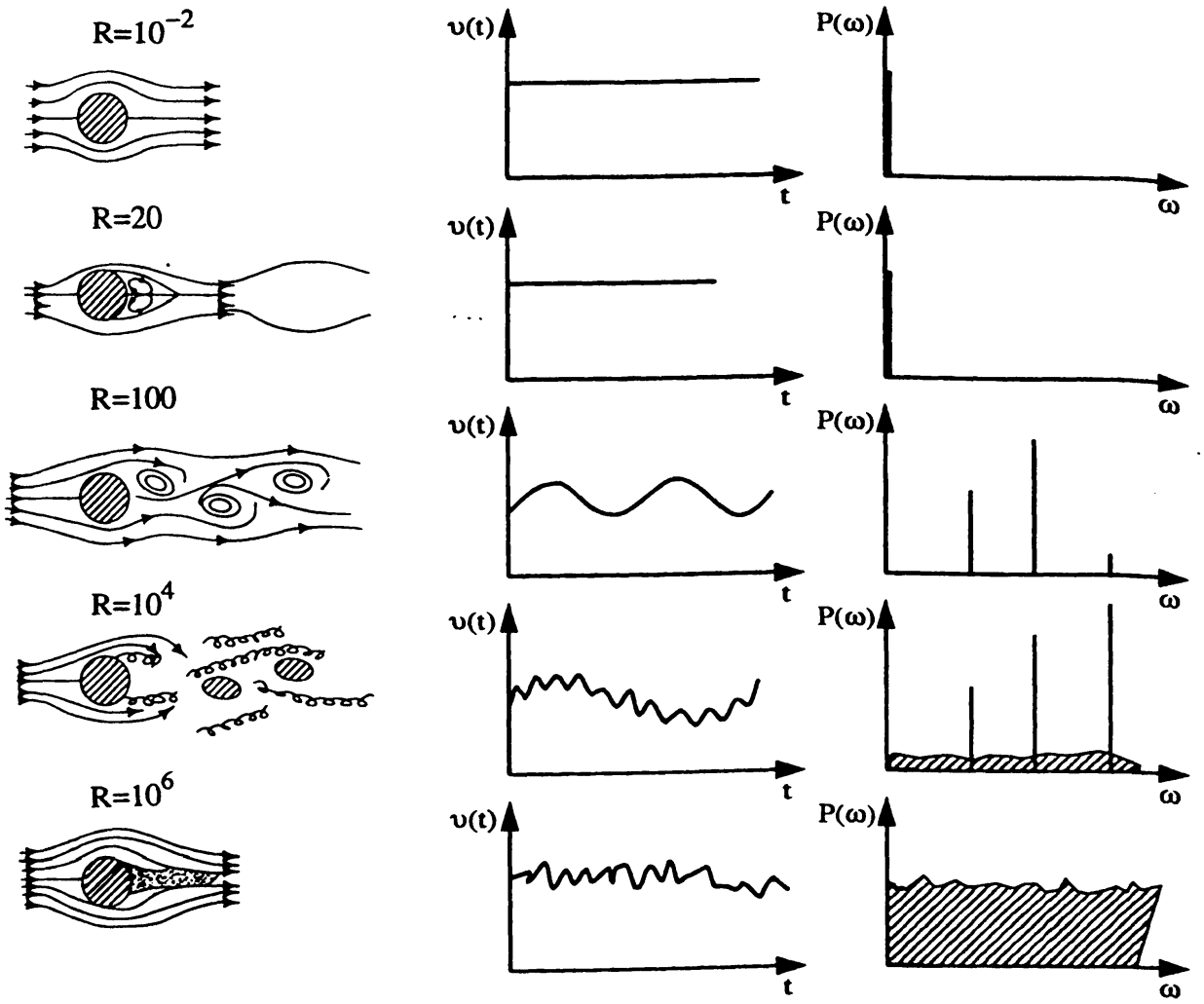
Δ.4. Τρεις περιπτώσεις χάους

Δ.4.1. Η τυρβώδης ροή των ρευστών

Στο Σχ.Δ.3. περιγράφεται η κίνηση ενός ρευστού στην οποία παρεμβάλεται ένα εμπόδιο. Όταν η ταχύτητα του ρευστού είναι πολύ μικρή (στην πράξη όταν ο αριθμός του Reynolds R που μετράει την μη γραμμικότητα είναι μικρός) η ροή είναι απόλυτα φυσιολογική. Αυξάνοντας την ταχύτητα στην ροή αρχίζουν να δημιουργούνται στρόβιλοι και τελικά, για πολύ μεγάλες ταχύτητες η ροή γίνεται ακανόνιστη και χαοτική. Στο ίδιο σχήμα φαίνεται η μεταβολή της ταχύτητας σαν συνάρτηση του χρόνου υ(t) και το αντίστοιχο

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

φάσμα ισχύος P(ω) που δείχνουν μια μετάβαση από την τάξη στο χάος για διαφορετικές τιμές του R.



Σχ. Δ.3. Η ροή ρευστού παρουσία ενός εμποδίου για διάφορες τιμές του αριθμού Reynolds. Το αντίστοιχο φάσμα ισχύος P(ω) από τις λίγες συχνότητες που το χαρακτηρίζουν στην περιοδική κίνηση μετατρέπεται στο χαοτικό φάσμα.("λευκού θορύβου") που περιλαμβάνει όλες τις συχνότητες.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Δ. 4.2. Η λογιστική απεικόνιση

Εξετάζουμε το απλό σύστημα μιας μεταβλητής x_n, την δεδομένη χρονική στιγμή n, μέσω της αναδρομικής σχέσης που την συνδέει με την τιμή της μεταβλητής x_{n+1}, την χρονική στιγμή n +1

$$x_{n+1} = f(x_n) . \qquad (\Delta.4)$$

Με κατάλληλη επιλογή της συνάρτησης f(x) η εξ. (Δ.4) αποτελεί ένα μοντέλο εξέλιξης πληθυσμών. Η εξίσωση για f(x) = a x (1−x) είναι

$$\boxed{x_{n+1} = a\, x_n\, (1 - x_n)} \quad , \quad x_n \in [0,1] , \qquad (\Delta.5)$$

και είναι γνωστή ως η λογιστική απεικόνιση*. Με την αρχική συνθήκη x_0 και με a την σταθερά ανάπτυξης η εξ. (Δ.5) επιτρέπει τον υπολογισμό των τιμών στις επόμενες χρονικές στιγμές μέσω των

$$x_1 = f(x_0)$$

$$x_2 = f(x_1) = f(f(x_0)) = f^{(2)}(x_0)$$

$$\vdots$$

$$x_n = f(x_{n+1}) = f(f \ldots f(x_0)) = f^{(n)}(x_0) . \qquad (\Delta.6)$$

Η εξ. (Δ.5) περιλαμβάνει τον αυξητικό γραμμικό όρο (ax_n) και τον μη γραμμικό όρο μείωσης $(-ax_n^2)$ που μπορεί να αποδοθεί στον υπερπληθυσμό.

Το ζητούμενο είναι ο ασυμπτοτικός όρος

$$\lim_{n\to\infty} x_n = x^* , \qquad (\Delta.7)$$

που από την εξίσωση (Δ.5), όταν υπάρχει σύγκλιση (μια τιμή που γεννάει τον εαυτό της),

$$x_{n+1} = x_n = x^* = ax^* (1 - x^*) \qquad (\Delta.8)$$

---

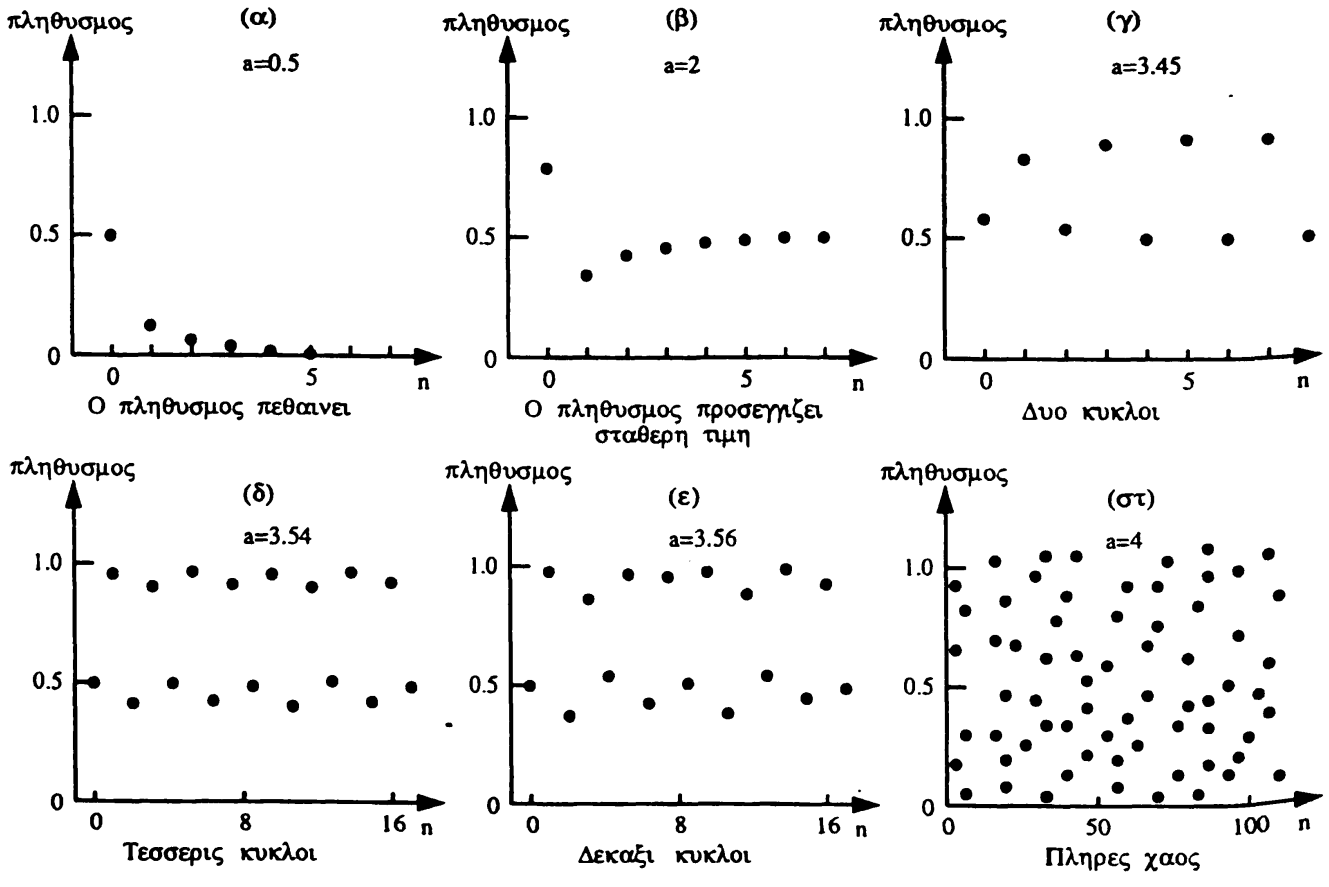
* Πολλά φυσικά συστήματα μπορεί να μοντελοποιηθούν με διαφορικές εξισώσεις πρώτης τάξης οι οποίες με επιλογή απειροστικού χρονικού βήματος μετατρέπονται στη διακριτή μορφή της εξ. (Δ.5)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με ρίζες τις

$$x^* = 0,\ 1 - 1/a\ . \qquad (\Delta.9)$$

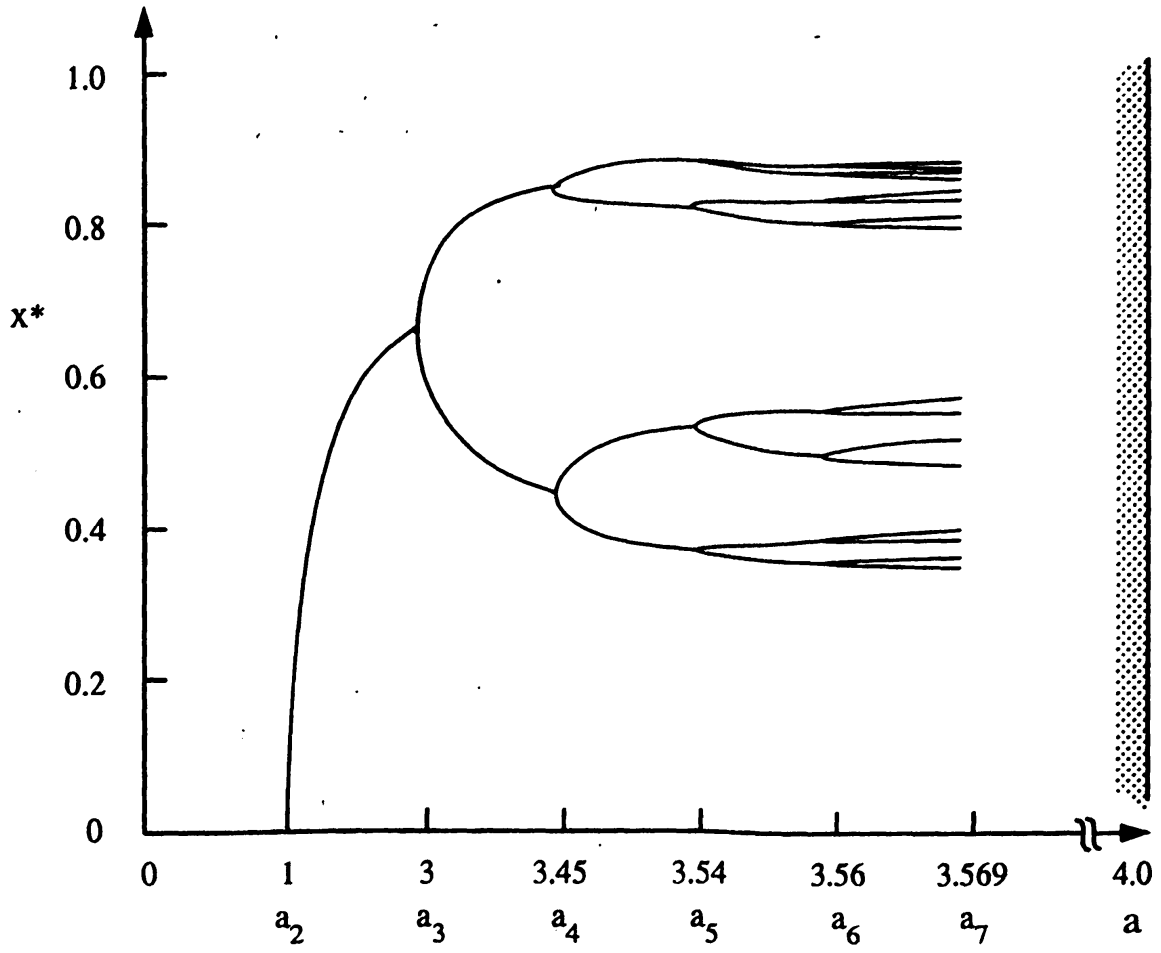
Στο Σχ.Δ.4. φαίνεται η χρονική εξέλιξη της μεταβλητής x_n συναρτήσει του χρόνου n για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου a. Διακρίνουμε τις περιπτώσεις: (i) 0<a<1, (ii) 1<a<3, (iii) a = 4. Στην περίπτωση (i) η x_n για μεγάλο n σταθεροποιείται στην τιμή $x^* = 0$ ενώ για την (ii) στην επίσης σταθερή τιμή 1−1/ a . Για a = 3 η περίοδος διπλάσιάζεται ώστε ο πληθυσμός είναι μεγάλος τον ένα χρόνο, μικρός τον επόμενο, κ.λ.π. Για a =3.45 η περίοδος διπλασιάζεται πάλι σε κύκλους των 4 ετών. Για a = 3.54, 3.564 και 3.569 η περίοδος διπλασιάζεται όλο και γρηγορότερα και γρηγορότερα. Για a =4 (περίπτωση (iii)) συμβαίνει το χάος και ο πληθυσμός x_n δεν σταθεροποι-



Σχ. Δ.4. Η εξέλιξη του πληθυσμού x_n συναρτήσει του χρόνου n για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου a.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

είται σε μια σταθερή περίοδο. Στα Σχ.Δ.5 και Σχ.Δ.6 φαίνονται οι διακλαδώσεις της ασυμπτοτικής τιμής x^* για μεγάλο n, συναρτήσει της παραμέτρου αύξησης a.



Σχ. Δ.5. Οι διακλαδώσεις στη λογιστική απεικόνιση όπου το σημείο σύγκλισης x^* σχεδιάζεται συναρτήσει της παραμέτρου a. Για a = 4 παρατηρούμε πως το χάος εκδηλώνεται με κάθε δυνατή τιμή στο διάστημα [0,1] και η απεικόνιση μπορεί να θεωρηθεί λαι ως γεννήτρια τυχαίων αριθμών σε αυτό το διάστημα.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει η χαοτική περίπτωση a=4 που επιδέχεται πλήρη αναλυτική λύση μέσω της αντικατάστασης

$$x_n = \left[\frac{1-\cos(2\pi\theta_n)}{2}\right] \qquad (\Delta.10)$$

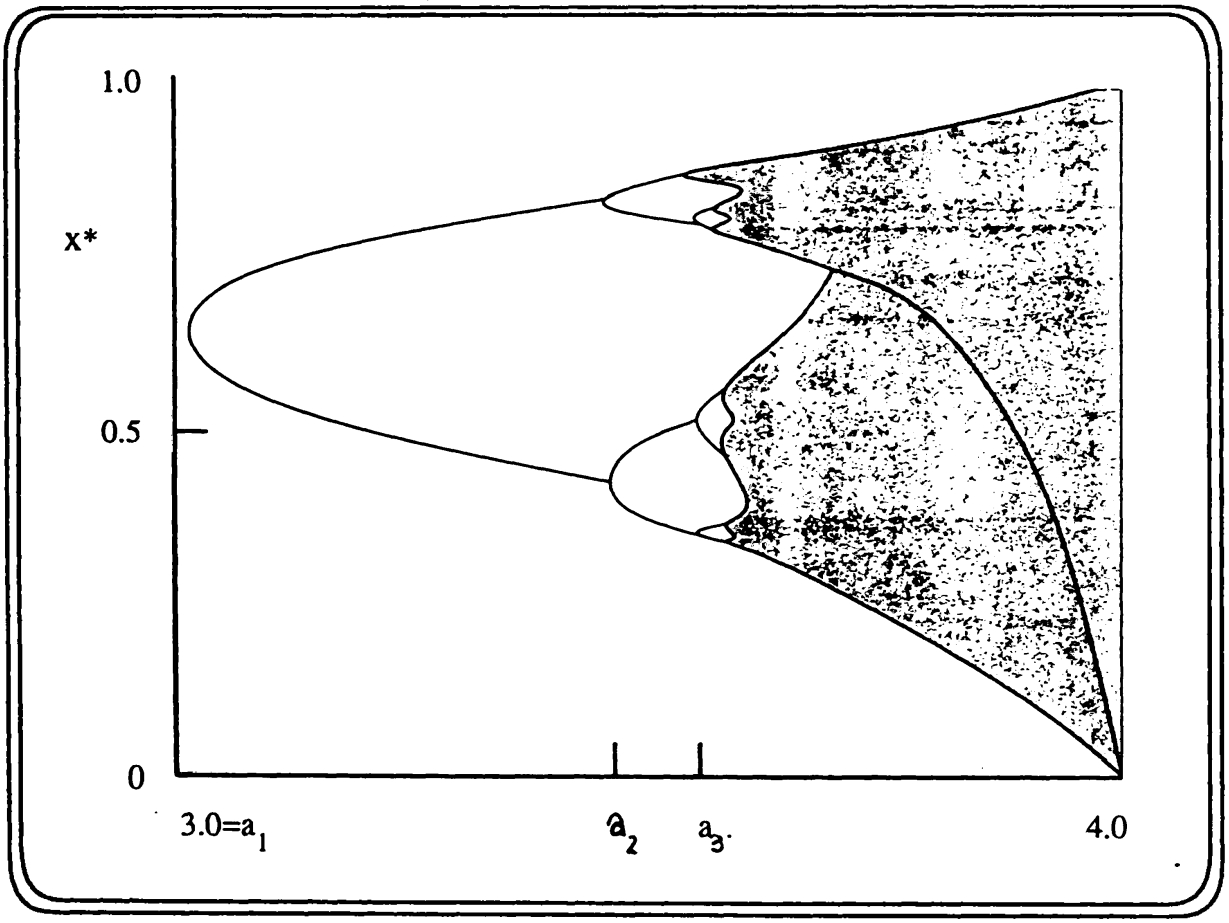
Με την αντικατάσταση του x_n στην εξ. (Δ.5) για a=4 έχουμε

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\left[\frac{1-\cos(2\pi\theta_{n+1})}{2}\right] = 4\left(\frac{1}{2}\right)[1-\cos(2\pi\theta_n)]\left(\frac{1}{2}\right)[1+\cos(2\pi\theta_n)]$$

$$= 1-\cos^2(2\pi\theta_n)$$

$$= \left(\frac{1}{2}\right)[1-\cos(4\pi\theta_n)] \quad * \quad . \qquad (\Delta.11)$$



Σχ. Δ.6. Μια ακόμη άποψη των διακλαδώσεων συναρτήσει της a.

Επομένως, η απεικόνιση της εξ. (Δ.5) μετατρέπεται στην απλούστερη μορφή

$$\theta_{n+1} = 2\,\theta_n \qquad (\Delta.12)$$

ή

---

* Ισχύει η ταυτότητα $2\cos^2 a = 1 + \cos a$.

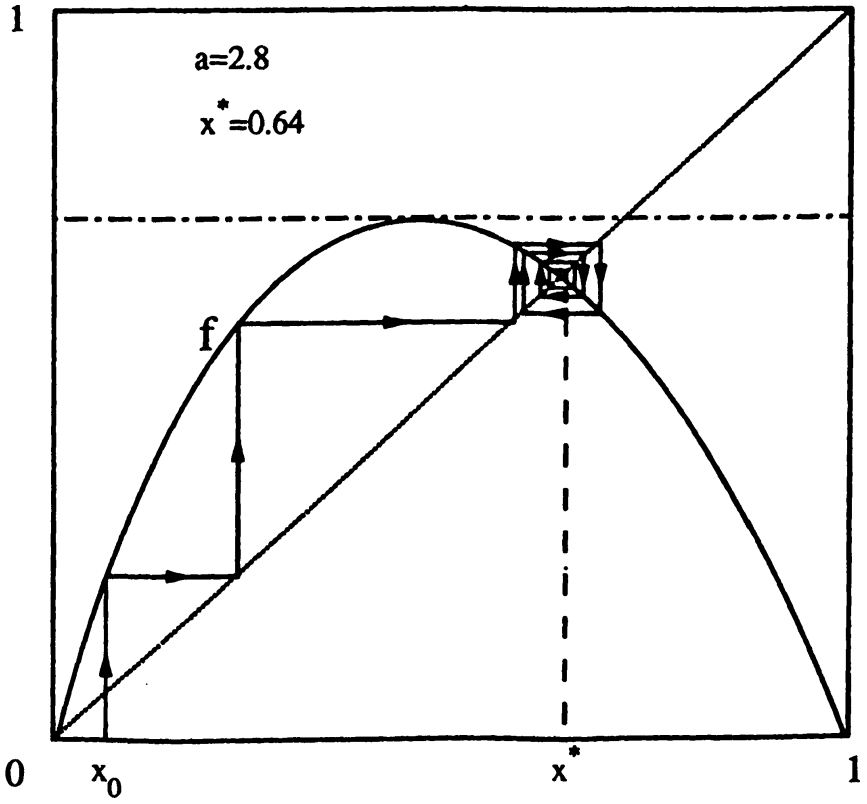
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\boxed{\theta_n = 2^n \theta_o} \quad , \; n = 1, 2, \ldots \quad . \tag{Δ.13}$$

Με εφαρμογή της εξ. (Δ.13) αρχίζουμε με μια τιμή για την θ_o (την Α.Σ.) γραμμένη σε δυαδική μορφή, π.χ.

$$\theta_o = 1.01101100001011\ldots \tag{Δ.14}$$

Παρατηρούμε πως για να βρούμε την τιμή x_n, μετά από n χρονικά βήματα, πρέπει να πολλαπλασιάσουμε το θ_o συνολικά n φορές με το 2 και στη συνέχεια να πάρουμε το $\left[\frac{1-\cos(2\pi\theta_n)}{2}\right]$. Επειδή λόγω του παράγοντα 2π το ακέραιο μέρος του $2\pi\theta_n$ (σε rad) μπορεί να αγνοηθεί στον υπολογισμό μας παρατηρούμε πως θα χρειασθεί η γνώση του θ_o με n δυαδικά ψηφία ακρίβεια. Επισημαίνεται πως κάθε πολλαπλασιασμός επί 2 μετατοπίζει την υποδιαστολή μια θέση πιο δεξιά στο θ_o.



Σχ. Δ.7. Η προσέγγιση στο σταθερό σημείο $x^* = 0.64$ για $a = 2.8$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Παράδειγμα: Αν $\theta_0 = 1\frac{1}{2} + 0\frac{1}{4} + 1\frac{1}{8} + 1\frac{1}{16} + 0\frac{1}{32} + 1\frac{1}{64} + 0\frac{1}{128} + 1\frac{1}{256}$ σε δυαδική μορφή, γράφεται ως

$$\theta_0 = 0.10110101\ldots \qquad (\Delta.15)$$

ενώ σε δεκαδική μορφή $\theta_0 = 0.71\ldots$ Ο πολλαπλασιασμός επί 2 απλώς μετατοπίζει την υποδιαστολή μια θέση προς τα δεξιά. Αγνοώντας, λοιπόν, το ακέραιο μέρος αρχίζοντας με το θ_0 θα βρουμε : $\theta_1 = 0.0110101...$, $\theta_2 = 0.110101...$, $\theta_3 = 0.10101...$, κ.λ.π. Βλέπουμε ότι το θ_n εξαρτάται από το n-οστό και τα υψηλότερα δυαδικά σημεία του θ_0. Με αυτόν τον τρόπο φαίνεται κατευθείαν το χάος από την εξ. (Δ.13). Τα αρχικά δεδομένα ξεχνιούνται γρήγορα εκτός κι αν έχουμε άπειρη ακρίβεια στην αρχική τιμή θ_0. Επομένως, με $a = 4$ η εξέλιξη από οποιοδήποτε $x_0 \in [0,4]$ μετά από μικρό χρονικό διάστημα η εξ. (Δ.5) θα δημιουργήσει τυχαίους αριθμούς μεταξύ [0,1]. (Δείτε, επίσης, τον τρόπο δημιουργίας τυχαίων αριθμών στο ΠΑΡΑΡΤ. Γ).

Άσκηση 1: Μετά από $n = \ln(1/\delta\theta_0)/\ln 2$ περίπου επαναλήψεις της εξ. (Δ.5) με $a = 4$, αρχίζοντας με δύο κοντινές τιμές x_0 παύουν πλέον να είναι κοντά. Ποιά είναι η τιμή του n όταν $x_0 = 0.62000$ και $x_0' = 0.62010$; Να υπολογίσετε πρώτα το $\delta\theta_0$ εφαρμόζοντας την εξ. (Δ.10) για x_0 και x_0'. (Να χρησιμοποιήσετε υπολογιστή τσέπης για τις πράξεις).

Επομένως ένα μικρό λάθος $\delta\theta_0$ στις Α.Σ. μεγενθύνεται εκθετικά (μετά από $n = \ln(1/\delta\theta_0)/\ln 2$ επαναλήψεις) αφού το

$$\delta\theta_n = 2^n \delta\theta_0 \ , \qquad (\Delta.16)$$

γίνεται της τάξης μονάδα, γεγονός που οδηγεί στο χάος.

Στην λογιστική απεικόνιση οι τιμές $a_1 = 3$, $a_2 = 3.4$, $a_3 = 3.54$, $a_4 = 3.564...$ που συμβαίνουν οι διπλασιασμοί της περιόδου επιτρέπουν τον υπολογισμό τον λόγο των αποστάσεων μεταξύ διαδοχικών τιμών μέσω της σχέσης

$$\delta_n = \frac{a_{n+1} - a_n}{a_{n+2} - a_{n+1}} \ , \qquad (\Delta.17)$$

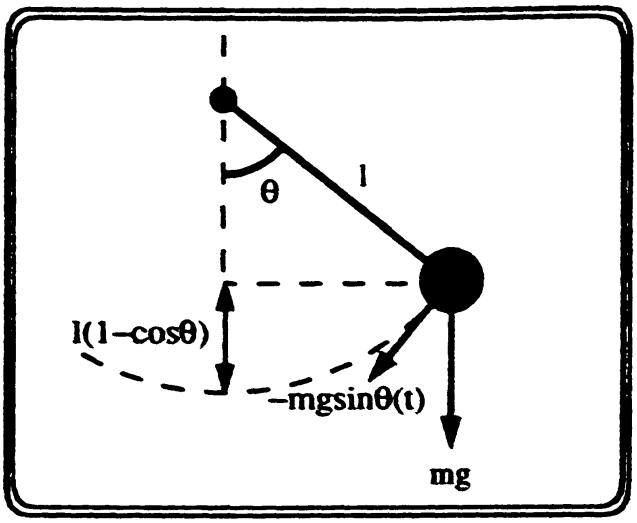
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

με όριο τη σταθερά Feigenbaum

$$\delta = \lim_{n\to\infty} \delta_n = 4.669201609102990 67\ldots . \qquad (\Delta.18)$$

Η ερμηνεία της σταθεράς δ προκύπτει από την παρατήρηση πως στην προσέγγιση προς το χάος κάθε περιοδική περιοχή μικραίνει, σε σχέση με την προηγούμενη, με έναν παράγοντα που προσεγγίζει το δ. Η σταθερά δ είναι συμπαντική (η ίδια) για κάθε σύστημα που ακολουθεί τον ίδιο δρόμο προς το χάος, δηλ. με διαδοχικούς διπλασιασμούς της περιόδου και χαρακτηρίζεται από μια τετραγωνική συνάρτηση f, όπως αυτή της εξ. (Δ.5).

Δ.4.3. Το μη γραμμικό απλό εκκρεμές.



Σχ. Δ.8. Το απλό εκκρεμές.

Η εξίσωση κίνησης του απλού εκκρεμούς μάζας m, μήκους l και με σταθερή επιτάχυνση βαρύτητας g είναι

$$mgl\ \sin\theta = -\,m\,l^2\,\frac{d^2\theta}{dt^2} \qquad (\Delta.19)$$

$$\Leftrightarrow \qquad \boxed{\ddot{\theta} + \omega_0^2 \sin\theta = 0}\ ,\ \omega_0^2 = g/l\,. \qquad (\Delta.20)$$

Ο όρος $\sin\theta$ είναι μη γραμμικός, αφού $\sin(\theta_1 + \theta_2) \neq \sin\theta_1 + \sin\theta_2$, ώστε θα μπορούσε, κάποιος, να αναμένει χαοτική συμπεριφορά.

Άσκηση 2 : Η εξίσωση (Δ.20) στη γραμμική προσέγγιση γράφεται ως

$$\ddot{\theta} + \omega_o^2\,\theta = 0 \qquad (\Delta.21)$$

που ισχύει για ταλαντώσεις μικρού πλάτους ($\sin\theta \approx \theta$). Η εξ. (Δ.21) έχει τη λύση

$$\theta(t) = A\,\cos(\omega_o t + \varphi_o) \qquad (\Delta.22)$$

με τις Α.Σ. $\theta(0) = A\cos\varphi_o$ και $\dot{\theta}(0) = -\omega_o A \sin\varphi_o$. Επειδή το σύστημα είναι συντηρητικό (αυτόνομο) δηλ. διατηρεί την ενέργειά του από την εξ. (Δ.21) πολλ/ζοντας επί $2\dot{\theta}$ έχουμε

$$2\dot{\theta}\,\ddot{\theta} + 2\,\omega_o^2\,\theta\,\dot{\theta} = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{d}{dt}(\dot{\theta})^2 + \omega_o^2\,\frac{d}{dt}(\theta^2) = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{d}{dt}(\dot{\theta}^2 + \omega_o^2\,\theta^2) = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \left(\frac{\dot{\theta}}{\omega_o}\right)^2 + \theta^2 = \frac{2E}{mgl} = \sigma\tau\alpha\theta.$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{\dot{\theta}^2}{(\sqrt{2E/\,ml^2}\,)^2} + \frac{\theta^2}{(\sqrt{2E/\,mgl}\,)^2} = 1\ . \qquad (\Delta.23)$$

Η ολική ενέργεια του συστήματος (κινητική* και δυναμική**) είναι

$$E = \frac{1}{2}\,m\,(l\,\dot{\theta})^2 + mg\,l(1 - \cos\theta) = \sigma\tau\alpha\theta.\ , \qquad (\Delta.24)$$

με τιμή στην γραμμική προσέγγιση ($\cos\theta \approx 1 - \theta^2/2$) $E = \frac{1}{2}\,m\,(l\,\dot{\theta})^2 + mg\,l\,\theta^2/2$.

Πολλαπλασιάζοντας την (Δ.20) επί $\dot{\theta}$ και λαμβάνοντας υπ' όψιν πως

$$\dot{\theta}\,\ddot{\theta} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\dot{\theta}^2\right) \qquad (\Delta.26)$$

και

$$\dot{\theta}\,\sin\theta = \frac{d}{dt}\,(1 - \cos\theta) \qquad (\Delta.27)$$

---

* Η κυκλική ταχύτητα ω είναι η παράγωγος του τόξου $l\,\theta$ ως προς t, δηλ. $\omega = l\,\dot{\theta}$.

** δίνεται από την ενέργεια που έχει η μάζα m σε ύψος $l(1 - \cos\theta)$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

έχουμε

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\dot{\theta}^2 + \frac{g}{l}(1-\cos\theta)\right) = 0. \qquad (\Delta.28)$$

Επομένως, από την (Δ.28) προκύπτει

$$\frac{1}{2}\dot{\theta}^2 + \frac{g}{l}(1-\cos\theta)) = C\ , \qquad (\Delta.29)$$

με C = σταθ. και από την (Δ.24)

$$C = \frac{E}{ml^2}\ . \qquad (\Delta.30)$$

Άρα, πάλι παρατηρούμε πως η αρχή διατήρησης της ενέργειας (E = σταθ.) καθορίζει και τη φύση της κίνησης στον φασικό χώρο $(\theta, \dot{\theta})$. Επειδή

$$\dot{\theta} = 0 \quad \text{όταν} \quad \theta = \theta_{max} \qquad (\Delta.31)$$

στο υψηλότερο σημείο της ταλάντωσης, από τις εξ. (Δ.24) και (Δ.29)

$$C = \frac{E}{ml^2} = \frac{2g}{l}(1 - \cos\theta_{max})\ , \qquad (\Delta.32)$$

ώστε αντικαθιστώντας στην (Δ.29)

$$\dot{\theta} = \sqrt{\frac{2g}{l}(\cos\theta - \cos\theta_{max})}\ . \qquad (\Delta.33)$$

Από την εξ. (Δ.33) προσδιορίζεται η περίοδος της κίνησης, με $dt = d\theta\,(d\theta/dt)^{-1}$,

$$\boxed{T = 4\int_0^{T/4} dt = 4\int_0^{\theta_{max}} \frac{d\theta}{\sqrt{\frac{2g}{l}(\cos\theta - \cos\theta_{max})}}}\ . \qquad (\Delta.34)$$

Επομένως, η περίοδος T προσδιορίζεται σε κλειστή μορφή από το ελλειπτικό ολοκλήρωμα της εξ. (Δ.34), για τις δεδομένες Α.Σ. Οι λύσεις της εξ. (Δ.20) φαίνονται στο Σχ. Δ.9.

Άσκηση 3: Η Χαμιλτονιανή για το απλό εκκρεμές συναρτήσει της γενικευμένης θέση (γωνία θ) και της αντίστοιχης γενικευμένης ορμής ($P_\theta = ml^2\dot{\theta}$) λαμβάνει την μορφή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$H(P_\theta,\theta) = \frac{P_\theta^2}{2ml^2} + (1 - \cos\theta)\, mgl\,, \qquad (\Delta.35)$$

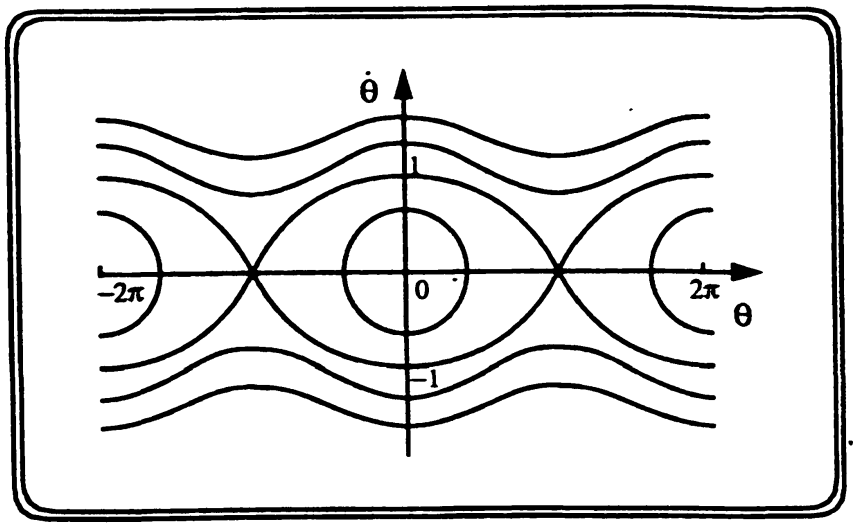
με εξισώσεις του Hamilton τις

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P_\theta} \qquad (\Delta.36)$$

και

$$\frac{dP_\theta}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta}\,. \qquad (\Delta.37)$$

Να δείξετε ότι από αυτές τις εξισώσεις οδηγούμεθα στην εξίσωση κίνησης (Δ.20).



Σχ. Δ.9. Η κίνηση του μη γραμμικού εκκρεμούς στον διδιάστατο φασικό χώρο $(\theta,\dot\theta)$. Η γραμμική προσέγγιση (Δ.21) περιγράφει τις ταλαντώσεις μικρού πλάτους που αντιπροσωπεύουν τις μικρές ελλείψεις στο κέντρο ακτίνων $\sqrt{\frac{2E}{ml^2}}$ και $\sqrt{\frac{2E}{mgl}}$, αντίστοιχα και περίοδο $T_0 = \frac{2\pi}{\omega_0} = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$ ανεξάρτητη από το πλάτος της ταλάντωσης.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Για το σύστημα ενός βαθμού ελευθερίας Δ.9 που μελετάμε η κίνηση στον διδιάστατο φασικό χώρο φαίνεται στο Σχ. Δ.9. Η αρχή $\theta = \dot{\theta} = 0$ και τα ισοδύναμα περιοδικά σημεία $\theta = \pm 2n\pi$ με $\dot{\theta} = 0$, για $n = 1, 2, \ldots$ αναπαριστούν τα "σταθερά σημεία" της κίνησης όπου το εκκρεμές είναι σε ακινησία. Το σημείο $\theta = \pi$, $\dot{\theta} = 0$ και τα ισοδύναμα σημεία $\theta = \pm (2n + 1)\pi$, $\dot{\theta} = 0$ είναι τα "ασταθή σταθερά σημεία" της κίνησης με το εκκρεμές σε ακινησία αλλά έτσι ώστε η παραμικρή διαταραχή να το κάνει να απομακρύνεται από αυτά. Οι κλειστές καμπύλες (μικρές τιμές του $\dot{\theta}$) αναπαριστούν περιοδικές ταλαντώσεις (εξ. Δ.23) ενώ για μεγάλες τιμές του $\dot{\theta}$ έχουμε απεριόριστη κίνηση και το εκκρεμές εκτελεί περιστροφές (γίνεται εκκρεμές μονής κατεύθυνσης), με την θετική ($\dot{\theta}<0$) ή την αρνητική ($\dot{\theta}>0$) έννοια.

Άσκηση 4: Από την έκφραση (Δ.34) με την αντικατάσταση $\cos\theta = 1-2\sin^2(\theta/2)$ να δείξετε το αποτέλεσμα

$$T = 4\sqrt{\frac{l}{g}}\int_0^1 dz \,/\, \sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)} \qquad (\Delta.38)$$

για την περίοδο του μη γραμμικού εκκρεμούς, με

$$z = \sin(\theta/2) \,/\, \sin(\theta_{max}/2)\ , \quad k = \sin(\theta_{max}/2). \qquad (\Delta.39)$$

Το ολοκλήρωμα στην σχ. (Δ.38) μπορεί να αναπτυχθεί, ώστε

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}\left(1 + \frac{k^2}{4} + \frac{9k^2}{64} + \ldots\right), \qquad (\Delta.40)$$

ώστε για $\theta_{max} << 1$ rad

$$T = T_o\left[1 + \frac{\theta_{max}}{16} + \quad\right], \qquad (\Delta.41)$$

απ' όπου φαίνονται η γραμμική προσέγγιση $T = T_o$ και οι μη γραμμικές διορθώσεις.

Ένα δυναμικό σύστημα N βαθμών ελευθερίας έχει φασικό χώρο (θέσεις και ορμές) 2N διαστάσεων. Τα χαμιλτονιανά συστήματα όπως το εκκρεμές με ένα μόνο βαθμό ελευθερίας (N=1) είναι πάντα ολοκληρώσιμα με βάσει τις

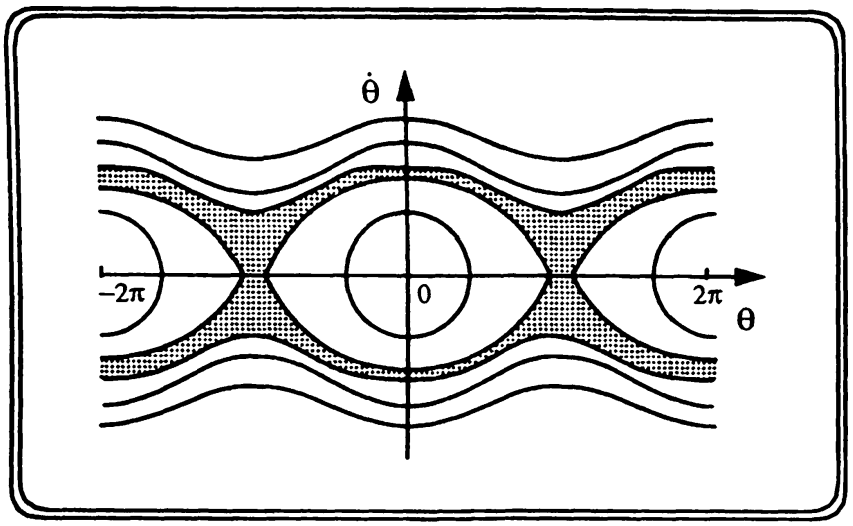
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

τεχνικές που προηγήθηκαν. Ολοκληρωσιμότητα για σύστημα Ν βαθμών ελευθερίας είναι η εύρεση Ν ολοκληρωμάτων ή σταθερών κίνησης (π.χ. για N=1 υπάρχει η εξ. Δ.29). Στα μη γραμμικά συστήματα N=1 βαθμού ελευθερίας υπάρχει πάντα μια σταθερά κίνησης, η ενέργεια Ε, και είναι πάντα, ολοκληρώσιμα. Χαοτικά Χαμιλτονιανά συστήματα μπορεί να έχουμε και για N=1 όταν δεν διατηρείται η ενέργεια και είναι μη συντηρητικά. Συνηθισμένη περίπτωση είναι τα χαοτικά συστήματα αρκεί να είναι μεγαλύτερου του ενός βαθμού ελευθερίας (N>1).

Το μη συντηρητικό Χαμιλτονιανό σύστημα N=1 βαθμού ελευθερίας που περιγράφεται από την έξίσωση

$$\ddot{\theta} + \omega_o^2 \sin\theta + c\dot{\theta} = 0 \quad , \quad \omega_o^2 = \text{σταθ.}, \qquad (\Delta.42)$$

επιτρέπει την προυσία του χάους (δεν είναι ολοκληρώσιμο) μέσω μιας "μη φυσιολογικής" τροχιάς στον φασικό χώρο. Αυτό οφείλεται στον όρο απόσβεσης $c\dot{\theta}$ που το κάνει μη συντηρητικό (Ε ≠ σταθ.) με μηδενικό αριθμό ολοκληρωμάτων κίνησης(Σχ. Δ.10).



Σχ. Δ.10. Το χάος στον φασικό χώρο (θ,θ̇) από την εξ. (Δ.42).

Τα σημεία (0,0) και (π,0) του φασικού χώρου είναι ελκυστές, αφού σε αυτά οδηγείται η τροχιά που αντιστοιχεί στην κίνηση του εκκρεμούς από την εξ. (Δ.42) με κατάλληλες Α.Σ. Πρέπει επίσης να αναφερθεί πως χάος εμφανίζεται στο απλό εκκρεμές και με παρουσία μιας εξωτερικής επίδρασης $-A\cos(\omega_D t)$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Δ.5. Μέθοδοι χαρακτηρισμού του χάους - εκθέτες Lyapunov

Από τις παραπάνω εκδηλώσεις του χάους συμπεραίνουμε πως δεν είναι απαραίτητο να υπάρχουν πολλοί βαθμοί ελευθερίας σε ένα σύστημα για να δημιουργηθεί χάος. Σε αντιδιαστολή με το συνηθισμένο στατιστικό ή μοριακό χάος της στατιστικής φυσικής που οφείλεται στην πληθώρα των βαθμών ελευθερίας που χαρακτηρίζουν ένα στατιστικό σύστημα, μπορεί να εμφανισθεί χάος και στην περίπτωση λίγων μη γραμμικών εξισώσεων. Το κλασσικό χάος ορίζεται από την ακραία εξάρτηση από τις Α.Σ. ώστε ένα χαοτικό σύστημα είναι ιδιαίτερο ευαίσθητο στην επιλογή των Α.Σ. Αυτό σημαίνει, στην πράξη, πως με δεδομένες δύο Α.Σ. που είναι πολύ κοντά ένα χαοτικό σύστημα θα εξελιχθεί στο χρόνο σε δύο τελείως διαφορετικές καταστάσεις. Η θεωρία του χάους, επομένως, αντιβαίνει την κοινή λογική ότι με δεδομένο ένα σύνολο από Α.Σ. μπορούμε να προβλέψουμε τη συμπεριφορά εκκρεμών, πλανητών, κ.λ.π. για κάθε χρονική στιγμή. Π.χ. σε ένα απλό παιχνίδι της δημιουργίας ενός αμόλοφου, αδειάζοντας άμμο από ψηλά, το τελικό σχήμα πάντα θα εξαρτάται άμεσα από τον τρόπο με τον οποίο αρχίζουμε. Βλέπουμε πως αν επιχειρήσουμε να προβλέψουμε την μελλοντική συμπεριφορά του συστήματος το παραμικρό λάθος στις Α.Σ. δημιουργεί πολύ μεγάλο σφάλμα στην πρόβλεψη της τελικής κατάστασης.

Παράδειγμα: Ένα ακόμη παράδειγμα χαοτικού συστήματος αποτελεί και η χρονική εξέλιξη του ηλιακού συστήματος, παρ' όλο που η κίνηση των πλανητών γύρω από τον ήλιο είναι ήδη γνωστή και θεμελιωμένη από τους Kepler, Newton και Einstein. Αυτό συμβαίνει επειδή είναι αδύνατος ο υπολογισμός της χρονικής εξέλιξης συστήματος 3 ή περισσότερων σωμάτων που κινούνται με βάσει τις βαρυτικές δυνάμεις, αφού είναι αδύνατη η γνώση των Α.Σ. με άπειρη ακρίβεια. Ανεξ[illegible]ητα του πόσο μικρά είναι τα σφάλματα που υπεισέρχονται στις Α.Σ. θα οδηγήσουν για αρκετά μεγάλους χρόνους σε υπερβολικά σφάλματα και μη προβλέψιμη συμπεριφορά. Άρα, δεν έχουμε ουσιαστικά γνώση για το πως συμπεριφέρεται το ηλιακό σύστημα σε πολύ μεγάλους χρόνους! Υπάρχουν συγκεκριμένα τέτοια παραδείγματα χάους στο ηλιακό σύστημα αλλά συνήθως για να ξεχάσει το σύστημα τις αρχικές συνθήκες

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

και να εμφανισθεί το χάος απαιτούνται πολύ μεγάλοι χρόνοι, ακόμη μεγαλύτεροι και από την ηλικία του σύμπαντος.

Είδαμε ότι συστήματα με χαοτική συμπεριφορά χαρακτηρίζονται από μη γραμμικότητα στις εξισώσεις ενώ περιγράφονται με κάποιου είδους αναδρομική σχέση της μορφής (Δ.10). Η επαναληπτική συμπεριφορά, για μεγάλους χρόνους, χαρακτηρίζεται από : **(i)** σταθερά σημεία, **(ii)** κύκλους τιμών με ορισμένη χρονική περίοδο και **(iii)** χάος, όπου η εξέλιξη είναι απρόβλεπτη και η ακολουθία τιμών είναι πλήρως απεριοδική. Η εκτίμηση της χαοτικής συμπεριφοράς γίνεται με διάφορους τρόπους που εκφράζουν του πόσο ευαίσθητη είναι η εξάρτηση του συστήματος από τις Α.Σ. Επίσης η χαοτική συμπεριφορά αναδεικνύεται μέσω των φασμάτων ισχύος.

Οι εκθέτες του Lyapunov αποτελούν έναν άμεσο ποσοστικό προσδιορισμό για την αστάθεια ενός ελκυστή και εκτιμούν το πόσο χαοτική είναι η συμπεριφορά ενός συστήματος. Η εκθετική αύξηση μιας μικρής διαφοράς δx_0 στις Α.Σ. ενός χαοτικού συστήματος γράφεται ως

$$\delta x_n = e^{n\gamma}\, \delta x_0 \quad , \qquad (\Delta.43)$$

μετά από n επαναλήψεις. Ο εκθετικός παράγοντας e^{γ} που δίνει το πως εκτείνεται ή μικραίνει η απόσταση μεταξύ δύο σημείων σε μία επανάληψη και ορίζει τον εκθέτη του Lyapunov γ.

Στην περίπτωση της απεικόνισης (Δ.4) εάν δύο Α.Σ. διαφέρουν στην ποσότητα $\delta x_0 = x_0 - x_0'$, μετά από μία επανάληψη διαφέρουν κατά τη θετική ποσότητα

$$\begin{aligned} \delta x_1 = x_1 - x_1' &= f(x_0) - f(x_0') \\ &= f(x_0) - [f(x_0) + (x_0' - x_0) f'(x_0) + \ldots] \\ &= \delta x_0 f'(x_0) \quad . \qquad (\Delta.44) \end{aligned}$$

με χρήση του ορισμού της παραγώγου $f(x_0)$. Μετά από N επαναλήψεις η διαφορά παίρνει την εκθετική μορφή

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

$$\delta x_N = \delta x_0 \prod_{n=0}^{N-1} |f'(x_n)|$$

$$= \delta x_0 \exp\left(\sum_{n=0}^{N-1} \ln |f'(x_n)| \right) , \qquad (\Delta.45)$$

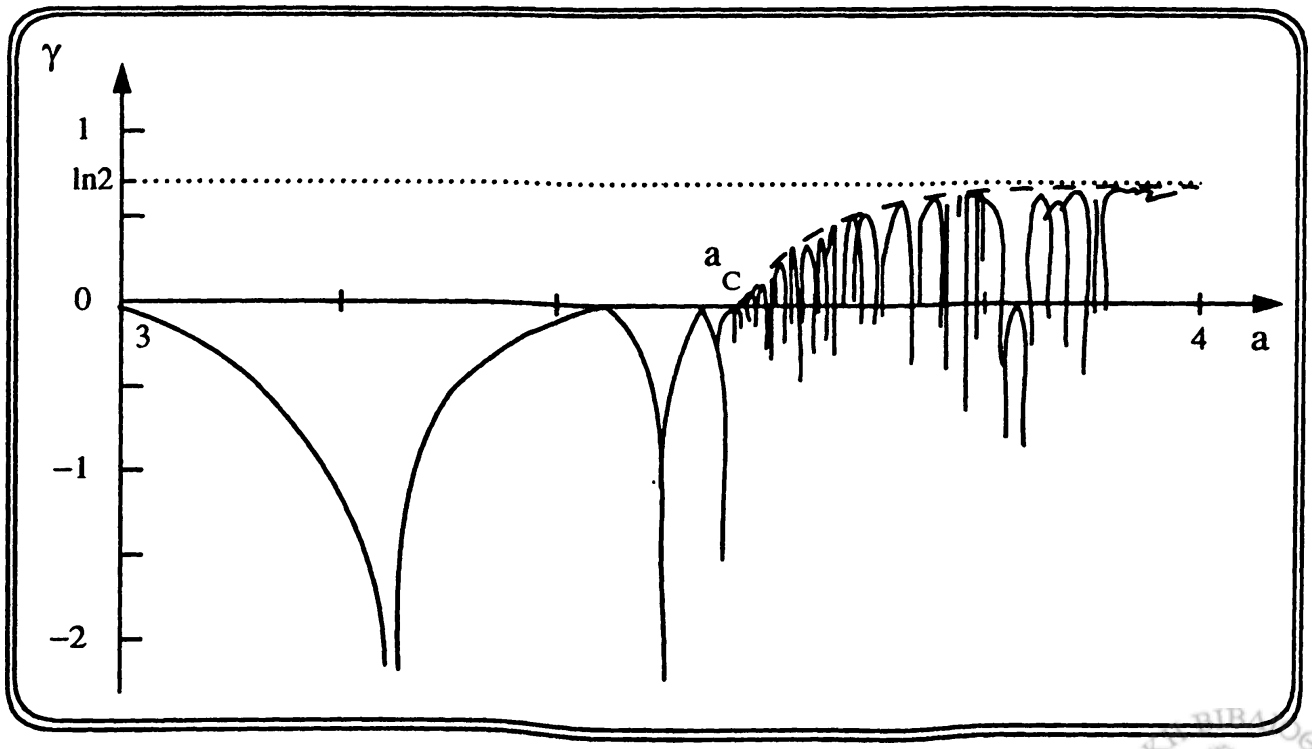
ώστε

$$\gamma = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \ln |f'(x_n)| \quad . \qquad (\Delta.46)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψιν πως $f(x_n) = x_{n+1}$ η (Δ.46) γράφεται και ως

$$\boxed{\gamma = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \ln \left| \frac{dx_{n+1}}{dx_n} \right|} \qquad (\Delta.47)$$

Εάν $\gamma<0$ η απόσταση των κοντινών σημείων με επαναλήψεις μειώνεται εκθετικά, ώστε οι κοντινές τροχιές τελικά συγκλίνουν στον ίδιο σταθερό κύκλο. Όταν $\gamma>0$ η διαφορά αυξάνει εκθετικά. Στο Σχ. Δ.11 φαίνεται η συμπεριφορά του εκθέτη γ για την λογιστική απεικόνιση της εξ. (Δ.5).



Σχ.Δ.11. Ο εκθέτης Lyapunov γ για τη λογιστική απεικόνιση της εξ. (Δ.5). Η χαοτική συμπεριφορά παρατηρείται όταν $\gamma>0$. Για $a = 4$ να δείξετε ότι $\gamma = \ln 2$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Δ.6. Επίλογος

Σε απολύτως αιτοκρατικά μη γραμμικά συστήματα που περιγράφονται από διαφορικές εξισώσεις (και στην διακριτή τους μορφή μέσω απεικονίσεων), ενώ δεν υπάρχει τίποτα το τυχαίο και όλες οι δυνάμεις είναι γνωστές, η συμπεριφορά για μεγάλους χρόνους αρνείται την πρόβλεψη και εμφανίζεται τόσο τυχαία όσο και η ρίψη ενός νομίσματος! Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται χάος και δεν ακολουθεί την κοινή "γραμμική λογική", όπου σε συστήματα που προσδιορίζονται από αιτοκρατικούς νόμους δεν έχει θέση η τυχαιότητα. Το κλασσικό χάος δεν παρατηρείται σε γραμμικά συστήματα και επειδή όλα τα πραγματικά ρεαλιστικά συστήματα είναι μη γραμμικά η εμφάνισή του είναι αναπόφευκτη. Επομένως, δικαιολογείται και η εισαγωγή στην θεωρία του χάους σε αυτό το παράρτημα.

Επειδή το χάος είναι πολυπρόσωπο και εμφανίζεται σε μια πληθώρα από περιπτώσεις που διέπουν φυσικές διαδικασίες (υδροδυναμική, χημικές αντιδράσεις επιδημιολογία, κ.λ.π.), θεωρείται από πολλούς και ως μία αναδυόμενη επιστημονική επανάσταση. Στην προσπάθεια αυτή σημαντικός είναι και ο ρόλος των ηλεκτρονικών υπολογιστών που η εξέλιξή τους συμβαδίζει με τις προόδους στη θεωρία του χάους.

Όπως τονίσθηκε και στον πρόλογο η χαοτική συμπεριφορά που προκύπτει από την επίλυση απλών μη γραμμικών εξισώσεων, οδηγεί στην αντιμετώπιση του χαοτικού συστήματος με μεθόδους της στατιστικής φυσικής ακόμη και εάν είναι λίγων βαθμών ελευθερίας. Αναμένεται, επομένως, πως η ιδιαίτερη πολυπλοκότητα των χαοτικών λύσεων μπορεί να μας οδηγήσει και στο αντίστροφο συμπέρασμα πως κάτω από την στατιστική πολυπλοκότητα, π.χ. φαινομένων όπως η τυρβώδης ροή, μπορεί να κρύβεται η απλότητα λίγων μη γραμμικών εξισώσεων. Στο συμπέρασμα αυτό μπορεί να αναχθεί και η ευρεία ισχυρότητα του δεύτερου θερμοδυναμικού νόμου στην φύση.

Είναι διαπιστωμένο πως η συντριπτική πλειοψηφία των κλασσικών συστημάτων είναι μη ολοκληρώσιμα (χαοτικά) ενώ τα ολοκληρώσιμα (μη χαοτικά) κλασσικά συστήματα αποτελούν μάλλον απίθανες περιπτώσεις! Τα χαοτικά συστήματα συνδέονται και με τη θεμελίωση της στατιστικής φυσικής (κατά Boltzmann) αφού προκύπτει το ερώτημα: είναι η μη ολοκληρωσιμότητα η

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

μόνη υπεύθυνη για την εμφάνιση της μη αντιστρεπτής συμπεριφοράς; Τέλος, είναι αναγκαία και η ποσοτική στατιστική περιγραφή της κίνησης ενός συστήματος, που στον χώρο των φάσεων δίνεται από μια "μη φυσιολογική" συνάρτηση του χρόνου. Σε αυτές τις περιπτώσεις βοηθάει η αναγωγή του συστήματος σε χάρτες δύο διαστάσεων (επιφάνειες τομής Poincaré), τα φάσματα ισχύος και ο αριθμητικός υπολογισμός των εκθετών Lyapunov.

Λίγες αναφορές:

1. **Gleick J.** "Chaos: Making a New Science", (N.York: (1987 Viking Press).
2. **Steward.** "Παίζει ο Θεός ζάρια; Η επιστήμη του χάους", (Εκδ. Κωσταράκη, 1990)

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

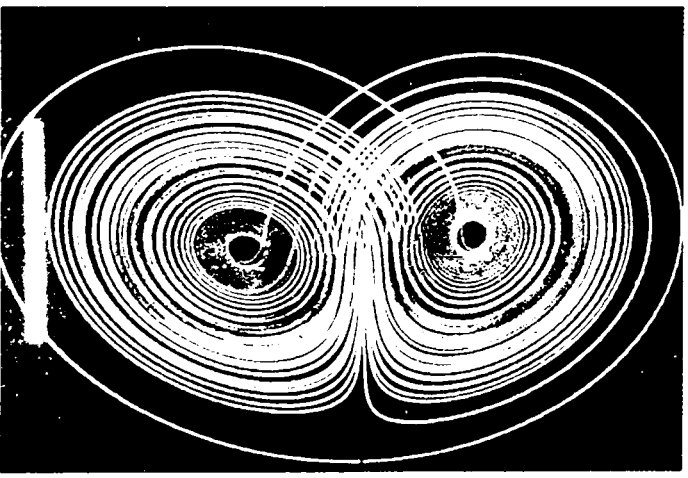
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗ

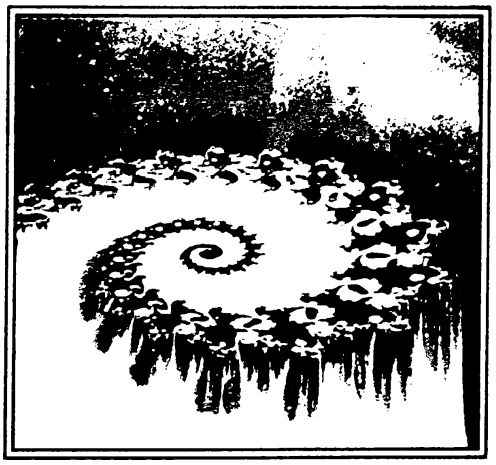
ΓΡΑΦΙΚΕΣ ΤΕΧΝΕΣ - ΕΚΔΟΣΕΙΣ

ΘΕΟΔΩΡΙΔΗ

Βαλαωρίτου 25 - Τηλ. (0651) 77358 ΙΩΑΝΝΙΝΑ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΑΘΗΝΩΝ





ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΗ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ