תרגיל נומרי 5 – התעבות בוזה-איינשטיין

1. רקע

אחת התחזיות המרתקות של פיסיקה סטאטיסטית קוואנטית היא ההתכנות של התעבות בוזה איינשטיין – Bose-Einstein Condensation. ה״התעבות״ מתבטאת בהופעה של איכלוס מאקרוסקופי במצב הקוואנטי באנרגיה הנמוכה ביותר, כלומר, שמספר החלקיקים במצב זה, N_0, הופך להיות לא זניח לעומת מספר החלקיקים הכללי, N. יש מערכות פיסיקליות שבהן האיכלוס של המצב הנמוך ביותר איננו זניח בשום טמפרטורה, אך כאשר הניוון של המצבים באנרגיות גבוהות יותר גדול מאוד, מסתבר שישנה טמפרטורה קריטית T_C: מעליה האיכלוס של המצב הנמוך מקיים $N_0/N=0$, ומתחתיה N_0/N מטפס באופן מובהק.

האפשרות להתעבות זוהתה באופן מפורש על-ידי איינשטיין בשנת 1925, שהסתמך על ניתוח ראשוני של סטינדרה בוזה שנה קודם לכן. בשנת 1995 הושגה לראשונה יצירה של מצב מעובה כזה בניסוי על-ידי קורנל ו-ויימן, וגם בניסוי מובהק יותר על-ידי קטרלי. גילויים אלה זיכו את השלושה בפרס נובל לפיסיקה בשנת 2001.

2. התעבות בוזה-איינשטיין באוסילטור הרמוני תלת-מימדי

נבחן מערכת קוואנטית פשוטה יחסית: N חלקיקים בלתי-ניתנים לאבחנה, שכל אחד מהם יכול להיות בכל אחד מהמצבים של אוסילטור הרמוני תלת-מימדי. רמות האנרגיה האפשריות באוסילטור הן בהפרשים שווים זו מזו, ε ($\varepsilon=\hbar\omega$), כך שהאנרגיות האפשריות הן $E_n=n\varepsilon,\ n=0,1,2\ldots$ התלת-מימדיות של המערכת באה לידי ביטוי בניוון בכל אחת מרמות האנרגיה: לרמה האנרגתית E_n יש ניוון קוואנטי של

$$g(n)=\frac{1}{2}n(n+3)+1 \quad (1)$$

צורה זו מייצג את העובדה כי כל ערך של n הוא למעשה צירוף $n=n_x+n_y+n_z$, כאשר $n_x,n_y,n_z\geq 0$.

את מערכת החלקיקים הזו נצמד לאמבט חום וחלקיקים (כך שיש לנו צבר גראנדקאנוני), ונחקור כפונקציה של הטמפרטורה כיצד מתפלגים החלקיקים בין מצבי האנרגיה השונים, כלומר – מה הם ערכי N_n (מספר החלקיקים ברמת האנרגיה ה-n). בפרט, נתעניין בחישוב של

- האיכלוס של רמת היסוד עם האנרגיה $E_0=0$, כלומר מה הוא היחס N_0/N.
- האנרגיה הכוללת של המערכת, כלומר

$$U_{tot}=\sum_n N_n E_n \quad (2)$$

(כאשר הסכימה היא על מצבי האנרגיה האפשריים)

- קיבול החום של המערכת.

3. מציאת הפוטנציאל הכימי

חישוב ספציפי של המערכת מתאפיין בשני פרמטרים: הפוטנציאל הכימי של המערכת, μ, והטמפרטורה, T. למעשה, לגבי הטמפרטורה חשוב הגודל חסר היחידות k_BT/ε, שהוא פרמטר שיש לקבוע לחישוב נתון.

בהנתן μ ו-T, תוכלו למצוא את מספר החלקיקים במערכת.

$$\sum_{n=0}^{n_{\max}} g(n)\frac{1}{e^{\beta\varepsilon(n-\mu/\varepsilon)}-1}=N \quad (3)$$

שימו לב שכדי שהסכום יהיה מוגדר, צריך להתקיים $\mu<0$! וככל ש-μ קרוב יותר לאפס, כך נקבל N גדול יותר.

מעתה ואילך, הציבו $n_{max}=100$. עבור ערכים שונים של T, נסו למצוא את μ כך שתתקבלו $N=10,100,1000,10000$. מומלץ לעשות זאת באיטרציות נומריות (ראו בנספח).

4. הדרכה לחישובים

בכל החישובים יוצרים מצב התחלתי שבו כל אחד מ-N החלקיקים ממוקם באופן שרירותי במצב האנרגיה התחלתי משלו, בין $E_0=0$ ועד $E_{n_{max}}=n_{max}\varepsilon$. ממצב זה נאפשר למערכת לבצע אבולוציה לעבר שיווי משקל תרמודינאמי בשיטה דומה לזו של תרגיל 2:

א. בכל צעד מגרילים את אחד מ-N החלקיקים. חלקיק זה יכול לקבל מהאמבט אנרגיה או למסור לאמבט אנרגיה, בשני המקרים ביחידה אחת של ε.

ב. ההסתברויות לקבל אנרגיה, $P(n\rightarrow n+1)$, ולמסור אנרגיה, $P(n\rightarrow n-1)$, נקבעות לפי המשקל המתאים מהניוון ומפקטור בולצמן, כדלקמן:

$$P(n\rightarrow n+1)=\frac{g(n+1)\Big/\left[e^{\beta\varepsilon(n+1-\mu/\varepsilon)}-1\right]}{g(n+1)\Big/\left[e^{\beta\varepsilon(n+1-\mu/\varepsilon)}-1\right]+g(n-1)\Big/\left[e^{\beta\varepsilon(n-1-\mu/\varepsilon)}-1\right]}$$
$$P(n\rightarrow n-1)=\frac{g(n-1)\Big/\left[e^{\beta\varepsilon(n-1-\mu/\varepsilon)}-1\right]}{g(n+1)\Big/\left[e^{\beta\varepsilon(n+1-\mu/\varepsilon)}-1\right]+g(n-1)\Big/\left[e^{\beta\varepsilon(n-1-\mu/\varepsilon)}-1\right]} \tag{4}$$

כלומר – מגרילים באופן אחיד מספר בתחום [0,1), ואם הוא קטן מ-$P(n\rightarrow n-1)$ או שווה לו מורידים את החלקיק רמת אנרגיה אחת, ואם הוא גדול ממנו מעלים את החלקיק רמת אנרגיה אחת. הערה: נשים לב שאנחנו מעלימים בהגדרה זו את האבחנה בין מצבים מנוונים שונים של אותה רמת אנרגיה; העלמה זו מאפשרת לקצר את החישובים ולהתעלם ממעבר של חלקיקים ממצב מנוון אחד לאחר באותה רמה.

ג. הסתייגות: עבור רמת היסוד $n=0$ יש להחליף את $P(n\rightarrow n-1)$ ב-$P(n=0\rightarrow n=0)$, ועבור הרמה העליונה יש להחליף את $P(n\rightarrow n+1)$ ב-$P(n=n_{max}\rightarrow n=n_{max})$ - כלומר, במקרה של רמות אלו יש אפשרות לא לשנות אנרגיה, במקום האפשרות לחרוג מהגבולות $[0,n_{max}]$.

השילוב של סעיפים ב׳ ו-ג׳ יוצר אלגוריתם המכונה ״אמבט חום״ (heat bath),
שבמקרה הנוכחי חלופי לאלגוריתם מטרופוליס מתרגיל 2.

ד. חשוב: בתרגיל זה אנו עוסקים בחלקיקים שאינם ניתנים לאבחנה. לפי-כך, הזהות של החלקיקים מצטמצמת לאבחנה באיזו רמה אנרגתית הם נמצאים. לטפול הנומרי יש שתי גישות אפשריות, המוצגות בנספח: בחרו אחת לפי שיקול דעתכם.

5. הדרכה לתיעוד המערכת

מטרתנו בכל חישוב היא למצוא בדיוק גבוה את הערך של האיכלוס הממוצע של מצב היסוד, $\langle N_0/N\rangle$. לשם כך יש להריץ את המערכת מספר רב של צעדים עד אשר (1) יאבד ה״זיכרון״ של המצב ההתחלתי השרירותי, ו-(2) נקבל התכנסות טובה מבחינת הפלוקטואציות הנומריות. בניגוד לתרגילים קודמים, לא נחליט מראש מה הוא מספר הצעדים הזה, אלא נפעיל **קריטריון התכנסות**, כדלקמן.

א. מחליטים באופן שרירותי ניחוש ראשון למספר הצעדים הרצוי, K. מריצים את המערכת $K/2$ צעדים ללא רישום של התוצאות (זו המחיקה של תנאי ההתחלה), ואז על-פני $K/2$ הצעדים הבאים מייצרים באופן מצטבר את הערך הממוצע $\langle N_0\rangle$. בסוף K הצעדים מקבלים את הממוצע $\langle N_0\rangle_{K/2}$. ואז, מריצים את המערכת לעוד K צעדים שעל-פניהם מקבלים ממוצע חדש, $\langle N_0\rangle_K$.

ב. התכנסות לתוצאה היא כאשר ההפרש היחסי בין שני הממוצעים קטן מסף נדרש, כלומר

$$\frac{\left|\langle N_0\rangle_K-\langle N_0\rangle_{K/2}\right|}{\langle N_0\rangle_K}\le\Delta \quad (5)$$

נסו את הערך $\Delta=10^{-3}$ לטמפרטורות $T\le1$, $\Delta=5\times10^{-3}$ לטמפרטורות $1<T\le2$, ו-$\Delta=10^{-2}$ לטמפרטורות $T>2$.

ג. אם אחרי K הצעדים הראשונים קיבלתם התכנסות לפי הקריטריון של משוואה (4), מה טוב. אם לא, הכפילו את מספר הצעדים ל-$2K$. כלומר, K הופך ל-$2K$, $\langle N_0\rangle_K$ שחישבתם הופך להיות $\langle N_0\rangle_{K/2}$ והמשך ריצה מייצר $\langle N_0\rangle_K$. ושוב: הצלחתכם לקבל התכנסות לפי התנאי של משוואה (4)? מצויין. אם לאו, שוב עליכם להכפיל את מספר הצעדים – ל-$4K$ (כלומר, לבצע עוד $2K$ צעדים). בשאיפה, אם בחרתם K סביר כניחוש ראשון, הפעולה הזו תתכנס די מהר.

ד. במקביל לתיעוד $\langle N_0\rangle_K$ הקפידו לתעד גם את הממוצע $\langle N_0^2\rangle_K$. כך תהיה לכם הערכת שגיאה לתוצאה – סטיית התקן שווה, כמובן, לגודל

$$\sigma_{N_0}=\sqrt{\langle N_0^2\rangle-\langle N_0\rangle^2}\,. \quad (6)$$

ה. במקביל למעקב אחרי $\langle N_0\rangle$ ו-$\langle N_0^2\rangle$, צברו באופן מצטבר (שוב בחלק השני מ-K הצעדים שאתם עושים) את $\langle U_{tot}\rangle$ ו-$\langle U_{tot}^2\rangle$. כידוע, בצבר קאנוני האנרגיה הכללית עושה פלוקטואציות באופן מתמשך סביב ערך שיווי המשקל, ומסטיית התקן של הפלוקטואציות ניתן למצוא את קיבול החום הסגולי (פר חלקיק) של המערכת, לפי הקשר

$$c_V=\frac{C_V}{N}=\frac{k_B}{N}\left(\frac{\langle U_{tot}^2\rangle}{(k_BT)^2}-\frac{\langle U_{tot}\rangle^2}{(k_BT)^2}\right). \quad (7)$$

למען הסר ספק: עבדו כמובן בגדלים חסרי יחידות, כאשר k_B מנורמל ל-1 ו-k_BT ו-U_{tot} הם חסרי יחידות ונמדדים בעצם ביחידות של ε.

6. <u>חישובים לביצוע</u>

א. בצעו סדרות של חישובים כדלקמן: בדקו ערכים שונים של מספר החלקיקים הכללי, N=10,100,1000,10000. לכל N בצעו סדרה של חישובים עם ערכים שונים של הטמפרטורה בין T_{min}=0.2 ל-T_{max} שאותו יש להתאים ל-N לפי הקשר $T_{max}=5\log_{10}(N)$ (עבור N=10000 נדרש קצת יותר, T_{max}=25). השתמשו ב-T_{min} גם כהפרש בטמפרטורה בין חישוב לחישוב בסדרה. שוב יש להדגיש כי הערכים של הטמפרטורה, האנרגיה וקיבול החום הם למעשה חסרי יחידות, שכן הגודל החשוב הוא k_BT/ε, ואתם עובדים למעשה עם k_B"="ε"="1.

הערה: אם אינכם מצליחים להריץ 10000 חלקיקים, אנא הוסיפו בדיקות ב-2000 וב-5000 חלקיקים.

הערה (10.12): אם אתם מתקשים לכנס בטמפרטורות גבוהות, כאשר $\langle N_0\rangle/N<10^{-4}$, נסו להשתמש בקריטריון פשוט יותר: הפעילו את הדרישה לשינוי של הממוצע בפחות מ-1% (משוואה (5)) על האנרגיה הכוללת U_{tot} במקום על N_0. אם גם זה לא עוזר, עצרו את הסקר כאשר $\langle N_0\rangle/N<10^{-4}$.

ב. רק עבור המקרה N=100, חזרו על החישובים עבור המקרה של אוסילטור חד-מימדי, שבו $g(n)=1$ לכל n.

7. <u>הצגת התוצאות</u>

א. לכל אחד מערכי N בסעיף 5 א', שרטטו גרף של $\langle N_0\rangle/N$ כפונקציה של T עבור הערכים המכונסים, והראו על כל ערך גם את סטיית התקן היחסית $\sigma_{N_0}/\langle N_0\rangle$. נסו לזהות את הטמפרטורה הקריטית, T_C, בכל אחד

מארבעת המקרים (הטמפרטורה שממנה ומעלה $\langle N_0\rangle \approx 0$). הדרכה: קבעו "ערך ספי" של $\langle N_0\rangle/N$ שמתחתיו מדובר מעשית באיכלוס זניח של רמת היסוד.

ב. ציירו גרף נוסף של $T_C(N)$ ונסו לחלץ ממנו את התלות של T_C ב-N (רמז – נסו חוק חזקה).

ג. לכל אחד מערכי N בסעיף 5 א', שרטטו גרף של c_V כפונקציה של T. נסו לזהות את התלות של קיבול החום בטמפרטורה עבור $T<T_C$ (שוב חוק חזקה) ועבור $T>T_C$ (עבור טמפרטורות מספיק גבוהות לא תקבלו חוק חזקה; מה קיבלתם?).

ד. ציירו את $\langle N_0\rangle$ ו-c_V עבור N=100 חלקיקים באוסילטור חד-מימדי (סעיף 5 ב'). הצביעו על הבדלים איכותיים יחסית לחישוב המקביל באוסילטור התלת-מימדי, אם יש כאלה.

נספח – מציאת הפוטנציאל הכימי

כאשר N ו-T נתונים, יש למצוא את μ שמקיים את המשוואה (3). הואיל ומשוואה (3) מייצרת N גדול יותר ככל ש-μ מתקרב לאפס (ונזכיר שוב ש-μ שלילי), נוח למצוא את μ הנדרש בשיטת "ציד אריות":

- מציבים שני ערכי קיצון – μ_{max}=0 ו-μ_{min} שלילי מאוד (עדכון 10.12: קחו μ_{min}=-30 בכל החישובים).
- מתחילים עם μ_{try} בדיוק באמצע בין μ_{max}=0 ו-μ_{min}, ומחשבים את Ntry לפי משוואה (3).
  (A) אם יוצא $N_{try}>N$ צריך להקטין את μ_{try} – נעדכן $\mu_{max}=\mu_{try}$ ונכין ניחוש חדש שהוא באמצע בין μ_{try} הנוכחי ל-μ_{min}.
  (B) אם יוצא $N_{try}<N$ צריך להגדיל את μ_{try} – נעדכן $\mu_{min}=\mu_{try}$ ונכין ניחוש חדש שהוא באמצע בין μ_{try} הנוכחי ל-μ_{max}.
- חוזרים על שלבים (A) ו-(B) ככל שנדרש עד שמתכנסים לערך של m שנותן $N_{try}=N$ (מספיק למצוא את m בדיוק שבו הערך השלם $\mathrm{INT}(N_{try})$ שווה ל-N). מאחר שמדובר בפונקציה מונוטונית $N(\mu)$ אנו בטוחים שנתכנס לתוצאה הנכונה.

נספח- הגרלה מתוך חלקיקים בלתי ניתנים לאבחנה

כאמור, בכל צעד מונטה קרלו נרצה להגריל חלקיק אחד שימסור או יקבל אנרגיה. מאחר שהפעם (בניגוד לתרגיל 2) החלקיקים אינם ניתנים לאבחנה, וההגרלה איננה בחירה של "איזה מספר חלקיק" אלא בחירה של המצב הקוואנטי שממנו יגיע החלקיק הבא. להלן שתי הצעות לאפשרויות לאלגוריתם המתאים.

א. הגרלת המצב האנרגתי המשתתף

בכל צעד מגרילים את אחד המצבים ועל חלקיק אחד מתוכו מפעילים את האלגוריתם המתואר בסעיפים 3 ב'-ג'. ההסתברות לבחור את המצב הקוואנטי n שחלקיק שלו משתתף בצעד $p(n)$, היא פשוט החלק היחסי של החלקיקים המצוי במצב הקוואנטי n, כלומר $p(n)=N(n)/N$.

המימוש הטכני הפשוט ביותר של הצעדים הוא כדלקמן.

- לקראת כל צעד נכין מערך של ערכים $\pi(n)$ כאשר

$$\pi(n)=\sum_{n'=0}^{n} p(n), \tag{A.1}$$

  כאשר יוצא, כמובן, $\pi(0)=N_0/N$ ו-$\pi(n_{max})=1$.
- בכל צעד מגרילים מספר אקראי π_* בתחום $[0,1)$, וסורקים בזה אחר זה ערכים של n_* עד שמוצאים אז זה שמקיים

$$\pi(n_*-1)<\pi_*\le\pi(n_*) \tag{A.2}$$

(כולל ההכללה $\pi(-1)=0$ כדי לטפל ברמת היסוד).

- שימו לב כי לאחר כל צעד אין צורך לעדכן את כל המערך $\pi(n)$ אלא רק את הערכים של שני המצבים שהשתנו.

ב. <u>הגרלת החלקיק המשתתף ומחיקת הזהות שלו</u>

החזיקו מערך $n(N)$ המזהה לכל חלקיק את המצב האנרגתי שבו הוא נמצא, אך הקפידו שהמערך מסודר לפי לפי ההיירארכיה של האנרגיה: N_0 החלקיקים הראשונים הם במצב $n=0$, N_1 הבאים הם במצב $n=1$ וכן הלאה. בכל צעד מגרילים את אחד מ-N החלקיקים (כולם בסיכוי שווה) ומזיזים אותו ל-n-1 או ל-n+1 לפי האלגוריתם של סעיפים 3 ב׳-ג׳.

חוסר האבחנה בין החלקיקים מושג על-ידי עדכון המערך $n(N)$ אחרי כל צעד כדי להחזיר את ההיירארכיה. כמובן שאין צורך לעשות זאת לכל המערך, אלא רק למקומות שהושפעו מהמעבר. כלומר, אם יצא ששינינו את הערך של $n(j)$, יש להחליף את מקומו במערך עם ערכים אחרים כך שיהיה במקום j` שמתאים לאנרגיה החדשה שלו. המערך צריך תמיד לקיים $n(j)\leq n(j+1)$.