

Boltzmannfaktoren – breddeopgave 107, 108, 109 og 110 med didaktisk kommentar

Jens Højgaard Jensen, IMFUFA, INM, RUC.

Mit formål med artikelserien om breddeopgaver er – udover at gøre opmærksom på RUCs fysikuddannelse – dobbelt: Dels udvælger jeg opgaverne, så de kan have interesse som fysikproblemer i egen ret. Dels udvælger jeg dem med henblik på at kunne knytte didaktiske overvejelser til dem af interesse for fysikundervisere. I første omgang i forhold til universitetsundervisning. Men i anden omgang kunne der måske også trækkes paralleller til andre undervisningsniveauer.

Her bringes løsninger og kommentar til opgaverne fra forrige nummer samt en ny opgave. Opgaverne i sidste nummer af Kvant var disse fire breddeopgaver (nr. 107, 108, 109 og 110 her i Kvant):

Breddeopgave 107, 108, 109 og 110. Boltzmannfaktoren

Magnetiske såkaldte enkeltomænepartikler til datalagring har typisk en foretrukken akse, hvor energien er mindst ved magnetisering i de to retninger langs akse. Det kræver større energi proportionalt med partiklernes volumen at magnetisere dem på tværs af akse. Hvordan afhænger den tid, man kan regne datalagringen for uforstyrret af termiske fluktuationer, af partiklernes volumen? Begrund svaret.

Båndgabets i isolatorer er større end i halvledere. Men ikke størrelsesordenen større. Hvoraf kommer det da, at de specifikke ledningsevner for isolatorer og halvledere afviger mange størrelsesordener fra hinanden? Begrund svaret.

Mættede dampes tryk over en væske øges typisk med temperaturen proportionalt med $\exp(-T_0/T)$. Forklar dette og angiv hvad T_0 afhænger af.

Erfaringsmæssigt varierer viskositeten af væsker typisk som $\exp(+T_0/T)$ (T_0 er en konstant). Virker det rimeligt ud fra et mikroperspektiv? Begrund svaret.

Løsninger

107: Termiske molekulære påvirkninger fra omgivelserne kan få magnetiseringsretningerne af partiklerne med tilhørende forskellige energier til at fluktuere afhængigt af temperaturen af partiklerne og omgivelserne. Sandsynligheden for, at magnetiseringen af en enkeltomænepartikel flipper over energibarrieren $E_{\text{vinkelret}} - E_{\text{langs}}$, hvor $E_{\text{vinkelret}}$ og E_{langs} er energien af partiklen magnetiseret henholdsvis vinkelret på og på langs af magnetfeltet, er proportional med Boltzmannfaktoren $\exp(-(E_{\text{vinkelret}} - E_{\text{langs}})/k_B T)$. Da energibarrieren er proportional med partiklernes volumen V , er sandsynligheden for termisk forstyrrelse af datalagringen derfor givet ved faktoren $\exp(-aV/k_B T)$, hvor a er energiforskellen per volumen mellem magnetisering vinkelret på og langs med den foretrukne retning. Tiden, hvor man kan regne datalagringen for stabil, vokser derfor eksponentielt med enkeltomænepartiklernes volumen.

108: Både isolatorer og rene halvledere har et valensbånd med næsten alle enkeltelektronstilstande

besatte og få elektrontilstande besatte i ledningsbåndet. I den situation er antallet af huller i valensbåndet og elektroner i ledningsbåndet i forhold til antallet af enkeltelektronstilstande i valensbåndet $\exp(-E_g/k_B T)$, altså Boltzmannfaktoren, hvor E_g er båndgabets. Antages båndgabets for en isolator, E_{gi} , fx at være 5 gange større end båndgabets for en halvleder, $E_{gh} = 5E_{gi}$, vil forholdet mellem antallet af ledningsbærere og dermed ledningsevner for henholdsvis isolatoren og halvlederen derfor være givet ved

$$\begin{aligned}\sigma_i/\sigma_h &= \exp(-5E_{gh}/k_B T) / \exp(-E_{gh}/k_B T) \\ &= [\exp(-E_{gh}/k_B T)]^4.\end{aligned}$$

Da $\exp(-E_{gh}/k_B T)$ ved stuetemperatur er mange størrelsesordener mindre end 1, ses det i endnu højere grad at være tilfældet for σ_i/σ_h . Ledningsevnernes eksponentielle afhængighed af båndgabenes størrelser gør, at små ændringer af størrelsen af et båndgab medfører store ændringer af den tilhørende ledningsevne.

109: Dampen over en væske er mættet, når damp og væske som samlet system er i termisk ligevægt. Vi simplificerer systemet til at bestå af to energiniveauer for dets molekyler. Et molekyle i dampfasen har energien E_D , medens et molekyle i væskefasen har energien E_V . Tætheden af molekyler i dampfasen, n_D , i forhold til tætheden af molekyler i væskefasen, n_V , vil da være givet ved Boltzmannfaktoren: $n_D/n_V = \exp(-(E_D - E_V)/k_B T)$. Ifølge idealgasloven er trykket i den mættede damp derfor: $P = n_D k_B T = n_V k_B T \exp(-(E_D - E_V)/k_B T)$. Her er n_V kun svagt afhængig af temperaturen medens faktoren $k_B T$ sammenlignet med Boltzmannfaktoren kun varierer langsomt med temperaturen. P øges derfor typisk med temperaturen proportionalt med $\exp(-T_0/T)$, hvor $T_0 = (E_D - E_V)/k_B$. $k_B T_0$ er den latente varme per molekyle ved faseovergangen fra væske til damp.

110: Væsker består af molekyler (eller atomer), der som i faste stoffer svinger om nogle ligevægtpunkter mellem nabomolekylerne. Når væsker i modsætning til faste stoffer kan flyde, skyldes det, at der i det molekulære arrangement er plads nok til, at rearrangering af molekylerne ind imellem kan finde sted ved tilstrækkeligt store energifluktuationer. Den simpleste antagelse om hyppigheden af disse fluktuationer er, at den på en eller anden måde er fastlagt ved en karakteristisk aktiveringsenergi A og en dertil-hørende

Boltzmannfaktor $\exp(-A/k_B T)$. Derfor virker temperaturafhængigheden $\exp(-T_0/T)$ for letflydigheden og omvendt $\exp(+T_0/T)$ for viskositeten rimelig.

Kommentar

I et afgrænset system med konstant volumen og partikelantal i termisk ligevægt med et stort varmereservoir med den absolutte temperatur T er sandsynligheden P_i for at finde systemet i den i 'te elementartilstand proportional med Boltzmannfaktoren $\exp(-E_i/k_B T)$, hvor E_i er systemets energi i elementartilstanden. Derfor er

$$P_i = \exp(-E_i/k_B T) / \sum_j \exp(-E_j/k_B T), \quad (1)$$

da $\sum_i P_i = 1$. Summationen i ligning (1) gælder, når der er tale om statistisk kvantemekanik. Er der tale om statistisk klassisk mekanik skal summationen erstattes af en integration. Bortset herfra er ligning (1) det fælles udgangspunkt for både statistisk klassisk mekanik og statistisk kvantemekanik for afgrænsede systemer med konstant volumen og partikelantal i termisk ligevægt med et stort varmereservoir.

I opgave 107 er systemet en enkeltdomænepartikel i et magnetfelt, hvis mulige elementartilstande der skal tages stilling til. Udgangspunktet er, at partiklen er præpareret til at være i en elementartilstand med energien E_{langs} i magnetfeltet. Men da partiklen er påvirket af omgivelser med temperaturen T , vil den, som tiden går, blive bragt i andre elementartilstande. Hvis en af disse har energi $E_{\text{vinkelret}}$ eller større, er der risiko for, at partiklen flipper 180° hen over energibarrieren $E_{\text{vinkelret}} - E_{\text{langs}}$. Forholdet mellem sandsynligheden $P_{\text{vinkelret}}$ for at finde systemet i en elementartilstand med energien $E_{\text{vinkelret}}$ og sandsynligheden P_{langs} for at finde systemet i en elementartilstand med energien E_{langs} er ifølge ligning (1):

$$\frac{P_{\text{vinkelret}}}{P_{\text{langs}}} = \exp\left(-\frac{E_{\text{vinkelret}} - E_{\text{langs}}}{k_B T}\right) \quad (2)$$

For at finde risikoen P_{flip} for, at partiklen flipper, har vi brug for at finde summen af alle P_i for elementartilstande med E_i større end $E_{\text{vinkelret}}$. Det indebærer en integration fra $E_{\text{vinkelret}}$ til ∞ , og at vi tager højde for, at der kan være forskellige elementartilstande med samme energi. Det sidste kan vi, når $k_B T \ll E_{\text{vinkelret}} - E_{\text{langs}}$, overslagsmæssigt se bort fra, fordi det da som faktor kun bidrager med en langsomt varierende funktion af energien sammenlignet med eksponentialfunktionen. Vi har så, med $z = \frac{E_i}{k_B T}$:

$$\begin{aligned} P_{\text{flip}} &= \int_{\frac{E_{\text{vinkelret}}}{k_B T}}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_i - E_{\text{langs}}}{k_B T}\right) dz \\ &= \exp\left(-\frac{E_{\text{vinkelret}} - E_{\text{langs}}}{k_B T}\right). \end{aligned}$$

Derfor er det med god tilnærmelse rimeligt at regne med, at risikoen, for at partiklen flipper efter en termisk fluktuation, er proportional med Boltzmannfaktoren på højre side af ligning (2). Og at der med faldende sandsynlighed skal gå tilsvarende lang tid, før det sker.



Figur 1. Ludwig Eduard Boltzmann (1844–1906).

I opgave 108 er Boltzmannfaktoren $\exp(-E_g/k_B T)$ strengt taget en tilnærmelse til en Fermi-Dirac-fordeling i grænsen $E_g \gg k_B T$. Fordelingen angiver antallet af elektroner i forskellige enkeltelektron-tilstande. Ved udledningen af Fermi-Dirac-fordelingen ud fra ligning (1) er elektronerne antaget at kunne fordeles som ikke-vekselvirkende på enkeltelektron-tilstandene, således at de forskellige elementartilstande af det samlede system udgøres af de forskellige elektronfordelinger. Men man kan også tænke på Boltzmannfaktoren som udtryk for den relative sandsynlighed for, at en elektron har henholdsvis den ene eller den anden energi i et system, som blot består af to energiniveauer med afstanden E_g .

I løsningen af opgave 109 er systemet på tilsvarende måde simplificeret til blot at have to energiniveauer, hvor der er set bort fra molekylernes indbyrdes vekselvirkning på hvert niveau.

I løsningen af opgave 110 er der analogiseret til behandlingen af fx opgave 107's lidt mere håndterbare problem.

Ingen af løsningerne på de fire opgaver er eksakte. De fysikstuderende på RUC gennemfører ved siden af breddekurset et mere matematisk formelt kursus i statistisk mekanik. Arbejdet på breddekurset med opgaver, som de fire i artiklen her, er ment komplementerende i forhold hertil.

Uden sådanne opgaver kan der være en risiko for, at skoven ikke ses for bare træer, når fx de grundlæggende begreber risikerer at drukne i matematik ved eksakte udledninger af Fermi-Dirac-fordelingen og Bose-Einstein-fordelingen, med Boltzmannfordelingen som approksimativt grænsetilfælde ved høje temperaturer. Det kan give det generelt forkerte indtryk af Boltzmannfordelingen som approksimativ og Fermi-Dirac- og Bose-Einstein-partikelfordelingslovene som basale. Hvor sandheden jo er, at det er disse to fordelinger, der er approksimative, idet de går ud fra ikke-vekselvirkende enkeltpartikler, hvorimod Boltzmann-

fordelingen i form af ligning (1) er fundamental. Den grundlæggende antagelse bag den er, at sandsynligheden af en elementartilstand for et system er bestemt af dets energi i elementartilstanden. Elementartilstande med samme energi har samme sandsynlighed. Herefter kan vi tænke på et system bestående af to delsystemer i termisk ligevægt. Kalder vi sandsynligheden for at finde system 1 i elementartilstanden i med energien E_i for $P_i^1(E_i)$, sandsynligheden for at finde system 2 i elementartilstanden j med energien E_j for $P_j^2(E_j)$, og sandsynligheden for at finde det samlede system 1+2 i elementartilstanden i, j med energien $E_i + E_j$ for $P_{i,j}^{1+2}(E_i + E_j)$, gælder:

$$P_{i,j}^{1+2}(E_i + E_j) = P_i^1(E_i) \cdot P_j^2(E_j), \quad (3)$$

altså at sandsynligheden for samtidigt at finde delsystem 1 i tilstanden i og delsystem 2 i tilstanden j er lig med sandsynligheden for at finde delsystem 1 i tilstanden i gange sandsynligheden for at finde delsystem 2 i tilstanden j . Boltzmanns ligning (1) følger så matematisk af ligning (3). Eller sagt tilspidset: Boltzmannfaktoren skyldes, at energier adderes, medens sandsynligheder multipliceres. Fundamentalt!

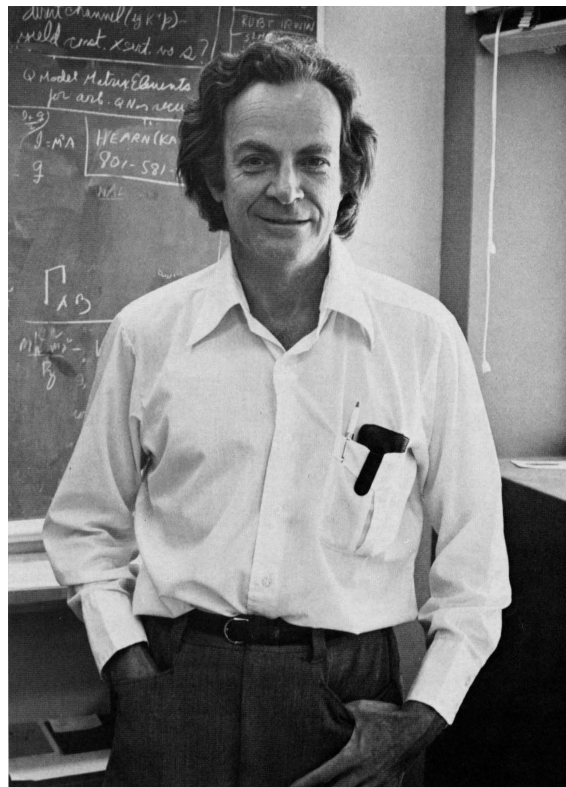
R.P. Feynman sammenfatter i indledningen til sine forelæsningsnoter i statistisk mekanik [1] den fundamentale betydning af ovenstående ligning (1) således:

“This fundamental law is the summit of statistical mechanics, and the entire subject is either the slide-down from this summit, as the principle is applied to various cases, or the climb-up to where the fundamental law is derived and the concepts of thermal equilibrium and temperature T clarified.”

Jeg synes, at det er vigtigt, ved hjælp af opgaverne, at gøre de studerende opmærksom på, at Boltzmannfaktoren er styrende for mange fysiske fænomener. Og at styringen rækker ud over de fænomener, der lader sig modellere med rimelig matematisk eksakthed. I mange tilfælde kan alene selve faktoren være en virksom heuristisk model, fordi eksponentialfunktioner dominerer over andre funktionelle faktorer. Jeg har ønsket at træne de studerende i kvalitativt at kunne få øje på, hvornår essensen i et fysisk fænomen er Boltzmannfaktoren i sammenhæng med en energibarriere. På samme måde som jeg komplementerer til den mere formelle undervisning i kvantemekanik har ønsket at træne de studerende i kvalitativt at kunne få øje på, hvornår essensen i andre fysiske fænomener er usikkerhedsrelationen. Jf fx [2].

Den opmærksomme læser vil måske have lagt mærke til, at opgave nr. 109, i modsætning til de øvrige tre i artiklen her, ikke har “Begrund svaret” i opgaveformuleringen. Opgaven er stillet af Tage Emil Christensen, da han var læreren på Breddekurset. Han synes, at det er en selvfølgelighed, at svaret skal begrundes. I modsætning hertil er jeg af den opfattelse, at mange studerende ikke nødvendigvis opfatter det sådan. Fra anden side

er de til en vis grad vænnet til opgaveudfordringer, hvor det afgørende er det rigtige svar, og ikke begrundelsen for svaret. Jeg er godt tilfreds med, at besværgelsen “Begrund svaret” blandt de fysikstuderende på RUC er så indarbejdet, at jeg hører den brugt jokende i andre sammenhænge end fysik.

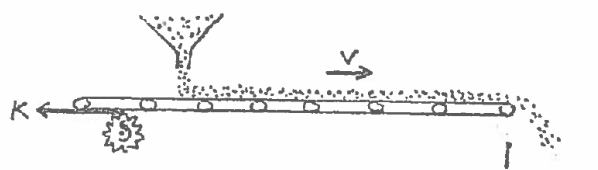


Figur 2. Richard Feynman (1918–1988).

Breddeopgave 111. Transportbånd

Inden næste nummer af Kvant udkommer, kan læserne eventuelt overveje løsningen til denne opgave fra breddekurset på RUC (fra eksamen januar 1977, nr. 111 i rækken her i Kvant):

Et transportbånd fungerer som vist på figuren.



Hvor stor en kraft skal båndet påvirkes med af motoren? Begrund svaret.

Løsning og kommentar bringes i næste nummer af Kvant.

Litteratur

- [1] R.P. Feynman (1972) “Statistical Mechanics: A Set of Lectures”, W.A. Benjamin, Reading, Mass.
- [2] J.H. Jensen (2018) “Usikkerhedsrelationen og Bohrradius – breddeopgave 74 og 75 med didaktisk kommentar”, *Kvant*, bind 28, nr. 1, side 25–26.