19. ročník, úloha II . S ... *aparát statistické fyziky* *(5 bodů; průměr 3,43; řešilo 7 studentů)*

a) Jaký je vztah mezi počtem mikrostavů $\Omega(E)$ termostatu s energií $\leq E$ a veličinou $\eta(E)$ (tj. počtem mikrostavů s energií v intervalu $E \pm \Delta$) pro malá Δ?

b) Mějme systém N nezávislých harmonických oscilátorů, přičemž energie každého oscilátoru může nabývat hodnot $n\hbar\omega$ s $n = 0, 1, \ldots$ (zanedbáváme energii nulových kmitů). Jaký bude mít tvar veličina $\eta(E)$ a $\beta(E)$ pro velká N a E?

c) Najděte stejné veličiny jako v předchozím příkladu pro systém N neinteragujících volných elektronů uvězněných na úsečce, (*) ve čtverci, (**) v krychli.
Nápověda. Použijte de Broglieho relace mezi hybností a vlnovou délkou de Broglieho vlny. Na úsečku se musí vejít celý počet půlvln. De Broglieho vlny ve čtverci si lze představit coby součin vln ve směru osy x a osy y, kvantovací podmínka je podobná jako pro úsečku.

Zadal autor seriálu Matouš Ringel.

a) Veličina $\eta(E)$ byla definována jako počet mikrostavů termostatu s energií v intervalu $E \pm \Delta$, kde Δ je malé v porovnání s energií E. Veličinu $\Omega(E)$ jsme definovali coby počet mikrostavů termostatu s energií $\leq E$. Pokud si toto uvědomíme, nepodivíme se nad rovnicí

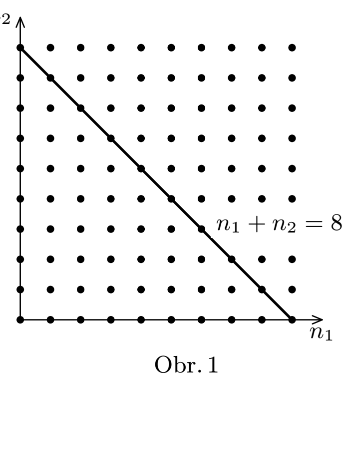
$$\eta(E) = \Omega(E + \Delta) - \Omega(E - \Delta)\,.$$

Pokud je Δ dostatečně malé, můžeme veličinu Ω přibližně vyjádřit pomocí diferenciálu, odkud získáme vztah

$$\eta(E) = \left(\Omega(E) + \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}E} \cdot \Delta\right) - \left(\Omega(E) + \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}E} \cdot (-\Delta)\right) = \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}E} \cdot 2\Delta\,.$$

b) Úlohu nejdříve vyřešíme pro $N = 2$. Nejprve vypočítáme veličinu $\Omega(E)$. Jelikož energie nabývá pouze celočíselných hodnot, $\Omega(E)$ se zřejmě změní skokem vždy, když E dosáhne celočíselné hodnoty. Energie se musí rozdělit mezi dva oscilátory s energetickými hladinami $\hbar\omega n$. Počet mikrostavů $\Omega(E)$, kde $E = \hbar\omega n$, se tedy bude rovnat počtu způsobů, kterými lze číslo n rozdělit na součet dvou celých čísel, $n = n_1 + n_2$. Do grafu si znázorníme všechny možné dvojice (n_1, n_2) a nakreslíme přímku $n = n_1 + n_2$. Snadno si rozmyslíme, že přípustné dvojice s energií $\leq E$ budou ležet v části prvního kvadrantu omezené zkonstruovanou přímkou (včetně bodů na přímce ležících). V tomto konkrétním případě je můžeme snadno vypočítat přímo.

Pro obecný případ však bude vhodnější použít malý trik. Všimneme si, že každý puntík lze ztotožnit s jedním čtverečkem vzniklé čtvercové mříže. Plocha každého čtverečku je rovna jedné. Počet puntíků je proto roven ploše všech čtverečků pod přímkou a těsně nad ní. Avšak při dostatečně velkých n neuděláme velkou chybu, pokud zanedbáme plochu čtverečků ležících v těsném okolí přímky a za celkovou plochu čtverečků prohlásíme plochu pod přímkou. To proto, že plocha pod přímkou roste jako n^2, kdežto plocha čtverečků v těsném okolí přímky roste pouze jako n a $n/n^2 \to 0$. Pro $N = 2$ tedy dostáváme výsledek



Obr. 1

$$\Omega(E) = \Omega(\hbar\omega n) \approx \frac{n^2}{2}\,.$$

V obecném případě budeme analogicky počítat N-rozměrný objem pod plochou $n_1 + n_2 + \ldots + n_N = n$. Není příliš jasné, jak jej vypočítat. Nicméně nás zajímala pouze závislost na energii (tj. na n). Snadno si uvědomíme obecnou charakteristiku objemu v k-rozměrném prostoru. Totiž že zvětšíme-li těleso λ krát, jeho objem se zvětší λ^k krát, což můžete snadno ověřit pro 1D (délku úsečky), 2D (plochu obrazce) i 3D (objem tělesa). Počet rozdělení čísla n je tedy přibližně úměrný jeho N-té mocnině. Veličina $\Omega(E)$ proto musí splňovat úměrnost

$$\Omega(E) = \Omega(\hbar\omega n) \sim n^N \sim E^N .$$

Zájemci se mohou pokusit vypočítat konstantu úměrnosti. S ní je pak výsledek roven $\Omega(\hbar\omega n) = n^N/N!$.

Z předchozího příkladu víme, že veličina $\eta(E)$ je úměrná derivaci $\Omega(E)$, čili

$$\eta(E) \sim E^{N-1} .$$

V seriálu bylo definováno $\beta(E) = \mathrm{d}\ln\eta(E)/\,\mathrm{d}E$, takže platí $\beta(E) = (N-1)/E$. Energii E celého systému napišme ve tvaru $E = \varepsilon N$, kde ε má význam jakési střední energie jednoho oscilátoru. Vztah pro β můžeme přepsat do tvaru $\beta(E) = \beta(N\varepsilon) \approx 1/\varepsilon$. V tomto tvaru je jasně vidět, že $\beta(E)$ závisí pouze na průměrné energii jednoho oscilátoru a nikoliv na jejich počtu.

Z odvozených vztahů můžeme vypozorovat jeden zajímavý jev. Zkoumejme počet mikrostavů s energií mezi E a $E - \delta$. Z výše uvedeného pro tento počet dostáváme vzorec $\Omega(E) - \Omega(E-\delta) \sim E^N - (E-\delta)^N$. Ten pro velká N upravíme užitím definice funkce e^x ($e^x = \lim_{n\to\infty}(1 + x/n)^n$)

$$\Omega(E) - \Omega(E-\delta) \sim E^N - (E-\delta)^N = E^N\left(1 - \left(1 - \frac{\delta}{N\varepsilon}\right)^N\right) \approx E^N\left(1 - e^{-\delta/\varepsilon}\right) .$$

Tento výraz je díky exponenciále podstatně odlišný od jedničky jen v oblasti s šířkou δ řádově rovnou ε. To znamená, že téměř všechny mikrostavy s energií $\leq E$ mají energii v okolí o šířce zhruba střední energie ε jednoho oscilátoru, což je poměrně překvapivý výsledek.

c) Jak je (by mělo být) známo ze školy, de Broglieho relace svazují hybnost elektronu, resp. energii elektronu s vlnovou délkou, resp. frekvencí příslušné de Broglieho vlny. Pro jednorozměrný elektron uvězněný na úsečce mají tvar

$$\frac{h}{\lambda} = \hbar k = p \quad \text{a} \quad \hbar\omega = E .$$

Bohrova kvantovací podmínka požaduje, aby na hranicích oblasti, ve které je elektron uvězněný, byl uzel de Broglieho vlny. Na úsečku se proto může umístit jen celý počet půlvln. Vlnová délka proto musí být rovna $\lambda = 2L/n$, kde $n > 0$ je počet půlvln na úsečce délky L. Pro přípustné hybnosti dostáváme $p_n = hn/2L$. Klasická energie volného elektronu je rovna kinetické energii

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2n^2}{8mL^2} .$$

Tímto jsme vypočítali energetické spektrum elektronu uvězněného na úsečce.

De Broglieho vlna elektronu na čtverci o straně L je (jak bylo napovězeno) součinem vln ve směru x a y. Kvantovací podmínka požaduje nulovou amplitudu na stranách čtverce, vlna v příslušném směru musí mít tedy na hraně uzel. Proto pro hybnosti ve směru x a y píšeme

$$p_{x,n_x} = \frac{hn_x}{2L} \quad \text{a} \quad p_{y,n_y} = \frac{hn_y}{2L}.$$

Kinetická energie elektronu je rovna $p^2/2m = (p_x^2 + p_y^2)/2m$, takže energetické spektrum bude

$$E_{n_x,n_y} = \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2)\,.$$

Kdo ví, o čem jde řeč, nebude překvapen spektrem

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

pro trojrozměrný elektron uvězněný v krychli o straně L.

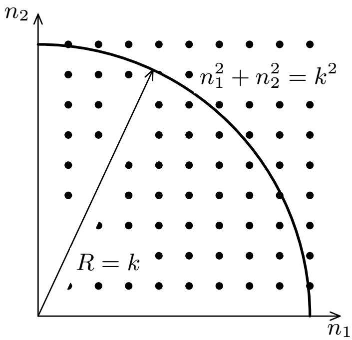
Dále budeme postupovat podobně jako v bodě b). Pro jednoduchost budeme uvažovat jednorozměrný elektron. Energie N elektronů popsaných kvantovými čísly $n_1, \ldots, n_N$ bude součtem energií jednotlivých elektronů, tj.

$$E_k = \frac{h^2}{8mL^2}(n_1^2 + n_2^2 + \cdots + n_N^2) = \frac{h^2k^2}{8mL^2}\,.$$

Počet mikrostavů $\Omega(E)$ bude roven počtu N-tic přirozených čísel, jejichž součet druhých mocnin je $\leq k^2$.

Pro $N = 2$ si nakreslíme podobný diagram jako v bodě b) (obr. 2). Do něj znázorníme čtvrtkružnici $n_1^2 + n_2^2 = k^2$. Všechny přípustné kombinace (puntíky) se nacházejí uvnitř čvtrtkruhu. Téměř každému opět koresponduje jeden čtvereček o jednotkové ploše, počet rozdělení proto bude přibližně roven ploše čtvrtkruhu, tedy $\pi k^2/4$, a příslušné

$$\Omega(E) = \pi k^2/4 = \frac{2\pi mL^2}{h^2}E\,.$$



Obr. 2

Pro obecné N bude počet mikrostavů $\Omega(E)$ roven počtu N-tic čísel $n_1, \ldots, n_N$, splňujících nerovnost $n_1^2 + \ldots + n_N^2 \leq k^2$. Tento počet je přibližně roven objemu N-rozměrné „čtvrtkoule“ o poloměru k. Již v úloze b) jsme vyjasnili, že objem libovolného N-rozměrného tělesa je úměrný jeho charakteristickému rozměru na N-tou. Proto

$$\Omega(E) \sim k^N \sim E^{N/2}\,.$$

V tomto případě již není jednoduché vypočítat konstantu úměrnosti. Vypočítáme ještě veličinu $\eta(E) \sim E^{N/2-1}$ a veličinu $\beta(E) = (N/2 - 1)/E$.

Každý teď jistě snadno odvodí závislost $\Omega(E)$ pro 2D elektron ($\Omega(E) \sim E^N$) i pro 3D elektron ($\Omega(E) \sim E^{3N/2}$).

Matouš Ringel
matous@fykos.mff.cuni.cz

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty UK MFF. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci UK MFF a podporován Ústavem teoretické fyziky UK MFF, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.