

Problem podziału liczby naturalnej a własności statystyczne chłodnego gazu

Krzysztof PAWŁOWSKI*

* Centrum Fizyki Teoretycznej PAN

Multizbiór to uogólnienie pojęcia zbioru. W odróżnieniu od klasycznych zbiorów w multizbiorze jeden element może występować wiele razy. Kolejność elementów nie ma znaczenia.

A właściwie czemu Bernoulliego, a nie Bernoullego? Okazuje się, że zadziałała tu „punkty za pochodzenie”. Otóż nazwiska niemieckiego pochodzenia zakończone na „i”, w odróżnieniu od nazwisk pochodzenia włoskiego, to „i” w odmianie zachowują.

Na ile sposobów liczbę naturalną E można zapisać jako sumę n liczb naturalnych? Jaki jest związek tego klasycznego problemu matematyki z fazą kwantową gazu przewidzianą przez Alberta Einsteina? Podziałem liczby naturalnej E będziemy tutaj nazywali taki multizbiór liczb naturalnych, którego elementy sumują się do E . Liczba $E = 4$ ma cztery podziały – są nimi $\{1, 1, 1, 1\}$, $\{2, 1, 1\}$, $\{2, 2\}$, $\{3, 1\}$. A ile podziałów ma dowolna liczba E ?

Pytanie pojawia się w wielu okolicznościach i trudno wskazać autora tego problemu. Bez wątpienia takie pytanie zadał w roku 1674 Gottfried Leibniz w liście do Johanna Bernoulliego. Problem badał intensywnie Leonhard Euler. Dobre przybliżenia formuły na liczbę podziałów wyprowadzili niemal jednocześnie Srinivasa Ramanujan i Godfrey Hardy.

Problem liczby podziałów jest ciągle badany – tak samo jak interesujący nas problem stowarzyszony: Na ile sposobów można zapisać liczbę E w postaci sumy dokładnie n liczb naturalnych?

Oznaczmy tę liczbę przez $p_n(E)$. Dla przykładu $p_2(4) = 2$, $p_3(6) = 3$.

Problem, podobnie jak i ten wyjściowy, doczekał się rozwiązań asymptotycznych – zgrabnych przybliżeń skutecznych dla dużych E . Kolejne wartości $p_n(E)$ można też obliczyć, używając rekurencji:

$$p_n(E) = p_n(E - n) + p_{n-1}(E - 1).$$

Pierwszy składnik z tej rekurencji, $p_n(E - n)$, to liczba tych podziałów, w których nie występuje 1. W istocie, jeśli od każdego składnika takiego podziału odejmiemy 1, to ciągle niezerowych liczb naturalnych pozostanie n , tyle tylko, że ich suma wyniesie $E - n$. Mamy bijekcję ze wszystkimi podziałami liczby $E - n$ na n składników, których jest właśnie $p_n(E - n)$. Z kolei dla każdego podziału liczby E , w którym występuje liczba 1, można jedno 1 zabrać. Taki nowy zbiór będzie zawierał $n - 1$ niezerowych elementów, sumujących się do $E - 1$. Tego typu podziałów jest $p_{n-1}(E - 1)$.

Świetnie – problem stary jak świat, a jaki ma związek z fizyką? Na powyższe przykłady można spojrzeć jak na rozważania dotyczące... statystycznych właściwości cząstek w pułapce opisanej jednowymiarowym potencjałem harmonicznym. Poniżej wyjaśnimy te pojęcia w ekspresowym kursie kwantowej fizyki statystycznej.

Zacznijmy od „potencjału harmonicznego”. Mówimy, że cząstka jest w potencjale harmonicznym, gdy działa na nią siła F , która jest proporcjonalna do wychylenia Δx z położenia równowagi, czyli $F = -\alpha \Delta x$. W tym wzorze α to współczynnik proporcjonalności, a znak minus gwarantuje, że siła ściąga cząstki do położenia równowagi. Potencjał harmoniczny występuje powszechnie. Taka siła działa na ciężarek na sprężynie, w przybliżeniu na wahadło zegara, na cząstkę uwięzioną w wiązce laserowej, właściwie jako pierwsze przybliżenie dla dowolnego typowego układu sił, w którym występuje położenie równowagi.

Kolejny istotny punkt dotyczy fizyki statystycznej. To dział fizyki, w którym szuka się związków między właściwościami termodynamicznymi, takimi jak ciśnienie, temperatura, entropia, ilość wykonanej pracy przez silnik etc., a wielkościami mikroskopowymi – położeniami cząstek, z których materia się składa, ich prędkościami, oddziaływaniami pomiędzy cząstkami i ich zderzeniami ze ściankami naczynia. Każda z mikroskopowych konfiguracji cząstek, np. określenie ich położenia i prędkości, nazywana jest *mikrostanem*. Każdy mikrostan ma swoją energię. Z mechaniki kwantowej wynika, że te energie muszą być *skwantowane*, tzn. mogą przybierać tylko pewne, dyskretne wartości, określane mianem *spektrum*. W szczególności spektrum cząstki o masie m więzionej



Rozwiązanie zadania F 1021. Obrótowi walca towarzyszy obrót nawiniętej nań części linki o długości $l - x$. Moment bezwładności I takiego układu wynosi:

$$I = \frac{MR^2}{2} + m \frac{l-x}{l} R^2.$$

Niech F oznacza działającą „w dół” siłę, z jaką zwisający koniec linki „ciągnie” walec, powodując jego obrót, a ε oznacza przyspieszenie kątowe tego obrotu. Wówczas:

$$(1) \quad I\varepsilon = RF.$$

Na zwisający odcinek linki o masie $m \frac{x}{l}$ walec działa siłą $-F$ (tj. w kierunku przeciwnym do siły ciężkości – III zasada dynamiki):

$$(2) \quad m \frac{x}{l} a = m \frac{x}{l} g - F,$$

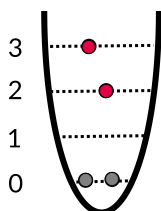
gdzie a oznacza przyspieszenie, z jakim opada koniec linki. Oczywiście mamy: $a = \varepsilon \cdot R$. Rozwiązaniem układu równań (1)–(2) jest:

$$a = \frac{2mgx}{(M + 2m)l}.$$

w potencjale harmonicznym jest wyjątkowo proste. Dozwolone w tym przypadku energie wyrażone są wzorem:

$$\epsilon_k = k \left(\hbar \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \right),$$

gdzie k to dowolna liczba naturalna lub 0, a \hbar to stała Plancka. Innymi słowy – cząstka w potencjale harmonicznym może mieć wyłącznie energię będącą całkowitą liczbą nieujemną, licząc w pewnych jednostkach fizycznych. Jeśli cząstek w potencjale harmonicznym jest N i jeśli pominiemy zderzenia pomiędzy nimi, to dozwolone wartości energii całkowitej mikrostanu wynoszą: $E = \sum_{i=1}^N \epsilon_{k_i}$, gdzie ϵ_{k_i} oznacza energię i -tej cząstki. Konfiguracje cząstek można przedstawiać graficznie jak na rysunku obok, na którym zaznaczono, że cząstki są uwięzione w potencjale będącym parabolą (wtedy siła jest proporcjonalna do wychylenia), a poziome kreski określają kolejne poziomy energii. Przedstawiona konfiguracja dotyczy $N = 4$ cząstek, o energiach $\{3, 2, 0, 0\}$. Energia całkowita tego układu wynosi 5.



Od 20 maja 2019 roku stała Plancka wynosi dokładnie $\hbar = 6,62607015 \cdot 10^{-34}$ J/s. Na taką wartość świat się umówił i odtąd stała Plancka służy do definiowania kilograma. (Patrz: *Aktualności* w Δ_{19}^1)

Schematyczne przedstawienie mikrostanu 4 cząstek w potencjale harmonicznym, o energiach 0, 0, 2 oraz 3

W typowej sytuacji parametr α potencjału harmonicznego jest znany. Można też szacować liczbę cząstek, mierzyć temperaturę gazu, a stąd szacować jego energię. Natomiast praktycznie nigdy nie ma możliwości zmierzenia położenia i prędkości każdej z cząstek gazu osobno. Znamy wielkości makroskopowe, ale nie mamy dostępu do mikrostanów. W poszukiwaniu relacji między statystyką mikrostanów a wielkościami makroskopowymi przydatne jest założenie poczynione przez Boltzmanna. Zakłada się, co wydaje się trochę szalone, że wszystkie mikrostanu są tak samo prawdopodobne. Układ, w którym $N - 1$ cząstek jest nieruchomych, a jedna cząstka niesie całą energię, jest tak samo prawdopodobny, jak to, że każda cząstka ma dokładnie taką samą energię. Gdy już znamy makroskopowe wielkości, to zakładamy, że mikrostan jest losowy. Na przykład układ czterech cząstek o energii całkowitej $E = 5$ to, w duchu fizyki statystycznej, zespół 6 mikrostanów. Są to konfiguracje $\{5, 0, 0, 0\}$, $\{4, 1, 0, 0\}$, $\{3, 2, 0, 0\}$, $\{3, 1, 1, 0\}$, $\{2, 2, 1, 0\}$ oraz $\{2, 1, 1, 1\}$, każdy wchodzący z tym samym prawdopodobieństwem (tą samą wagą) $1/6$. W typowych sytuacjach liczba cząstek jest gigantyczna (w „pustej” szklance „fruwa” ok. 10^{22} atomów) i nie sposób wypisać wszystkich mikrostanów.

W fizyce statystycznej wyróżnia się trzy typy zespołów. Przedstawiony w artykule opis odnosi się do zespołu *mikrokanonicznego*, stosowanego do układów izolowanych. Do układu wymieniającego energię z termostatem użylibyśmy zespołu *kanonicznego*, w którym mikrostanu wchodzi z różnymi wagami (prawdopodobieństwami), zależnymi od ich energii i temperatury termostatu. Trzeci zespół, *wielki kanoniczny*, pojawia się, gdy liczba cząstek układu nie jest ustalona.

Dla dowolnego potencjału wiążącego atomy liczba wszystkich mikrostanów o tych samych właściwościach makroskopowych (ustalone N i E) to bardzo ważna wielkość fizyczna, której logarytm (z dokładnością do jednostek) to entropia, oznaczona jako S . W rozważanym tutaj przypadku, cząstek w jednowymiarowym potencjale, entropia jest więc związana z liczbą podziałów szacowaną przez Hardy’ego i Ramanujana! Ściśle rzecz ujmując, gdy $N \geq E$, entropia dana jest wzorem

$$S(N, E) = k_B \log p(E),$$

Stała Boltzmanna też ma teraz ustaloną wartość $k_B = 1,380\,649 \cdot 10^{-23}$ J/K.

gdzie k_B to stała Boltzmanna, a $p(E)$ to liczba podziałów liczby E . (Przypadek $N < E$ wymaga pewnej modyfikacji i nie wyraża się aż tak prostym wzorem, ponieważ nie zlicza się wtedy wszystkich podziałów liczby E , a jedynie te, w których jest nie więcej niż N składników.)

Zakładając, że w przyrodzie układ ma takie właściwości, jakie dominują wśród mikrostanów, można wyprowadzać wzory na ciśnienie, temperaturę etc. Na przykład rozważania fizyczne prowadzą do oszacowania temperatury T wzorem:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S(N, E)}{\partial E}.$$

Pytanie „Czym jest temperatura?” przez lata było zmartwieniem studentów fizyki teoretycznej Uniwersytetu Warszawskiego. Przytoczony wzór bez stosownych komentarzy spowodowałby oblanie egzaminu.

Powyższe rozważania to nie jest problem czysto akademicki. Atomy można ścisnąć do jednego wymiaru, ograniczając ich ruch w pozostałych dwóch, a następnie umieścić w pułapce opisywanej potencjałem harmonicznym i badać termodynamikę. Nietrywialnym pytaniem jest liczba i fluktuacja liczby atomów na najniższym poziomie energetycznym. Jeśli ta liczba jest duża nawet dla stosunkowo wysokich temperatur, to mówimy o zajściu zjawiska kondensacji Bosego–Einsteina.

Jak oszacować średnią liczbę „skondensowanych” atomów \bar{N}_0 , tzn. tych (prawie) nieporuszających się, o energii równej 0? Odwołując się do założenia Boltzmanna, otrzymujemy wzór

$$(*) \quad N_0(\bar{N}, E) = \frac{1}{\Gamma(N, E)} \sum_{n=1}^N (N - n) p_n(E),$$

gdzie z kolei pojawia się symbol $p_n(E)$, czyli wspomniana na początku liczba podziałów E na sumę dokładnie n liczb! Indeks n w powyższym wzorze ma interpretację liczby cząstek niebędących na poziomie $E = 0$, natomiast $\Gamma(N, E) = \sum_{n=1}^N p_n(E)$ to liczba wszystkich mikrostanów N cząstek o energii całkowitej E . Zatem ułamek $p_n(E)/\Gamma(N, E)$ to liczba tych mikrostanów, dla których na poziomie 0 jest $N - n$ atomów. Dla przykładu powyżej z $N = 4$ i $E = 5$ mamy $\bar{N}_0 = \frac{3}{2}$.

Posługując się wzorem (*), można numerycznie zbadać przypadek jednowymiarowy i stwierdzić, że w jednym wymiarze nie ma przejścia fazowego, od fazy „prawie wszystkie cząstki są ruchome” do tzw. kondensatu Bosego–Einsteina, kiedy „prawie wszystkie cząstki są nieruchome”.

A jak jest w trzech wymiarach, gdy atomy są utrzymywane w pułapce opisywanej potencjałem

o kształcie paraboloidy będącej wykresem funkcji $\frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2)$? To bardziej typowy przypadek w doświadczeniach nad statystyką gazów niż przypadek jednowymiarowy. Okazuje się, że spektrum nie zmienia się w tym przypadku, ale pojawiają się *degeneracje*, tzn. cząstka może mieć energię ϵ_n na więcej niż jeden sposób. Dla przykładu pojedyncza cząstka energię n może osiągnąć, będąc w stanie n w kierunku X i 0 w pozostałych lub np. będąc na poziomach 1, 1 w kierunkach X i Y i na poziomie $n - 2$ w kierunku Z .

W przypadku układu $N = 2$ cząstek o energii całkowitej $E = 2$ mamy 15 mikrostanów.

W przypadku potencjału harmonicznego stopień degeneracji n -tej energii wynosi $\frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$. Pozostałe wzory, na entropię, temperaturę i średnie obsadzenie poziomu $E = 0$, pozostają bez zmian.

Obliczenie statystyki liczby nieruchomych cząstek w trzech wymiarach okazuje się trudne. Najlepsze algorytmy radzą sobie do maksymalnie $N = 100\,000$ cząstek (na klastrach obliczeniowych, po wielomiesięcznych obliczeniach), ale jest to zbyt mało, aby porównać się z doświadczeniami poświęconymi tej tematyce, a analitycznych szacowań brak. Ten otwarty problem fizyczno-matematyczny pozostawiamy więc Czytelnikom.

Przygotował Jarosław GÓRNICKI



$$e \approx \sqrt{\sqrt{\left(\frac{(4!)!+4}{(4!)!}\right)^{(4!)!}}},$$

$$\pi \approx \sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{4!}} - [-\sqrt{4!}]}}}}}}}} \cdot \frac{4!}{4!},$$

$$\gamma \approx \sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{\sqrt{-[-\sqrt{4!}]}}}}}}}} \cdot \frac{\sqrt{4}}{4}.$$

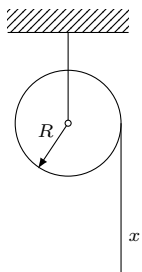
Problemi czterech czwórek pojawił się 30 grudnia 1881 roku w londyńskim tygodniku *Knowledge* (zadanie 1669). Cztery czwórki są dobre na wszystko (margines). Liczba π też chce zablysnąć (zadanie 1670). Oczywiście im mniej symboli π , tym lepiej, np. zapis $2 = -[-\sqrt{\pi}]$ jest lepszy niż $2 = [\sqrt{\pi}] + [\sqrt{\pi}]$. Mniej czwórek też daje radę (zadanie 1671). Rywalizacja trwa.

M 1669. Każdą liczbę naturalną od 1 do 20 zapisać za pomocą czterech czwórek, korzystając z operacji $+$, $-$, \cdot , $/$, $\sqrt{\cdot}$.
Rozwiązanie na str. 11

M 1670. Każdą liczbę naturalną od 1 do 20 zapisać jedynie za pomocą nie więcej niż trzech liczb π , korzystając z operacji $+$, $-$, \cdot , $/$, $\sqrt{\cdot}$, $[\cdot]$, $!$, $!!$.
Rozwiązanie na str. 13

M 1671. Każdą liczbę naturalną od 1 do 20 zapisać jedynie za pomocą nie więcej niż dwóch czwórek, korzystając z operacji $+$, $-$, \cdot , $/$, $\sqrt{\cdot}$, $[\cdot]$, $!$, $!!$.
Rozwiązanie na str. 18

Przygotował Andrzej MAJHOFER



F 1021. Na jednorodny, poziomy walec o promieniu R i masie M nawinięto pojedynczą warstwę jednorodnej, cienkiej linki o całkowitej długości l i masie m . Walec może obracać się bez tarcia wokół swojej osi symetrii. Odcinek linki o długości x zwisa (rysunek) w polu grawitacyjnym, powodując obrót walca. Ile wynosi przyspieszenie, z jakim opada koniec linki, w zależności od długości odcinka x ? Moment bezwładności jednorodnego walca o masie M i promieniu R dla obrotu wokół jego osi symetrii wynosi $MR^2/2$. Przyspieszenie ziemskie wynosi g . Linka nie ślizga się po powierzchni walca.
Rozwiązanie na str. 1

F 1022. W warunkach normalnych ($p = 101325$ Pa, $T = 273,15$ K) gęstość mieszaniny azotu i helu wynosi $\rho = 0,6$ g/l. Ile moli helu zawarte jest w 1 litrze tej mieszaniny? Masa atomowa azotu $\mu_N \approx 14$ g/mol, a helu $\mu_{He} \approx 4$ g/mol. Stała gazowa $R \approx 8,314$ J/(mol·K).
Rozwiązanie na str. 9