

Gradu Amaierako Lana / Trabajo Fin de Grado
Fisikako Gradua / Grado en Física

MinervaLab II

Jupyter Notebook-etan oinarritutako irakaskuntza-proiektu
alternatiboa

Egilea/Autor/a:
Iker Gonzalez Yeregui
Zuzendaria/Director/a:
Josu M. Igartua



Gaien aurkibidea

1	Sarrera eta helburuak	3
2	Garapena: oinarri teorikoak	5
2.1	Proiektua ezaugarrituz	5
2.1.1	Zer da MinervaLab?	5
2.1.2	Zergatik bigarren bertsioa?	5
2.1.3	Proiektuaren ezaugarriak	6
2.2	Erabilitako tresnak	6
2.2.1	Jupyter Notebook	7
2.2.2	Git/GitHub	8
2.2.3	Binder	9
2.2.4	ReadTheDocs	10
3	Emaitza: MinervaLab 2.0 bertsioa	11
3.1	Gas ideala	12
3.1.1	Zero printzipioa eta tenperatura enpirikoa	12
3.1.2	Bolumen konstanteko gas-termometroa	13
3.1.3	Gas idealaren egoera-ekuazioa	14
3.1.4	Prozesu kuasiestatikoak	15
3.1.5	Barne-energia eta diferentzial zehatzak	16
3.1.6	Lana eta diferentzial ez-zehatzak	17
3.1.7	Prozesu politropikoak	18
3.1.8	Ziklo termodinamikoak	20
3.2	Fermi-ren gas ideala	25
3.2.1	Fermi-Dirac eta Bose-Einstein banaketak	25
3.2.2	Fermi-ren energia	27
3.2.3	Egoera-dentsitatea	31
3.2.4	Potentzial kimikoa	32
3.2.5	Energia eta bero-ahalmena	34
4	Ondorioak	36

1. kapitulua

Sarrera eta helburuak

Zientziaren arloko goi-mailako irakaskuntzak erronka handi bat planteatzen du: kontzeptu abstraktu eta konplexuak azaltzea, ikasleek benetan ulertu eta barneratuko dituzten era batean. Hainbat ikerketen arabera, ikasleen jarrera aktiboan oinarritutako irakaskuntza-metodologiekin eragin positiboa dute ikasleek kontzeptuak barneratzeko duten gaitasunean [1]. Fisikan, esate baterako, ikerkuntzan oinarrituriko metodologiekin, ikasleek etekin akademiko handiagoa lortzen dutela ikusi da, ohiko klase magistralekin alderatuta [2].

Metodologia horietan, adierazpen grafikoek garrantzia berezia dute, ezagutzak hobeto finkatzen laguntzen baitute [3]. Ohiko euskarrietako (liburuak, gardenkiak) adierazpen grafikoak estatikoak izan ohi dira. Horrek esan nahi du ikasleak ez duela modurik grafikoak erakusten ez duen informaziorik ikusteko. Teknologia berriei esker, posible da adierazpen grafiko interaktiboak sortzea, eta horiek sortzeko kodea eskuragarri jartzzea. Honek bi abantaila ditu: batetik, interaktibitateari esker, ikasleak ikusi nahi duen informazioa hautatu dezake. Bestetik, grafikoa sortzeko kodea ikusgai badago, hura begiraturaz adierazpenen jatorria hobeto uler daiteke.

Lan honen helburua fisikaren irakaskuntzarako euskarri digital bat garatzea izango da: MinervaLab proiektua. MinervaLab Jupyter Notebook-etan oinarritutako web-aplikazio sorta bat da, Termodinamika eta Fisika Estatistikoaren inguruko kontzeptuak era interaktibo batean irudikatzen dituenak. Proiektua lehendik sortua bazegoen ere [4], lan honetan ekarpen kualitatibo zein kuantitatiboa egingo da, proiektuaren 2.0 bertsioa sortuz. Zeharkako helburu gisa ezarri da proiektuaren garapenerako tresna eta lanerako modu egokiak hautatzea. Hautaketa hori, software librearen filosofiaren baitan egin da, erabilitako tresnak edonoren eskura egon daitezkeen. Zer esanik ez, tresnak horiek baliagarriak izan daitezke, fisikaz gain, beste edozein ezagutza-esparrutan antzerako proiektuak garatzeko.

Lan honetan, proiektuaren garapena eta emaitzak jasoko dira. Lehenengo zatian, proiektua garatzeko motibazioa eta haren ezaugarri nagusiak azalduko dira. Ezau-

garri horietatik abiatuta, proiektua garatzeko hautatu diren tresnak deskribatuko dira. Bigarren zatian, aplikazioekin landu nahi diren kontzeptuen inguruko apunteak prestatuko dira. Apunte horien helburua da aplikazioen erabileraren adibide bat proposatzea. Apunteetan zehaztuko da garatutako aplikazio bakoitzak zein kontzeptu azaltzeko balioko duen. Bukatzeko, lortutako emaitzen balorazioa eta hurrengo pausuen inguruko eztabaida jasoko dira, ondorio gisa.

2. kapitulua

Garapena: oinarri teorikoak

2.1 Proiektua ezaugarrituz

2.1.1 Zer da MinervaLab?

MinervaLab “Termodinamika eta Fisika Estatistikoa” irakasgaiaren irakaskuntza-prozesuan laguntzeko euskarri digitala da. Zehatzago, aplikazio-sorta bat da, irakasgaiaren zehar agertzen diren adierazpide grafikoak modu interaktiboan irudikatzen dituen, besteak beste. Proiektuaren lehen bertsioa 2020ko ekainean argitaratu zuen Jon Gabirondo López-ek bere Fisikako Graduoko GrALean [5].

Lehenengo bertsio horretan, 13 aplikazio garatu ziren gai zentral baten inguruan: Van der Waals-en egoera-ekuazioa. Gai horrekin lotutako hainbat kontzeptu lantzen zituen: fase-trantsizioak, Maxwell-en eraikuntza, puntu kritikoa...

Programa GPLv3 lizentziapean argitaratuta dago [6]; beraz, edonork erabili, editatu eta partekatu dezake (beti ere lizentziak zehazten dituen mugen barnean). Ikasleek aplikazioak sarean exekutatu ditzakete, aurretik ezer instalatu gabe. Horrez gain, kodea ere ikus dezakete, eta, nahi izanez gero, aldaketak egin komeni zaien emaitza lortzeko. Irakasleak ere erabili dezake kodea apunte interaktiboak sortzeko.

2.1.2 Zergatik bigarren bertsioa?

Fisikako Graduoko “Termodinamika eta Fisika Estatistikoa” irakasgaia bi bloke handitan banatuta dago: lehenengo lauhilekoan Termodinamika lantzen da, eta bigarren lauhilekoan, Fisika Estatistikoa. Termodinamikaren barruan, Van der Waals-en egoera ekuazioa azken asteetan lantzen da soilik, fase-trantsizioak azaltzeko, hain zuzen ere.

Horrek esan nahi du lehenengo bertsioan garatu ziren aplikazioak Termodinamikaren blokearen zati batean besterik ez direla erabilgarriak.

Bigarren bertsioaren helburua da aplikazioen erabilgarritasun-eremua zabaltzea. Horretarako, bi gai berri landuko dira: bata Termodinamikarekin lotua eta bestea Fisika Estatistikoarekin. Modu horretan, irakasgaiaren zati handi batean erabili ahal izango da programa.

2.1.3 Proiektuaren ezaugarriak

Proiektua lehendik sortua zegoenez, proiektuaren ezaugarrien inguruko hausnarketak lehenengo bertsioaren txostenean jasota daude [5]. Hala eta guztiz ere, komeni da gako garrantzitsuenak berriz azpimarratzea.

- **Interaktibitatea:** Ohiko euskarri estatikoek (liburuak, gardenkiak eta abar) beren mugak dituzte informazioa erakusterakoan. Aplikazio interaktiboek, berriz, erakusten duten informazioa moldatu dezakete erabiltzaileak sartutako balioen arabera. Honek sartutako balio bakoitzaren eragina hobeto ulertzen laguntzen du.
- **Kode irekia:** Programaren helburua da ikasleak ondo ulertzea adierazpide grafikoak nola lortzen diren. Horretarako, GUI-az gain, kodea ere eskuragarri egon behar da erabiltzailearentzat. Modu horretan, ikasleak kalkulu guztiak nola egin diren ikus dezake. Gainera, kodea irekia izateak erabiltzaileari kodea bera manipulatzeko aukera ematen dio.
- **Erabilerraztasuna:** Programa lagungarri izan behar da ikaskuntza-prozesuan; ez oztopo. Beraz, ahal den heinean, instalazio-prozesu luzeak eta sistemen arteko bateragarritasun-arazoak saihestu behar dira.
- **Dokumentazioa:** Software librearen arloan, ezinbestekoa da programa ongi dokumentatuta egotea; izan ere, kodeari hobekuntzak egiteko, lehendabizi, kodea ulertu behar da.

2.2 Erabilitako tresnak

Proiektua garatzeko erabiliko diren tresnak deskribatuko dira atal honetan. Aurreko atalean aipatutako ezaugarriak izango dituen materiala sortu ahal izateko, garrantzitsua da tresna egokiak aukeratzea. Tresna horiek aukeratzeko orduan, kode-irekikoak izatea hobetsi da, sortutako materiala edonork erabil eta editatzeko aukera izan dezan.

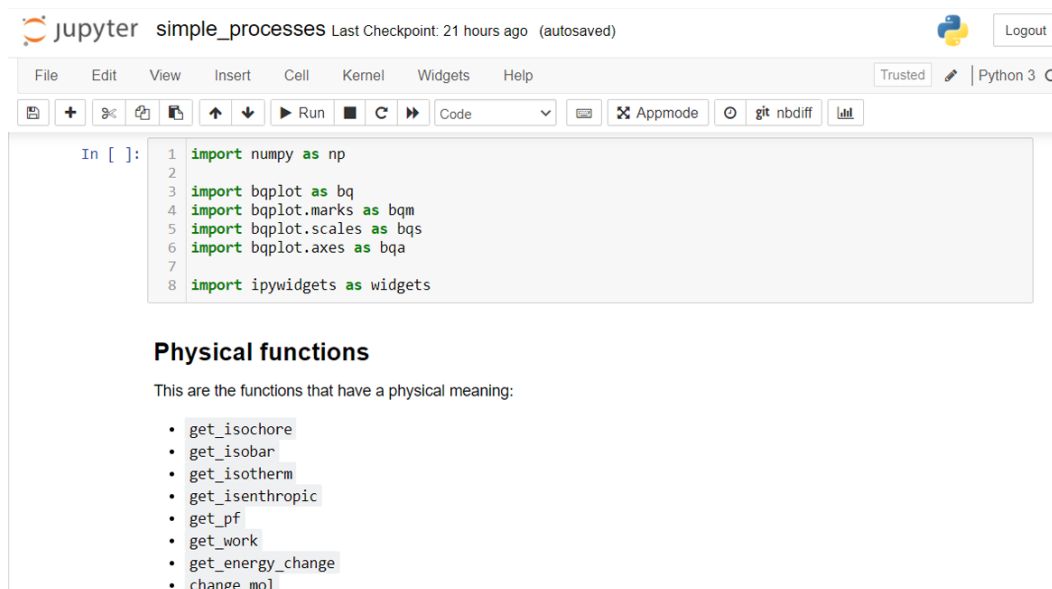
2.2.1 Jupyter Notebook

Jupyter Notebook konputazio-prozesu baten atal guztiak (garapena, dokumentazioa eta exekuzioa) fitxategi bakar batean barnebiltzea ahalbidetzen duen web-aplikazio bat da [7]. Fitxategi horiek (*notebook*-ak) Jupyter-ek eskaintzen duen ingurunea erabiliz editatu eta exekutatu daitezke.

Notebook-ak gelaxketan antolatuta daude, eta gelaxka horietako bakoitzak mota ezberdineko informazioa izan dezake. Oro har, bi multzotan sailkatu daitezke gelaxkak:

- **Kode gelaxkak:** Gelaxka hauetan, kodearen zatiak idatzi daitezke. Jupyter Notebook-ek 40 programazio lengoaietatik gora onartzen ditu, horien artean Python, C++, Java, Julia edota R. Kodea exekutatu ahal izateko, beharrezkoa da dagokion *kernel*-a instalatuta edukitzea. Gainera, erabiltzen diren pakete guztiak ere aurrez instalatuak egon behar dira. Gelaxkak banan-banan exekutatu daitezke eta emaitza gelaxka bakoitzaren azpian agertzen da.
- **Markaketa gelaxkak:** Gelaxka hauetan, markaketa-lengoaiak erabili daitezke formatudun testuak idazteko. Lengoai erabilienak onartzen ditu, hala nola, HTML, Markdown edota LaTeX. Gelaxka bat exekutatzean, testua konpilatzen da dagokion formatuarekin.

Kodea eta prosa konbinatzeko duen gaitasuna dela eta, *notebook*-ak oso erabilgarriak dira konputazio zientifikoaren arloko ikerketak partekatzeko [8].



2.1. irudia: Jupyter-en editorean irekitako *notebook* baten adibidea. Goian, kode gelaxka bat agertzen da. Azpian, konpilatutako Markdown gelaxka bat agertzen da.

Jupyter Notebook erabiltzeko beste arrazoi bat da interaktibitateko duen aukera. IPython-eko *widget*-ak erabiliz, GUI txukunak sortu daitezke. *Widget*-en bidez, sarre-rako parametroen balioak aldatu daitezke kodea ikutu gabe. Modu horretan, erabil-tzailea eta programaren arteko interakzioa errazteaz gain, sarrerako balioen espektroa mugatu daiteke errorerik ematen ez duten balioetara.

Widget-en erabileraren adibide bat Termodinamikan oso ohikoak diren aldagai anitze-ko funtzioen adierazpena da. 2D-ko grafika estatiko batean, aldagai bakarra adierazi daiteke absiza ardatzean. Funtzioa irudikatu ahal izateko, balio finkoak eman behar zaizkie gainerako aldagaiei. Horrek zaildu egiten du aldagai horien esangura fisikoa ulertzea. *Widget*-en bidez aldiz, kontrol indibidual bat sortu daiteke aldagai indepen-dente bakoitzarentzat eta horiek mugitu ahala, grafikoa eguneratu daiteke sartutako balioen arabera.

Programazio lengoaiari dagokionez, **Python** aukeratu da aplikazioak garatzeko. Sintaxi simple eta ulerterra izateaz gain, liburutegi potente asko ditu, eta, gainera, Fisikako Graduko lehenengo urtean erakusten den lengoia da. Python lengoiarekin batera, zenbait liburutegi erabili dira. Hauek dira gehien erabilitakoak:

- **Numpy:** liburutegi hau zenbakizko datu adierazpenerako estandarra da, Python-en testuinguruan [9]. Funtzio matematiko arruntak eskaintzeaz gain, bektore, matrize eta datu-egitura konplexuagoak kudeatzeko erraztasun handiak ematen ditu.
- **Ipywidgets:** Ipython *kernel*-aren *wideget*-ak erabili eta kontrolatzeko liburutegia da [10]. Mota ezberdinetako *widget*-ak eskaintzen ditu, eta hauek antolatzeako *container*-ak ere inplementatzen ditu.
- **Bqplot:** adierazpen grafikoak egiteko liburutegia da. Python-ekin grafikoak egiteko liburutegi estandarra matplotlib den arren, bqplot-ek integrazio hobea du IPython-eko *widget*-ekin. Hori dela eta, proiektu honetarako bqplot liburutegia erabiliko da.

2.2.2 Git/GitHub

Aplikazio ugari garatuko direnez, eta fitxategietan etengabe aldaketak egingo direla aurreikusten denez, bertsio-kontrolerako sistema bat ezartzea erabaki da. Horretarako tresna aproposa da **Git** [11].

Bertsio-kontrola deritza, proiektu batean, denboran zehar, fitxategiek jasaten dituzten aldaketen erregistroari. Erregistro horren bidez, denboran “atzera” egin daiteke, eta fitxategiak aldiune konkretu batean zuten egoerara itzuli. Hau oso erabilgarria da, adibidez, ustekabean ezabatutako fitxategiak berreskuratzeko.

Git bertsio-kontrolerako sistema estandarra bilakatu da, baita software pribatiboaren garapenean ere. Esate baterako, Google, Facebook eta Microsoft-ek Git erabiltzen

dute haien proiektuen bertsioak kudeatzeko [12]. Git eskuragarri dago sistema-eragile gehienetan instalatzeko: Windows, OS zein Linux.

Git-en funtzionamendua oso sinplea da. Hasteko, kontrolatu nahi diren fitxategien karpeta Git hasieratu behar da. Ondoren, kontrolatu nahi diren fitxategiak zeintzuk diren adierazi behar zaio Git-i. Horren ostean, fitxategi horietan aldaketak egiten direnean, *commit* bat egin behar da aldaketak gordetzeko. *Commit*-ak aldiune horretako fitxategi guztien egoera gordetzen du erregistroan. Garapenak aurreran egin ahala, egindako *commit*-en zerrenda luzatzen joango da. Edozein momentutan, proiektu guztia leheneratu daiteke *commit* zahar baten egoerara.

Git-en beste ezaugarri interesgarri bat adarkatzea da (*branching*, ingelesez). Teknika horrek proiektuaren adar ezberdinak sortzea ahalbidetzen du, adar horietan era independentean lan egiteko. Adar horiek nahi den moduan banandu eta elkartu daitezke. Hau oso erabilgarria da ezaugarri berriak probatzeko, eta aldi berean, ondo dabilen kodea “garbi” mantentzeko.

Git-en potentzialitate guztia, ordea, software kolaboratiboaren garapenean esplotatzen da. Badira zenbait web-plataforma Git-en bidez kontrolaturiko fitxategien kopiak hodeian gordetzeko aukera ematen dutenak eta kodea taldean garatzeko tresnak eskaintzen dituztenak. Plataforma horietan ezagunena **GitHub** da.

GitHub web-zerbitzari bat da, biltegiak (*repository*) hodeian gordetzeko aukera ematen duena. Biltegi horietan, Git-en bitartez sorturiko *commit* guztiak gordetzen dira, beraz, GitHub-en bertan, proiektuaren historia guztiaren kopia bat gordetzen da. Lokalean *commit* berri bat egiten den bakoitzean, *push* bat egin daiteke hodeiko biltegira, hau ere eguneratu dadin. Era berean, GitHub-en zuzenean *commit* bat egiten bada, aldaketa hori lokalera “jaitsi” daiteke *pull* bat eginez. Hau oso erabilgarria da talde-lanean aritzeko, garatzaile guztien bertsioak eguneratzea izugarri errazten baitu.

Proiektu honen kasuan, lehenengo bertsioa Jon Gabirondo-ren GitHub kontutik hartu da [13]. Biltegi horren gainean lan eginez garatu da bigarren bertsioa. Emaizta GitHub-eko biltegi berri batean dago eskuragarri [14].

2.2.3 Binder

Jupyter Notebook-ekin lan egiteak badu desabantaila bat: *notebook*-ak exekutatu ahal izateko, erabiltzaileak Jupyter Notebook bera instalatuta eduki behar du. Horrez gain, proiektuan erabili den programazio lengoaiaren *kernel*-a eta kodean zehaztutako pakete guztiak ere instalatu behar ditu.

Arazo hau konpontzeko aukera bat **Binder** erabiltzea da. Binder web-zerbitzu bat da, repositorioak exekutatzeko inguruneak sortzeko eta partekatzeko aukera ematen duena. Modu honetan erabiltzaileak zuzenean jo dezake Binder-eko estekara, eta bertako

zerbitzarietan exekutatu ditzake *notebook*-ak, ezer instalatu gabe.

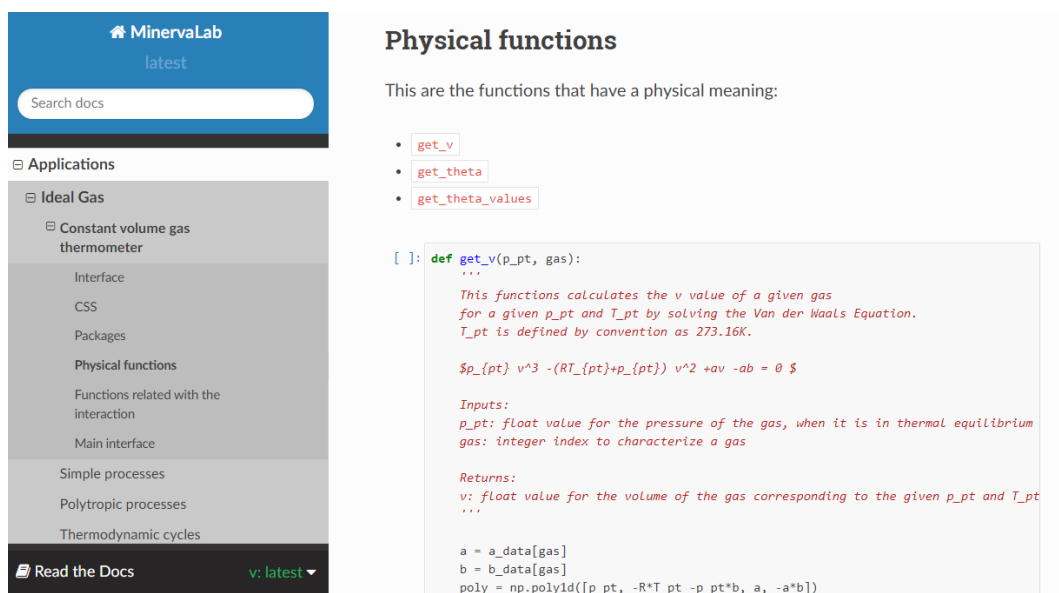
Binder konfiguratzeara oso erraza da. Behin proiektuaren biltegia GitHub-era igota, Binder-eko kontua eta biltegia lotu behar dira, besterik ez. GitHub-eko biltegian “commit” bat egiten den bakoitzean, Binder-eko informazioa automatikoki eguneratzen da.

Proiektuaren GitHub-eko biltegiaren hasieran Binder-eko esteka bat dago, errepositorio guztia exekutatzeko [14].

2.2.4 ReadTheDocs

Proiektuaren dokumentazioa sortu eta argitaratzeko **Read the Docs** tresna erabili da. Tresna horren bidez, testu fitxategietatik abiatuta, dokumentazioak konpilatu daitezke HTML eta PDF formatuetan [15]. Dokumentazio horiek eskuragarri jartzen ditu web-orri batean.

Read the Docs GitHub-eko kontuarekin lotu daiteke; modu horretan, *commit* bat egiten den bakoitzean, dokumentazioa automatikoki eguneratzen da. Gainera, aukera ematen du programen bertsio ezberdinen dokumentazioak sortzeko. MinervaLab-en bigarren bertsioarentzat sortutako aplikazioen dokumentazioak eskuragarri daude sarean [16].



Physical functions

This are the functions that have a physical meaning:

- `get_v`
- `get_theta`
- `get_theta_values`

```
[ ]: def get_v(p_pt, gas):  
    ...  
    This functions calculates the v value of a given gas  
    for a given p_pt and T_pt by solving the Van der Waals Equation.  
    T_pt is defined by convention as 273.16K.  
  
    $p_{pt} v^3 - (RT_{pt} + p_{pt}) v^2 + av - ab = 0 $  
  
    Inputs:  
    p_pt: float value for the pressure of the gas, when it is in thermal equilibrium  
    gas: integer index to characterize a gas  
  
    Returns:  
    v: float value for the volume of the gas corresponding to the given p_pt and T_pt  
    ...  
  
    a = a_data[gas]  
    b = b_data[gas]  
    poly = np.poly1d([p_pt, -R*T_pt - p_pt*b, a, -a*b])
```

2.2. irudia: MinervaLab 2.0 bertsioaren dokumentazioa Read the Docs-en.

3. kapitulua

Emaitza: MinervaLab 2.0 bertsioa

Orain arte azaldutako tresnetan eta lan egiteko moduan oinarrituz, MinervaLab proiektuaren bigarren bertsioa sortu da. Proiektuak lehendik zituen 13 aplikazioei 8 aplikazio berri gehitu zaizkie. Aplikazio berri horietatik lau gas idealarekin lotuta daude, eta beste lauak, Fermi-ren gas idealarekin.

Kapitulu honetan, sortutako aplikazioak erabiliko dira landutako gaien inguruko apunteak prestatzeko. Azalpen teorikoak laguntzeko erabiliko diren irudi guztiak proiektuko aplikazioekin lortu dira. Aplikazioei erreferentzia egiteko, zenbakizko kode bat esleitu zaio aplikazio bakoitzari (ikus 3.1 taula), lehenengo bertsioako numerazio-sistemari jarraituz. Zer esanik ez, kapitulu honetan sortutako apunteak aplikazioei eman dakiekeen erabileraren adibide bat baino ez dira.

Aplikazio guztiak eskuragarri daude proiektuaren GitHub orrialdean GPLv3.0 lizentziarekin [14]. GitHub orrialdean bertan, Binder-eko esteka aurki daiteke, aplikazioak zuzenean exekutatzeko.

Kodea	Landutako kontzeptua	Fitxategia
121-000	Bolumen konstanteko gas-termometroa	gas_thermometer.ipynb
122-000	Prozesu kuasiestatikoak	simple_processes.ipynb
123-000	Prozesu politropikoak	polytropic_processes.ipynb
124-000	Ziklo termodinamikoak	thermodynamic_cycles.ipynb
131-000	Banaketa estatistikoak	distribution_comparison.ipynb
132-000	Fermi-ren energia eta potentzial kimikoa	chemical_potential.ipynb
133-000	Egoera-dentsitatea	density_of_states.ipynb
134-000	Bero-ahalmena	specific_heat.ipynb

3.1. taula: Garatutako aplikazio guztien kodea, deskribapena eta fitxategiaren izena.

3.1 Gas ideala

Termodinamikarekin lotutako aplikazio-sorta gas idealaren kontzeptuaren inguruan erai-ki da. Gas ideala aukeratu da bi arrazoiengatik. Alde batetik, eredu matematikoa erraza delako, eta honek kontzeptuetan sakontzea ahalbidetzen duelako, xehetasun ma-tematikoei arreta handirik jarri gabe. Bestetik, “Termodinamika eta Fisika Estatis-tikoa” irakasgaiaren lehenengo lauhileko osoan ikusten den ia sistema bakarra delako, salbuespenak salbuespen.

3.1.1 Zero printzipioa eta temperatura enpirikoa

Tenperatura-escala bat definitzea ez da eginkizun triviala, izan ere, ezin da tenperatura definitu propietate mekanikoetatik abiatuta, presioarekin egiten den moduan. Tenpe-ratura kontzeptua beraren jatorrian bi fenomeno experimental daude: **oreka termikoa** eta **zero printzipioa** [17].

Kasurik sinpleenean, gas baten egoera adierazteko bi aldagai edo koordenatu termodi-namiko nahikoak dira: presioa eta bolumena. Bi aldagai horiek ondo definituta daude mekanikoki, hau da, fenomeno termodinamikoak kontuan izan gabe. Bi gas, (P_A, V_A) eta (P_B, V_B) , kontaktuan jarritz gero, bi gauza gerta daitezke, bereizteko erabilitako hormaren arabera:

- Kasu batzuetan, ez da ezer gertatuko; A eta B sistemen koordenatuak konstante mantenduko dira, haien balioak edozein direlarik ere. Lau aldagaiak independenteki aldatu daitezke. Mota horretako hornei **horma adiabatiko** deritze.
- Beste kasu batzuetan, sistemen koordenatuak aldatuz joango dira $A(P'_A, V'_A)$ eta $B(P'_B, V'_B)$ balioetan egonkortzen diren arte. Lau aldagaietatik hiru manipulatz gero, laugarrena zehaztuta geratuko da, hau da, lau aldagaietatik hiru baino ez dira independenteak. Mota horretako hornei **horma diatermo** deritze.

Bi sistema oreka termikoan daudela esaten da, horma diatermo batez banandurik egonik ere, beren aldagaiak konstante mantentzen direnean. Esperimentalki ikus daiteke bi sistema, A eta B , bakoitza bere aldetik, oreka termikoan badaude hirugarren C sistema batekin, orduan, A eta B sistemak euren artean ere oreka termikoan daudela. Eraitza horri **termodinamikaren zero printzipioa** deritzo.

Froga daiteke zero printzipioak oreka termikoa karakterizatzen duen $\Theta(P, V)$ funtzio baten existentzia inplikatz duela, non orekan dauden bi sistementzat $\Theta_A = \Theta_B$ bete behar den [17]. Funtzio horri sistemaren **tenperatura enpirikoa** deritzo.

3.1.2 Bolumen konstanteko gas-termometroa

Behin tenperatura enpirikoa zer den definituta, haren eskala bat zehaztu behar da. Eskala hori zehazteko, sistema bat hartzen da estandar gisa (termometro deiturikoa) eta sistema horren $\Theta(P, V)$ funtzioaren balioak zehazten dira arbitrarioki. Hori egiteko hainbat era daude, baina historikoki garrantzitsuena **bolumen konstanteko gas-termometroa da**.

Lehen aipatu bezala, gas baten egoera ongi definitua dago P eta V aldagaien bitartez. Gasaren bolumena konstante mantentzen bada, tenperatura enpirikoa presioaren funtzioa izango da soilik:

$$T = \theta(P) \quad (V \text{ konstante}) \quad (3.1)$$

Funtzio hori lineala izatea eta jatorrian anulatzea eskatzen da arbitrarioki, hau da:

$$T = aP \quad (3.2)$$

Proportzionaltasun konstantea zehaztea bakarrik falta da. Horretarako, erreferentziazko egoera termiko bat aukeratzen da eta balio arbitrario bat ematen zaio. Egoera termiko hori ondo definituta egon behar da, eta idealki, laborategi batean lortzeko erraza izan behar da. Ohikoa uraren puntu hirukoitza aukeratzea da. Arrazoi historikoenatik, uraren puntu hirukoitzari $T = 273.16K$ balioa esleitzen zaio. Beraz, tenperatura honela adierazi daiteke:

$$T = 273.16K \frac{P}{P_{PT}} \quad (V \text{ konstante}) \quad (3.3)$$

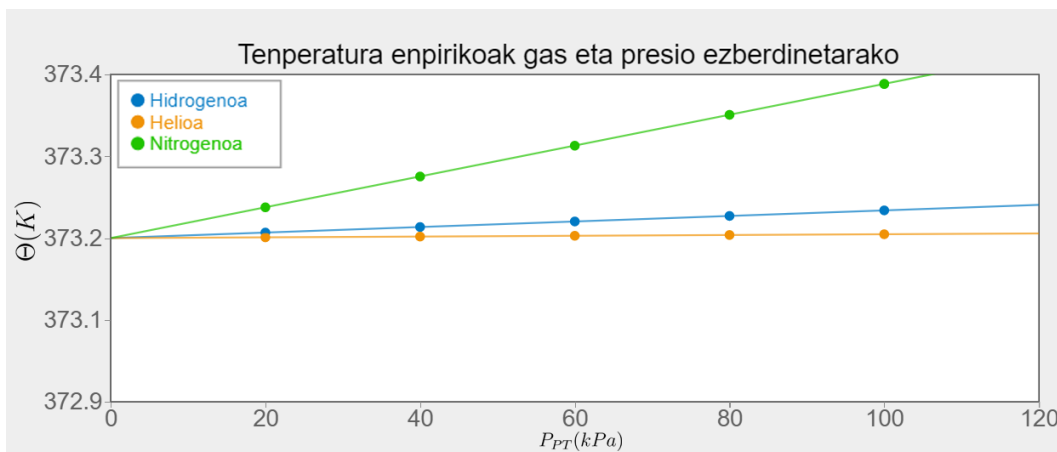
Adierazpen horretan, P_{PT} -k adierazten du neurtzen ari den sistemaren presioa, sistema uraren puntu hirukoitzarekin oreka termikoan dagoenean.

Definizio horrek desabantaila bat du: tenperaturaren balioa sistemaren arabera da. Bi gas ezberdin hartuz gero, egoera termiko berean, tenperaturaren bi balio ezberdin lortzen dira. Are gehiago, gasak identikoak izanda ere, haien dentsitateak ezberdinak badira, tenperatura ezberdinak lortzen dira. Salbuespen bakarra uraren puntu hirukoitzaren tenperatura da, haren balioa $T = 273.16K$ baita definizioz.

Badago ordea tenperatura unibertsal bat definitzeko modu bat: P_{PT} zero egiten den limitean, gas guztientzako tenperatura enpiriko berbera lortzen da. Limite horretan definituriko tenperaturari **gas idealaren tenperatura** deritzo.

Kontzeptu hauek 121-000 aplikazioarekin landu daitezke. Aplikazioak hiru gas ezberdinentzako (hidrogenoa, helioa eta nitrogenoa) tenperatura enpirikoak kalkulatzeko dituzte.

erabiltzaileak zehaztutako P_{PT} -ren balioentzat. Ikus daiteke gas guztien tenperaturak balio bera hartzen duela P_{PT} zero egiten den limitean. Tenperatura horixe da, hain zuzen ere, gas idealaren tenperatura.



3.1. irudia: $T = 350K$ -i dagokion egoera termikoaren tenperatura enpirikoaren balioak P_{PT} -ren balio ezberdinetarako eta gas ezberdinetarako. P_{PT} txikiko limitean, gas idealaren tenperatura berreskuratzen da. Irudia 121-000 aplikazioarekin lortu da.

3.1.3 Gas idealaren egoera-ekuazioa

Aztertu daitekeen sistema termodinamiko sinpleena **masa konstanteko sistema hiddrostatikoa** da [17]. Sistema horrek bi askatasun-gradu baino ez ditu: mekanikoa eta termikoa. Askatasun-gradu horiekin loturiko aldagai termodinamikoak hiru dira: P , V eta T ; beraz, hiru aldagai horiek emanda zehaztu daiteke sistemaren egoera.

Sistema oreka termodinamikoan dagoela esaten da, ingurunearekin kontaktu mekaniko eta termikoan jartzerakoan¹, bere aldagai termodinamikoak aldatzen ez badira. Esperimentalki ikus daiteke oreka termodinamikoa gertatzen dela aldagai termodinamikoek erlazio jakin bat betetzen dutenean. Erlazio berezi horri **egoera-ekuazio** deritzo.

Egoera-ekuazioa, orokorrean, sistema bakoitzaren izaeraren araberakoa izango da. Praktikan, ebidentzia esperimentalean oinarritutako ereduak erabiltzen dira egoera-ekuazio gisa. Eredu horietan sinpleena **gas idealarena** da. Honako forma du gas idealaren egoera-ekuazioak [17]:

$$PV = nRT \quad (3.4)$$

¹Hau esperimentalki lortu daiteke sistema eta ingurunea banantzen dituen horma higikorra eta diatermoa bada.

Adierazpen horretan, n gasaren mol-kopurua da, eta R , gas idealaren konstante uni-bertsala. Masa finkatuta, orekan dagoen gas ideal baten hiru aldagaietatik (P , V eta T) bi baino ez dira independenteak, hirugarrena egoera-ekuazioak zehazten baitu.

3.1.4 Prozesu kuasiestatikoak

Prozesu termodinamiko batean, aztertu nahi den sistema hasierako a egoera batetik bukaerako b egoera batera igaroko da. Naturan espontaneoki gertatzen diren prozesuetan, normalean, sistema ez da oreka-egoeretatik igaroko soilik. Tartean, desoreka-egoeretatik igaroko da. Desoreka-egoera horietan, noski, egoera-ekuazioa ez da beteko. Are eta gehiago, sistema ez badago oreka termodinamikoan, aldagai termodinamikoak aldatu egingo dira puntu batetik bestera, eta beraz, egoera horiek ezingo dira PVT parametroen bidez deskribatu.

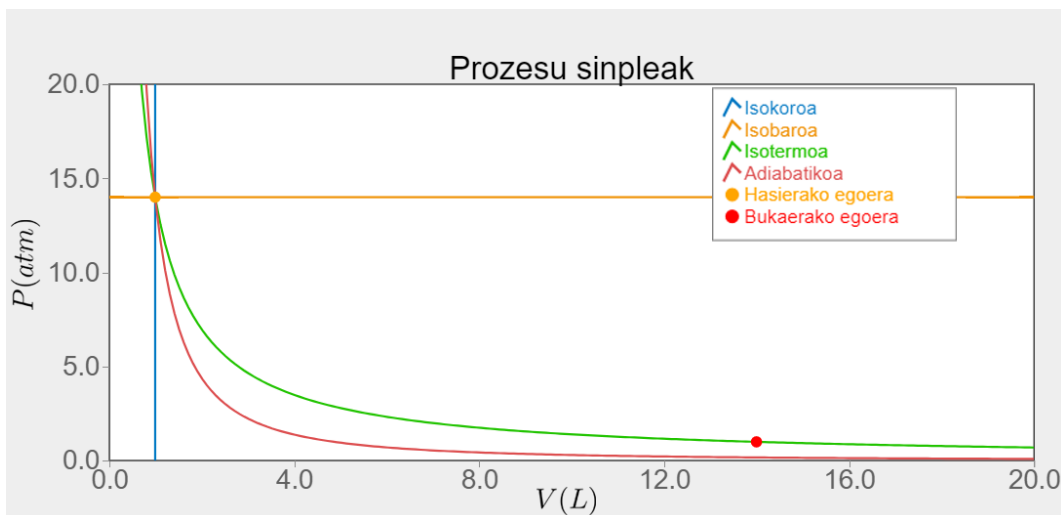
Hori dela eta, prozesu mota berezi bat definitzen da: **prozesu kuasiestatikoa**. Prozesu bat kuasiestatikoa dela esaten da hasierako a eta bukaerako b egoeren artean, sistema oreka egoeretatik soilik igarotzen bada, era jarraituan² [17]. Prozesuak edonolakoak izan daitezke, baina batez ere, lau dira garrantzia berezia duten prozesuak:

- Prozesu isokorua: V konstante mantentzen duen prozesua.
- Prozesu isobaroa: P konstante mantentzen duen prozesua.
- Prozesu isoterma: T konstante mantentzen duen prozesua.
- Prozesu adiabatikoa: Berorik trukatzeko ez duen prozesua (kasu horretan, konstante mantentzen den aldagai termodinamikoa entropia da).

Sistema oreka-egoeretatik soilik igarotzen denez, prozesua 2D-ko grafiko batean irudikatu daiteke (hautaturiko bi aldagai independenteak irudikatuz). Planoko puntu guztiek beteko dute oreka ekuazioa (bi aldagaiak independenteak baitira), baina hasierako puntuak eta prozesuak mugatuko dute zein puntu dauden eskuragarri, eta zeintzuk ez.

Hau irudikatzeko, 122-000 aplikazioa erabili daiteke. Aplikazio horretan, erabiltzaileak hasierako egoera baten V eta P aldagaiak zehaztu ditzake eta programak puntu horretatik igarotzen diren kurba isokoro, isobaro isoterma eta adiabatikoak irudikatuko ditu (ikus 3.2 irudia). Horrez gain, kurbetako puntu bakoitzaren tenperatura ere kalkulatu du gas idealaren egoera-ekuazioa erabiliz.

²Benetako prozesu kuasiestatikorik ez da existitzen, horiek denbora infinitua beharko luketelako. Hala ere, posible da nahi beste hurbiltzea prozesu kuasiestatiko batera. Kalkuluak egiteko oso erabilgarria da prozesuak kuasiestatikoak direla onartzea.



3.2. irudia: Hasierako egoera beretik abiatuta, lau prozesu ezberdinen bidez eskuragarri dauden egoerak, gas idealarentzat. Prozesu bakoitzak kurba bat definitzen du PV diagraman. Irudia 122-000 aplikazioarekin lortu da.

3.1.5 Barne-energia eta diferentzial zehatzak

Lehen aipatu bezala, sistemak hasierako a egoera batetik bukaerako b egoera batera igarotzeko hainbat ibilbide hartu ditzake. Prozesuarekin erlazionaturiko zenbait magnitude (hala nola, sistemaren gainean eginiko lana edota ingurunearekin trukaturiko beroa) harturiko ibilbidearen arabera izango dira. Badira magnitude batzuk ez dutenak ibilbidearekiko menpekotasunik, hau da, hasierako eta bukaerako egoeren menpekoak soilik direnak, adibidez, barne-energiaren aldaketa. Magnitude horiei **egoera-funtzio** deritze [17].

Ikuspuntu matematiko batetik, egoera-funtzioak egoera definitzen duten parametroen funtzio matematikoak dira. Hori dela eta, funtzio horien aldaketa infinitesimalak **diferentzial zehatzak** dira:

$$dF = dF(dx_1, dx_2, dx_3, \dots) \quad (3.5)$$

Masa konstanteko sistema hidrostatiakoaren kasuan, barne-energia da magnitude esanguratsuenetako bat. Sistema horretan, aldagai termodinamiko independenteak bi baino ez direnez, forma orokor honetan adieraz daiteke barne-energiaren aldaketa infinitesimala:

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT \quad (3.6)$$

Gas idealaren kasuan propietate berezi bat betetzen da (orokorrean betetzen ez dena): **barne-energia tenperaturaren funtzio hutsa da**. Esplizituki:

$$U(T) = CnRT \quad (3.7)$$

Edo forma diferentzialean:

$$dU = CnRdT \quad (3.8)$$

Non C gasaren arabeko konstante bat den (gas monoatomikoentzako, esaterako, $C = \frac{3}{2}$).

3.1.6 Lana eta diferentzial ez-zehatzak

Barne-energiaren aldaketa ez bezala, prozesu batean zehar sistemak egindako lana (edo sistemaren aurka eginiko lana) prozesuaren menpekoa da. Horrek esan nahi du ezin dela lana aldagai termodinamikoen funtzio gisa adierazi. Mota horretako diferentzialei **diferentzial ez-zehatzak** deritze.

Lan mekanikoa ibilbide integral baten bidez definitzen da:

$$W = \int_a^b \vec{F} \cdot d\vec{s} \quad (3.9)$$

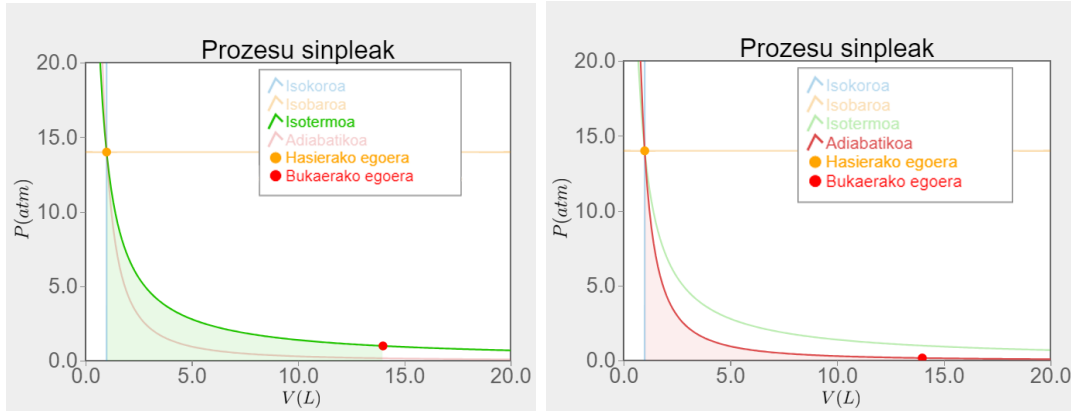
Termodinamikan ordea, komenigarriagoa da presio eta bolumenarekin lan egitea. Aldagaiak berrantolatuz:

$$W = - \int_a^b PdV \quad (3.10)$$

Lana kalkulatu ahal izateko, $P(V)$ funtzioa esplizituki jakin behar da. Aldagai independentetzat V eta T hartuz, egoera-ekuazioa $P = P(V, T)$ izango da orokorrean. Egoera-ekuazio hori ez da nahikoa $P(V)$ lortzeko. Falta den informazioa prozesuak zehazten duena da, hain zuzen ere. Prozesua deskribatzen duen kurba $T(V)$ bada:

$$P = P(V, T(V)) = P(V) \quad (3.11)$$

Grafikoki, lana irudikatu daiteke PV diagraman, kurbaren azpiko azalerarekin bat datorrelako (ikus 3.3 irudia).



3.3. irudia: Gas idealaren kasurako prozesu isotermoda (berdez, ezkerrean) eta adiabatikoa (gorriz, eskuinean). Kurben azpiko azalerak sistemak egindako lana adierazten du. Irudiak 122-000 aplikazioarekin lortu dira.

3.1.7 Prozesu politropikoak

Prozesu politropikoak gas idealentzako prozesu kuasiestatiko mota berezi bat dira. Prozesu horien propietate bereizgarria da trukaturiko beroa eta egindako lanaren arteko zatidura konstante mantentzen dela prozesu osoan zehar [18].

$$K = -\frac{\delta Q}{\delta W} = \text{kte.} \quad (3.12)$$

Propietate horretatik abiatuta, prozesu politropikoen ekuazio orokorra lortu daiteke. Termodinamikaren lehen printzipioaren adierazpen diferentziala honakoa da:

$$\delta Q = dU - \delta W \quad (3.13)$$

Bestalde, 3.4 diferentziatuz, honako adierazpena lortzen da:

$$PdV + VdP = nRdT = (C_P - C_V)dT \quad (3.14)$$

Azken pausuan, $C_P - C_V = nR$ erlazioa erabili da. Erlazio hori zuzena da gas idealarentzako soilik. 3.13 eta 3.14 adierazpenak konbinatuz:

$$\frac{-VdP}{PdV} = (1 - \gamma)K + \gamma \quad (3.15)$$

Non γ gasaren indize adiabatikoa den:

$$\gamma \equiv \frac{C_p}{C_v} \quad (3.16)$$

Aurreko 3.15 adierazpenaren ezkerreko zatia j deitzen zaio:

$$j = \frac{-VdP}{PdV} = (1 - \gamma)K + \gamma \quad (3.17)$$

Prozesu politropikoetan, K konstantea denez, j ere konstantea izango da³. Beraz, 3.17 integratu daiteke:

$$PV^j = C \quad (3.18)$$

Hau da, hain zuzen ere, prozesu politropikoen ekuazioa. Hasierako puntu bat emanda, j -ren balio bakoitzerako prozesu politropiko bakarra existituko da. Prozesu politropikoen kasu bereziak dira aurreko atalean aipaturiko lau prozesuak:

- Prozesu adiabatikoa: $\delta Q = 0$
Prozesu adiabatikoetan ez da berorik trukutzen, beraz, energia-transferentziaren ratioa (K) zero izango da:

$$\delta Q = 0 \rightarrow K = 0 \rightarrow j = \gamma \quad (3.19)$$

$$PV^j = PV^\gamma = C \quad (3.20)$$

- Prozesu isotermoa: $T = C$
 $dT=0$ denez, 3.8 eta 3.13 erabiliz:

$$dU = C_V dT = 0 \quad (3.21)$$

$$K = -\frac{\delta Q}{\delta W} = 1 \rightarrow j = 1 \quad (3.22)$$

- Prozesu isokorua: $V = C$
Bolumena aldatzen ez denez, sistemak ez du lanik egiten, eta beraz, ratioa infiniturantz doa:

$$K = -\frac{\delta Q}{\delta W} \rightarrow \infty \quad (3.23)$$

³ γ konstante mantentzen dela onartuz.

- Prozesu isobaroa: $P = C$

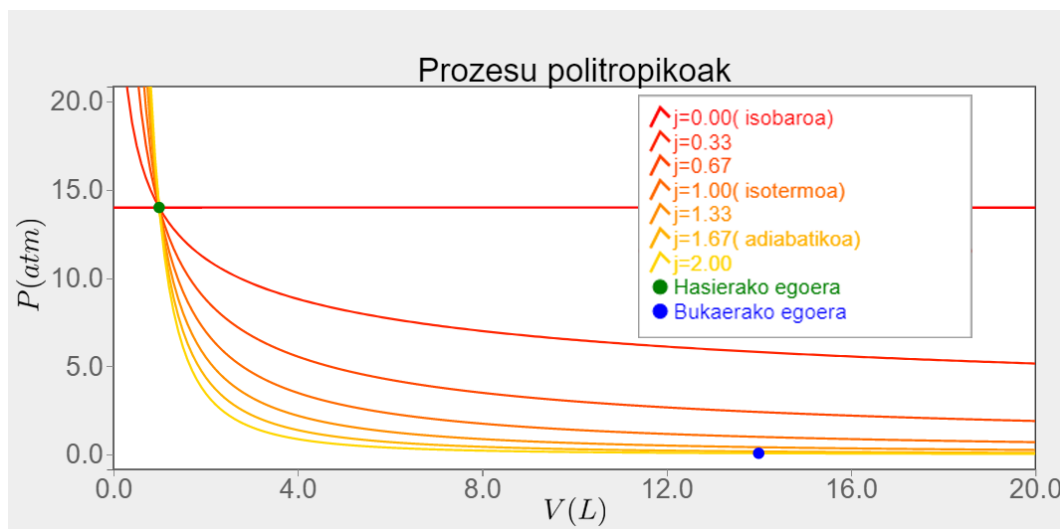
Presio konstanteko bero-ahalmenaren definizioa erabiliz:

$$K = -\frac{\delta Q}{\delta W} = -\frac{C_P dT}{P dV} = -\frac{C_P}{C_P - C - V} = \frac{\gamma}{1 - \gamma} \quad (3.24)$$

Eta 3.17-rekin konbinatuz:

$$j = 0 \quad (3.25)$$

Prozesu politropikoak lantzeko 123-000 aplikazioa garatu da. Aplikazio horretan, erabiltzaileak sartutako j balioentzako kurbak irudikatzen dira PV diagraman. Behin irudikatuta, aplikazioak prozesu bakoitzarekin loturiko energia-aldaketa, lana eta beroa kalkulatu ditu.



3.4. irudia: Hasierako egoera beretik abiatuta, j ezberdineko 7 prozesu politropiko. Kasu berezi gisa, prozesu isobaroa ($j = 0$), isoterma ($j = 1$) eta adiabatikoa ($j = 1.67$) agertzen dira (gas monoatomikoa da kasu honetan). Irudia 123-000 aplikazioarekin lotu da.

3.1.8 Ziklo termodinamikoak

Termodinamikaren aplikazio garrantzitsuenetako bat, zalantzarik gabe, motor termikoak dira. Motor termiko baten funtzioa da bero-iturri batetik energia xurgatzea eta hura lan moduan askatzea. Hori lortzeko, prozesu ziklikoak erabiltzen dira. Simple azalduta, sistema termodinamiko bat (gas ideala adibidez) bero-iturriarekin kontaktuan jartzen da, bertatik energia xurgatu dezan. Ondoren sistema horrek lan egingo du lan-iturri baten aurka, xurgatutako energia askatuz [17]. Ziklo osoa egin ondoren, sistema hasierako egoerara itzultzen da eta berriz ekiten dio prozesuari.

Termodinamikaren bigarren printzipioa dela eta, ezinbestekoa da prozesuan zehar sistemak bero moduan energia galtzea, hau da, xurgatzen duen bero guztia ezin du lan moduan itzuli. Lanaren eta xurgatutako beroaren arteko zatidurari motorraren **errendimendua** deritzo:

$$\eta = \frac{W}{Q_{\text{xurgatu}}} = \frac{Q_{\text{xurgatu}} - Q_{\text{askatu}}}{Q_{\text{xurgatu}}} \quad (3.26)$$

Termodinamikaren lehen printzipioaren ikuspuntutik ez dago mugarik motor batek izan dezakeen errendimenduan, hau da, posible litzateke $Q_{\text{askatu}} = 0$ izatea. Bigarren printzipioak ordea hori debekatzen du. Hainbat modu daude bigarren printzipioa enuntziatzeko. Kelvin eta Planck-en enuntziatuaren arabera [17]:

“Ezinezkoa da, prozesu zikliko batean zehar, erreserba batetik beroa xurgatu eta energia kantitate bera lan moduan askatzen duen motorrik eraikitzea.”

Enuntziatu hori kualitatiboa da, ez baitu zehazten zenbat energia askatu behar den bero moduan, prozesua gauzatu ahal izateko. Emaizta kuantitatibo bat lortzeko, **entropia** kontzeptua erabili behar da. Entropia sistema termodinamikoen propietate estentsiboa da (barne-energia bezala), hau da, sistemaren tamainaren arabera da. Gainera, egoera-funtzioa da, beraz, haren aldaketa hasierako eta bukaerako egoeren funtzioa da soilik. Prozesu batean zeharreko entropia-aldaketa modu honetan definitzen da [17]:

$$dS = \frac{\delta Q_{IG}}{T} \quad (3.27)$$

Non Q_{IG} -ren bidez adierazten den beroa modu itzulgarrian (kuasiestatikoan) transferitu behar dela. Termodinamikaren bigarren printzipioa honela enuntziatzen da, entropia erabiliz: edozein prozesu termodinamikotan unibertsoaren entropiaren aldaketa nulua edo positiboa izan behar da. Entzuntziatu horretan, “Unibertso” hitzak sistemak eta bere inguruneak osatzen duten multzoa adierazten du:

$$\Delta S_{\text{uni}} = \Delta S_{\text{sis}} + \Delta S_{\text{ing}} \geq 0 \quad (3.28)$$

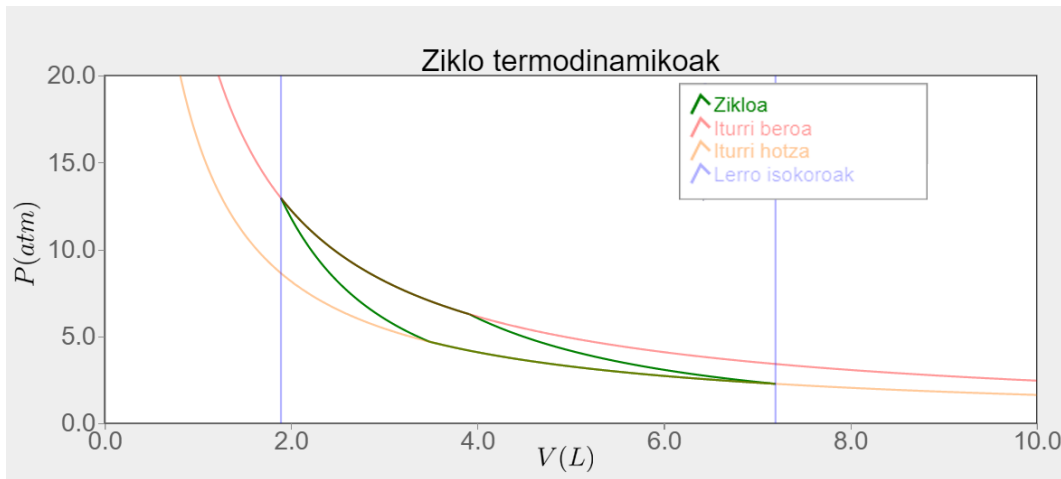
Berdintza betetzen denean, prozesua **itzulgarria** dela esaten da. Desberdintza betetzen denean berriz, prozesua **itzulezina** dela esaten da.

Praktikan, motor termiko batek bi bero-iturri izango ditu eskuragarri: **iturri beroa** eta **iturri hotza**. Iturriak tenperatura konstantean mantentzen diren sistemak dira. Normalean, iturri beroa prozesu kimiko exotermiko baten bidez lortzen da eta iturri hotza airea izaten da.

Hainbat modu existitzen dira ziklo bat osatzeko bi iturri erabilgarri horiekin. Atal honetan, hiru landuko dira soilik: **Carnot-en zikloa**, **Stirling-en zikloa** eta **Diesel zikloa**. Ziklo horiek aztertzeke, 124-000 aplikazioa garatu da. Bertan, erabiltzaileak aztertu nahi duen zikloa, bero-iturriak eta eskuragarri dauden bolumen minimo eta maximoak zehaztuko ditu. Aplikazioak zikloa irudikatuko du *PV* diagraman eta parametro garrantzitsuenak kalkulatuko ditu (lana, errendimendua...)

Carnot-en zikloa: Carnot-en zikloa garrantzia teoriko handiko zikloa da, bi iturriren artean lor daitekeen errendimendu maximoa lortzen duelako [17]. Lau prozesuk osatzen dute Carnot-en zikloa. Hasieran sistema iturri hotzarekin oreka termikoan dagoela suposatuz, honakoak dira lau prozesuak:

1. Berotze adiabatikoa, T_H -tik T_B -ra.
2. Bero-xurgatze isoterma T_B tenperaturan. Q_B energia xurgatzen da.
3. Hozte adiabatikoa, T_B -tik T_H -ra.
4. Bero-askatze isoterma T_H tenperaturan. Q_H energia xurgatzen da.



3.5. irudia: Gas idealarentzako Carnot-en zikloa irudikatuta (berdez) *PV* diagraman. Irudia 124-000 aplikazioarekin lotu da.

Carnot-en zikloa itzulgarria da definizioz. Bero-trukatzeak modu isoterma itzulgarrian egiten direnez, sistemaren eta ingurunearen entropia aldaketak aurkakoak dira:

$$dS_{\text{sis}} = -dS_{\text{ing}} \rightarrow dS_{\text{uni}} = 0 \quad (3.29)$$

Gainera, entropia egoera-funtzioa denez, sistemaren entropia ez da aldatuko ziklo oso bat osatu ostean. 3.27 erabiliz:

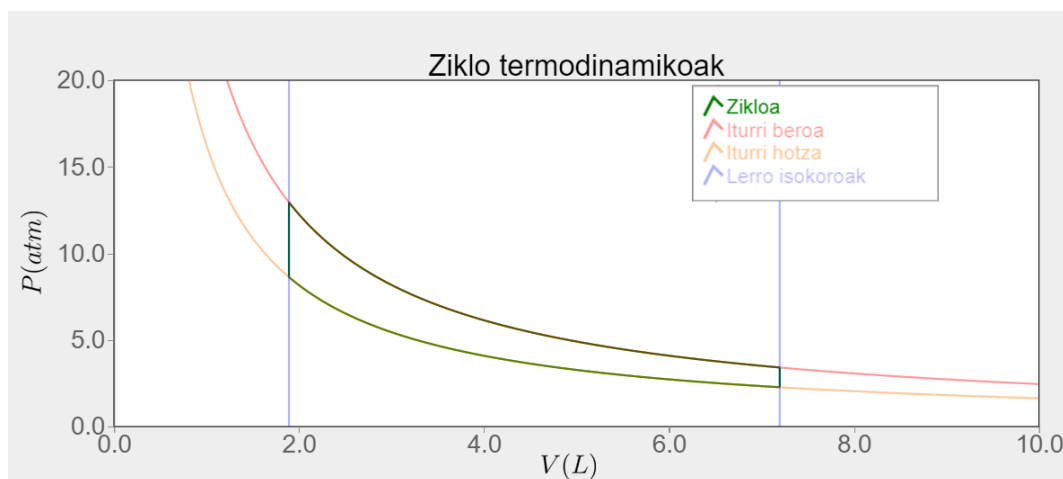
$$\frac{Q_B}{T_B} - \frac{Q_H}{T_H} = 0 \quad (3.30)$$

Emaitza hau 3.26 adierazpenarekin konbinatuz, Carnot-en zikloaren errendimendua lortzen da:

$$\eta_C = 1 - \frac{T_H}{T_B} \quad (3.31)$$

Stirling-en zikloa: Stirling-en zikloa lau prozesuk osatzen dute [17]:

1. Konpresio isoterma. Prozesu honetan Q_H energia askatzen da bero moduan (prozesua itzulgarria da).
2. Konpresio isokorua.
3. Zabaltze isoterma. Prozesu honetan Q_B energia xurgatzen da bero moduan (prozesua itzulgarria da).
4. Deskonpresio isokorua.



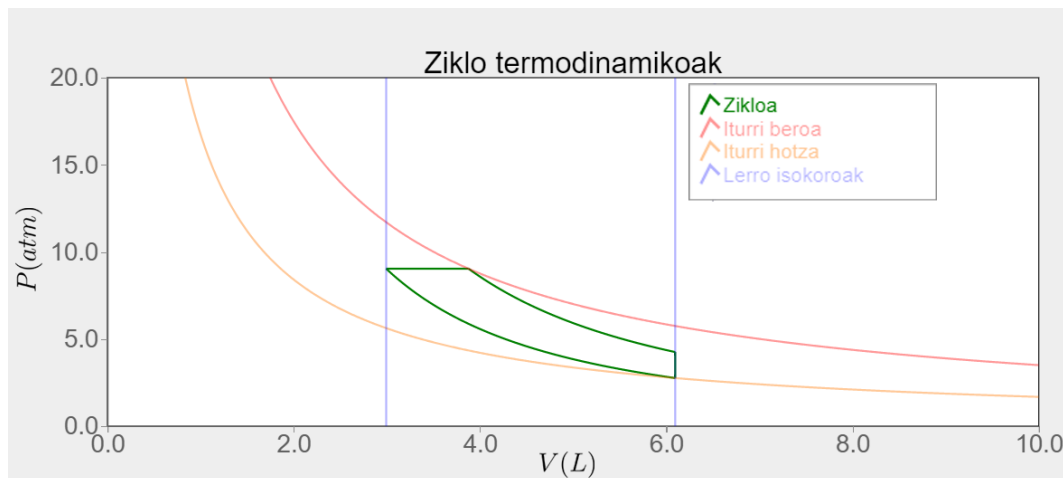
3.6. irudia: Gas idealarentzako Stirling-en zikloa (berdez) irudikatuta PV diagraman. Irudia 124-000 aplikazioarekin lortu da.

Gas idealaren energia tenperaturaren funtzio hutsa denez, 2. prozesuan xurgatutako beroa eta 4. prozesuan askatutakoa bat datoz. Beraz, Stirling-en zikloaren efektu netoa $W = Q_B - Q_H$ lana askatzea da.

Azpimarratu behar da, bi iturri soilik erabiliz, ezin direla 2. eta 4. prozesuak era itzulgarrian egin; izan ere, prozesu horiek kuasiestatikoak izan daitezten, sistema eta ingurunea orekan egon behar dira aldiune guztietan. Sistemaren tenperatura T_H -ren eta T_B -ren arteko tenperatura infinitu guztietatik igaroko denez, ez da orekan egongo ingurunearekin (bi tenperatura erabilgarri bakarri daude eta). Hori dela eta, praktikan, Stirling-en zikloak itzulezinak dira. Stirling-en ziklo idealizatuan, prozesu itzulezinen entropia-aldaketa arbuizaten da eta Carnot-en errendimendua berreskuratzen da. Stirling-en motor erreal batean, benetako errendimendua beti izango da Carnot-en errendimendua baino baxuagoa.

Diesel zikloa: Diesel zikloa ere lau prozesuk osatzen dute [17]. Hasierako tenperatura T_1 dela suposatuz:

1. Konpresio adiabatikoa. Tenperatura T_1 -tik T_2 -ra igarotzen da.
2. Zabaltze isobaroa. Tenperatura T_2 -tik T_3 -ra igarotzen da. Prozesu honetan Q_B energia xurgatzen da bero moduan.
3. Zabaltze adiabatikoa. Tenperatura T_3 -tik T_4 -ra igarotzen da.
4. Deskonpresio isokoroa. Tenperatura T_4 -tik T_1 -ra itzultzen da. Prozesu honetan Q_H energia askatzen da bero moduan.



3.7. irudia: Gas idealarentzako Diesel zikloa irudikatuta (berdez) PV diagraman. Irudia 124-000 aplikazioarekin lortu da.

Bero-ahalmenak konstanteak direla suposatuz, Q_B eta Q_H kalkulatu daitezke:

$$Q_B = C_P(T_3 - T_2) \quad (3.32)$$

$$Q_H = C_V(T_4 - T_1) \quad (3.33)$$

Eta horiek erabiliz, errendimendua lortu daiteke:

$$\eta = 1 - \frac{1}{\gamma} \frac{T_4 - T_1}{T_3 - T_2} \quad (3.34)$$

3.2 Fermi-ren gas ideala

Fisika estatistikoarekin loturiko aplikazioak Fermi-ren gas idealaren inguruan eraiki dira. Fermi-ren gas ideala fermioiz osaturiko sistema sinpleena da. Eredu horretan, gas ideal klasikoan bezala, partikulen arteko elkarrekintzarik ez dagoela onartzen da. Fermi-ren gas ideala eta gas ideal klasikoaren arteko ezberdintasun garrantzitsuenak Pauli-ren eskusio-printzipioa da: bi fermioik ezin dute egoera kuantiko bera okupatu.

Fermi-ren gas idealaren bitartez, mekanika estatistikoarekin loturiko zenbait kontzeptu landu daitezke, eredu matematikoak asko konplikatu gabe. Gainera, oso erabilgarria da egoera solidoko hainbat sistema deskribatzeko (elektroiak metaletan, esate baterako).

3.2.1 Fermi-Dirac eta Bose-Einstein banaketak

Partikula identikoz osaturiko sistema bat aztertzerako orduan, kontuan izan behar da partikulak bereizezinak direla. Sistemako bi partikulen egoerak trukatzuz gero, ez dago modurik sisteman aldaketarik egon den edo ez jakiteko; egoera globala berbera da [19]. Mekanika kuantikoaren emaitza garrantzitsu bat da partikula guztiak bi multzotan sailkatu daitezkeela: bosoiak eta fermioiak. Euren arteko ezberdintasuna transformazio-propietateetan datza: bosoi-sistema baten uhin-funtzioa simetrikoa izan behar da edozein bi partikulen trukearekiko; fermioi-sistema baten uhin-funtzioa berriz, antisimetrikoa izan behar da. Horren ondorio zuzena da fermioiek Pauli-ren eskusio-printzipioa betetzen dutela, hots, bi fermioi ezin dira egoera kuantiko berean egon.

Printzipio horrek eragina izango du partikulen portaera estatistikoan. Partikula motaren arabera, hiru banaketa estatistiko agertuko dira fisika estatistikoan: Fermi-Dirac banaketa, Bose-Einstein banaketa eta Maxwell-Boltzmann banaketa. Lehenengoak fermioiz osaturiko sistemen estatistika deskribatzen du, bigarrenak bosoz osaturiko sistemen deskribatzen ditu, eta hirugarrena hurbilketa bat da, limite klasikoan baliagarria dena, bai bosoiarentzat, bai fermioientzat.

Banaketa horien jatorria uler daiteke multzo estatistiko makrokanonikoa erabiliz. Multzo hori egokia da tenperatura eta potentzial kimiko konstanteko sistema bat aztertzeke [20]. Sistemaren informazio termodinamiko guztia partizio-funtzio makrokanonikotik lortu daiteke:

$$\mathcal{Z}(\mu, T, V) = \sum_{N=0}^{\infty} \lambda^N Z_N(T, V) \quad (3.35)$$

Non λ iheskortasuna den:

$$\lambda = e^{\beta\mu} \quad (3.36)$$

eta Z_N partizio-funtzio kanonikoa den:

$$Z_N(T, V) = \sum_r e^{-\beta E_r} = \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta \sum_i n_i \epsilon_i} \quad (3.37)$$

Adierazpen horretan, E_r sistemaren energia-egoerak dira eta ϵ_i partikula indibidual baten energia-egoerak. n_i da ϵ_i egoeran dagoen partikula-kopurua eta $\{n_i\}$ -ren bidez kopuru horien multzoa adierazten da. Banaketak noski, honako itxitura-baldintza bete behar du:

$$\sum_i n_i = N \quad (3.38)$$

Frogatu daiteke, partizio-funtzio makrokanonikoa modu baliokide honetan idatzi daitekeela [20]:

$$\mathcal{Z}(\mu, T, V) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}} \prod_i (\lambda e^{-\beta \epsilon_i})^{n_i} = \prod_i \left[\sum_{n_i} (\lambda e^{-\beta \epsilon_i})^{n_i} \right] = \prod_i \mathcal{Z}_i \quad (3.39)$$

Forma horretan idatzita, biderkagai bakoitzak partikula indibidualen egoera bakoitzean egongo den partikula-kopuruaren inguruko informazioa dauka. Modu horretan, oso erraza da egoera bakoitzaren batez besteko partikula-kopurua edo “okupazioa” kalkulatzeko:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left[-\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \epsilon_i} \right) \right] = \frac{1}{\prod_i \mathcal{Z}_i} \left[-\frac{1}{\beta} \prod_{j \neq i} \mathcal{Z}_j \left(\frac{\partial \mathcal{Z}_i}{\partial \epsilon_i} \right) \right] = \frac{\sum_{n_i} n_i \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}}{\sum_{n_i} \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}} \quad (3.40)$$

Emaitza hau orokorra da, bai bosoientzat, eta bai fermioientzat. Partikulen izaerak, ordea, eragina izango du batukariaren mugetan. Fermioien kasuan, egoera bakoitzean partikula bakarra egon daiteke gehienez; beraz, batukarian $n_i = 0, 1$ kasuak kontsideratu behar dira soilik. Modu horretan lortutako banaketari **Fermi-Dirac banaketa** deritzo:

$$\langle n_i \rangle_{F.D.} = \frac{\sum_{n_i=0}^1 n_i \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}}{\sum_{n_i=0}^1 \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1} \quad (3.41)$$

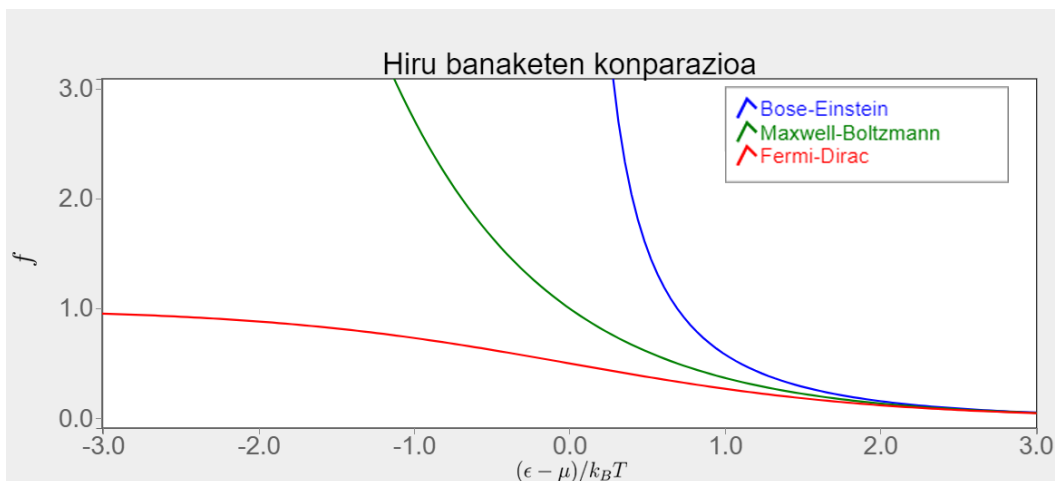
Bosoiak kasu berriz, ez dago mugarik egoera bakoitzean egon daitekeen partikula-kopuruari dagokionez; beraz, batukaria zerotik infinitura joango da. Modu horretan lortutako banaketari **Bose-Einstein banaketa** deritzo:

$$\langle n_i \rangle_{B.E.} = \frac{\sum_{n_i=0}^{\infty} n_i \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}}{\sum_{n_i=0}^{\infty} \lambda^{n_i} e^{-n_i \beta \epsilon_i}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} \quad (3.42)$$

Maxwell-Boltzmann banaketak berriz, ez du partikulen izaera kuantikoa (fermioiak ala bosoiak diren) kontutan hartzen; horren ordez, partikulak bereizgarritzat hartzen ditu eta bereizezintasunaren eragina *ad hoc* sartzen du egoerak zenbatzerakoan $1/N!$ faktore bat sartuz [20]. Modu horretan lortzen den emaitza honakoa da:

$$\langle n_i \rangle_{M.B.} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}} = e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \quad (3.43)$$

Hiru banaketa funtzioak konparatzeko 131-000 aplikazioa sortu da. Aplikazioak hiru banaketa estatistikoak irudikatzen ditu. Erabiltzaileak eskala eta jatorria aldatu ditzake nahi duen energia-tartea aztertzeko. 3.8 irudian ikus daitekeenez, $(\epsilon - \mu) \gg k_B T$ denean, hiru funtzioak baliokideak dira.



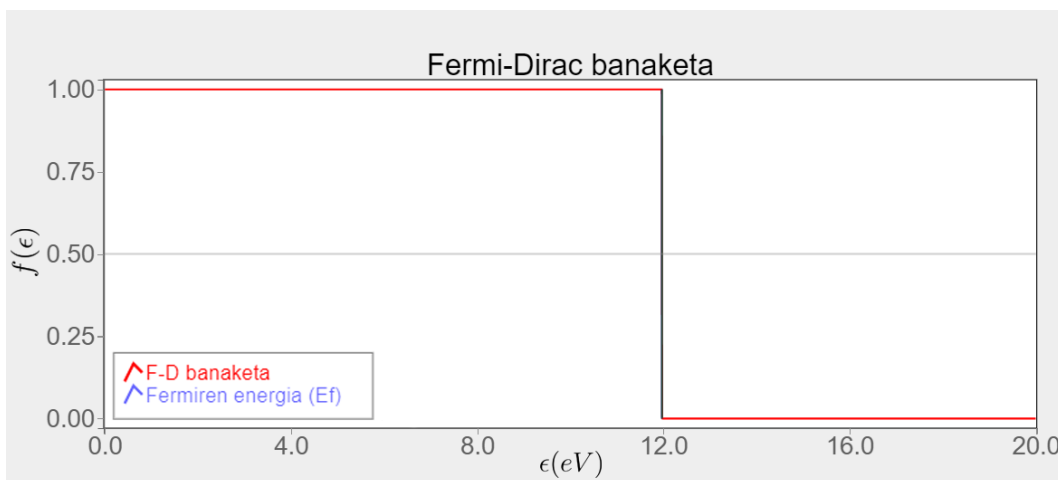
3.8. irudia: Hiru banaketa-funtzioen konparazioa. Urdinez, Bose-Einstein banaketa; berdez, Maxwell-Boltzmann banaketa eta gorritz, Fermi-Dirac banaketa. Irudia 131-000 aplikazioarekin lortu da.

3.2.2 Fermi-ren energia

Pauli-ren eskusio-printzipioaren beste ondorio bat Fermi-ren energiaren kontzeptua da. Fermi-ren energia (ϵ_F) deritzo sistema baten oinarritzko egoeran, hau da, $T = 0$ denean,

energia altuena duen partikularen energiari [20]. Pauli-ren printzipiorik ez balego, oinarrizko egoeran, partikula guztiak energia minimoko mailan kokatuko liritezke eta $\epsilon_F = 0$ litzateke (kasu horretan, ez luke zentzurik halako kontzepturik definitzeak). Hau ordea, ezinezkoa da, Pauli-ren printzipioa dela eta.

Fermioiz osaturiko sistema baten oinarrizko egoeran, maila guztiak banan-banan betetzen joango dira, energia txikiena duenetik gorantz, partikula guztiak kokatu arte. Azken partikula horren energia izango da Fermi-ren energia. Energia horretatik gorako maila guztiak hutsik egongo dira. Hau Fermi-Dirac banaketaren bidez ikus daiteke: $T = 0$ denean, Fermi-Dirac banaketa maila-funtzio bat bihurtzen da:



3.9. irudia: Fermi-Dirac banaketa-funtzioa aluminioaren kasurako ($\epsilon_F = 11.97eV$). $T = 0$ denean, $\epsilon < \epsilon_F$ maila guztiak beteta daude, eta hortik gorakoak, hutsik. Irudia 132-000 aplikazioarekin lortu da.

Metaletako elektroiak aztertzerakoan, sistemaren Fermi-ren energia metal bakoitzaren propietate intrintseko bat da. Fermi-ren energia kalkulatzeko sistemaren autobalioak (energiarentzako baimendutako balioak) jakin behar dira. Fermi-ren gas idealaren eremuan, elektroiak independenteak eta askeak direla onartzen da, beraz, partikula askearen Hamiltondarra erabiltzen da:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \quad (3.44)$$

Mugalde baldintzei dagokienez, ohikoa da Born-von Karman mugalde baldintza periodikoak erabiltzea⁴.

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z) \quad (3.45)$$

⁴Erabiltzen diren mugalde baldintzek metalaren gainazaleko efektuetan bakarrik dute eragina, eta oro har, arbuia daitezke.

Problema horren autobalioak honakoak dira [21]:

$$\epsilon(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar}{2m} k^2 = \frac{\hbar}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3.46)$$

Non, k_i balioak mugalde baldintzekin bateragarriak izan daitezzen,

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}, \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z} \quad (3.47)$$

N (partikula- kopurua) handia bada, $\epsilon < \epsilon_F$ betetzen duten egoera-kopurua proporzionala izango da k_F erradioko esfera baten bolumenarekiko k -espazioan⁵:

$$\mathcal{N}(\epsilon_F) = \frac{V}{8\pi^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{k_F^3}{6\pi^2} V, \quad k_F = \frac{\sqrt{2m\epsilon_F}}{\hbar} \quad (3.48)$$

Modu honetan, Fermi-ren energia eta elektroi-dentsitatea erlazionatu daitezke⁶:

$$N = 2 \frac{k_F^3}{6\pi^2} V \rightarrow n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (3.49)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} \quad (3.50)$$

Oinarritzko egoeraren barne-energia ere erraz kalkulatu daiteke. $\epsilon < \epsilon_F$ betetzen duten egoeren energiak batu beharko liratezke, baina N oso handia denean, integral baten bidez hurbildu daiteke batura hori [22]:

$$U_0 = 2 \sum_{\epsilon < \epsilon_F} \epsilon = \frac{V}{4\pi^3} \int_{k < k_F} d\vec{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} V \quad (3.51)$$

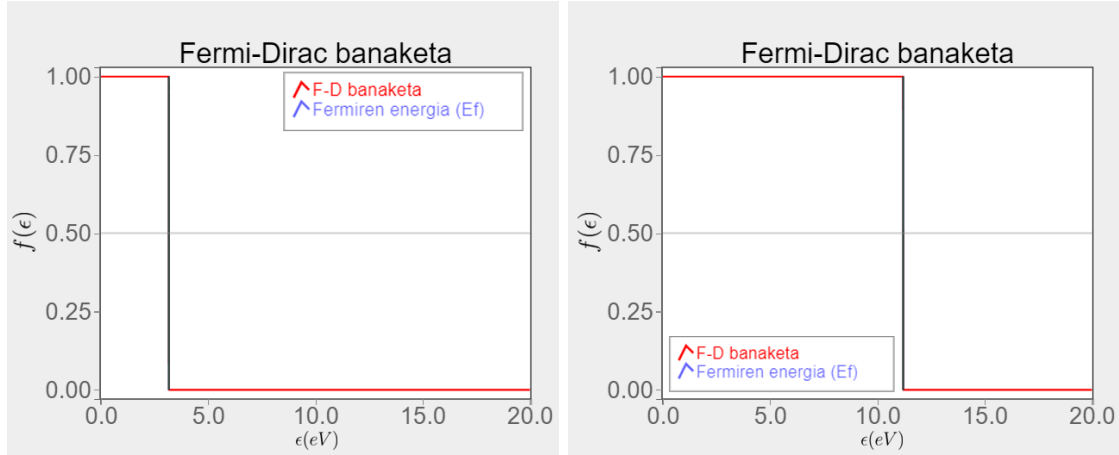
Eta 3.49 eta 3.51 konbinatuz,

$$\frac{U_0}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_F \quad (3.52)$$

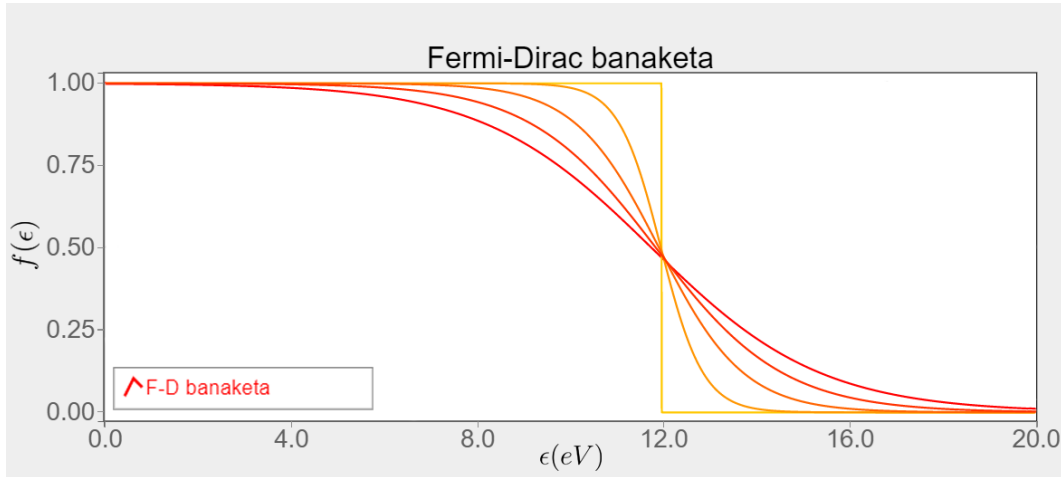
⁵ $\mathcal{N}(\epsilon_F)$ ikurra erabili da $\epsilon < \epsilon_F$ betetzen duten egoera-kopurua adierazteko. Orokorrean, 3.48 adierazpena baliagarria izango da edozein ϵ energia baino energia baxuagoko $\mathcal{N}(\epsilon)$ egoera-kopurua adierazteko.

⁶2 faktorea spin-ende kapenarengatik da; energia egoera bakoitzean bi elektroi egon daitezke, spin-singlete egoeran.

Fermi-ren banaketarekin loturiko kontzeptuak lantzeko 132-000 aplikazioa garatu da. Aplikazio horretan, erabiltzaileak lau metal aztertzeko aukera du: sodioa, aluminioa, burdina eta kobrea. Metal bakoitzarentzat, Fermi-ren energia eta Fermi-Dirac banaketa irudikatzen dira (horietako bi 3.10 irudian adierazita daude). Tenperatura igotzean, Fermi-Dirac banaketa nola aldatzen den ikus daiteke (ikus 3.11 irudia).



3.10. irudia: Fermi-Dirac banaketak $T = 0$ denean, bi metal ezberdinetarako: ezkerrean, sodioa ($\epsilon_F = 3.16\text{eV}$) eta eskuinean, burdina ($\epsilon_F = 11.20\text{eV}$). Bi kasutan, Fermi-Dirac banaketa maila-funtzio bat da: $f(\epsilon) = \Theta(\epsilon_F - \epsilon)$.



3.11. irudia: Aluminioarentzako Fermi-Dirac banaketa bost tenperatura ezberdinetarako. Horitik gorria: 0K, 5000K, 10000K, 15000K eta 20000K. Irudia 132-000 aplikazioarekin lotu da.

3.2.3 Egoera-dentsitatea

Aurreko ataleko U_0 -ren adierazpena (3.52) $T = 0$ egoerarentzat bakarrik da baliagarria; egoera horretan soilik egongo dira ϵ_F -rainoko maila guztiak beteak eta gainerakoak hutsik. Temperatura igo ahala $\epsilon < \epsilon_F$ mailak hustutzen joango dira gutxinaka eta $\epsilon > \epsilon_F$ mailak betetzen. Fenomeno hau Fermi-Dirac-en banaketan ikus daiteke: temperatura igo ahala, kurba maila-funtzio izatetik leuna izatera pasatzen da (3.11 irudian ikusten den bezala).

Fermi-Dirac banaketak ϵ energiadun egoera bat okupatuta egoteko probabilitatea ematen du. Batez besteko balioak kalkulatzeko, ordea, beste datu behar da: ϵ energia horretarako zenbat egoera baimendu dauden. Hori dela eta, oso erabilgarria da **egoera-dentsitatea** definitzea, hau da, ϵ eta $\epsilon + d\epsilon$ tartean dagoen egoera-kopurua.

$\mathcal{N}(\epsilon_F)$ -ren adierazpena (3.48) ϵ_F -rentzat lortu bada ere, beste edozein energiarentzako balio du. Orokorrean, $\epsilon' < \epsilon$ beteko duten ϵ' egoera-kopurua (bolumen-unitateko) honakoa da:

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{(2m\epsilon)^{\frac{3}{2}}}{6\pi^2\hbar^3} \quad (3.53)$$

Eta beraz, egoera-dentsitatea (spin-endekapena sartuz):

$$g(\epsilon) = 2 \frac{d\mathcal{N}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{m}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{2m\epsilon} \quad (3.54)$$

Ikus daitekeenez, egoera-dentsitatea materialaren independentea da. Horren arrazoia da elektroiei askeen ereduko Hamiltondarrean ez dela materialaren inguruko informaziorik sartzen.

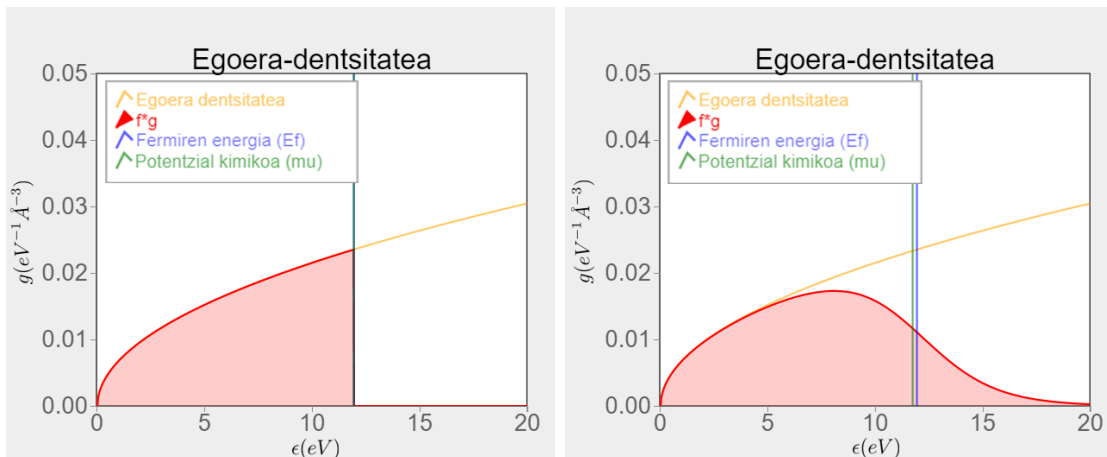
ϵ energia izango duen partikula-kopurua $f(\epsilon)g(\epsilon)$ biderkadurarekiko proportzionala izango da, $f(\epsilon)$ Fermi-Dirac banaketa izanik. Biderkadura hori erabiliz kalkulatu daitezke sistemaren batez besteko balioak⁷ [22]:

$$\langle u \rangle = \int_0^\infty f(\epsilon)g(\epsilon)\epsilon d\epsilon \quad (3.55)$$

$$\langle n \rangle = \int_0^\infty f(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon \quad (3.56)$$

⁷Bolumen-unitateko egoera-dentsitatea erabili denez, kalkulaturako energia eta partikula-kopurua ere bolumen-unitateko balioak dira. Kantitate estentsiboetatik bereizteko, letra xehez adierazi dira.

Egoera-dentsitatearen eragina hobeto ulertzen laguntzeko, 133-000 aplikazioa sortu da. Aplikazio horrek egoera-dentsitatea eta Fermi-Dirac banaketa irudikatzeaz gain, $f(\epsilon)g(\epsilon)$ biderkadura irudikatzen du. Erabiltzaileak tenperatura aukeratu dezake eta aplikazioak $f(\epsilon)g(\epsilon)$ funtzioa nola aldatzen den erakutsiko du. Funtzio horren azpiko azalera n adierazten duenez, tenperatura igo ahala, kurbaren azpiko azalera ez da aldatuko.



3.12. irudia: Elektroi askeen ereduko egoera-dentsitatea (laranjaz) eta $f(\epsilon)g(\epsilon)$ biderkadura (gorriz) aluminioarentzako, bi tenperatura ezberdinetarako: ezkerrean, $T = 0$ eta eskuinean, $T = 20000K$.

3.2.4 Potentzial kimikoa

Egoera-dentsitatea erabiliz, posible da potentzial kimikoa kalkulatzeko. Potentzial kimikoa, orokorrean, tenperaturaren menpekkoa da. Fermi-Dirac banaketan potentzial kimikoa agertzen denez, garrantzitsua azken horren tenperaturarekiko menpekotasuna ezagutzeko. $T = 0$ denean, potentzial kimikoa bat dator Fermi-ren energiarekin:

$$\mu(0) = \epsilon_F \quad (3.57)$$

Aurreko atalean ikusi bezala, Fermi-Dirac banaketa maila-funtzioa da, tenperatura horretan. Tenperatura igotzean, $f(\epsilon)$ leundu egingo da eta $f(\epsilon)g(\epsilon)$ funtzioa aldatu egingo da ϵ_F -ren inguruan. Metalaren elektroi-kopurua aldatzen ez denez, azalera konstante mantendu behar da tenperatura guztietarako, eta hori lortzeko modu bakarra, $f(\epsilon)$ -ren jatorria ezkerrean desplazatzeko da⁸, hau da, potentzial kimikoa tenperaturarekin jaitsi behar da.

⁸Hau grafikoki ikus daiteke 3.12 irudian: egoera-dentsitatea gorakorra denez, tenperatura igotzean, azalera eskuinetik “irabazten” duena handiagoa da ezkerretik “galtzen” duena baino. Hori konpentsatzeko, $f(\epsilon)$ -ren jatorria desplazatu behar da ezkerrean.

Matematikoki, potentzial kimikoaren tenperaturarekiko menpekotasuna lortu daiteke elektroi-dentsitatearen adierazpen integrala eta oinarrizko egoeraren adierazpena berdinduz:

$$n = \int_0^\infty f(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (3.58)$$

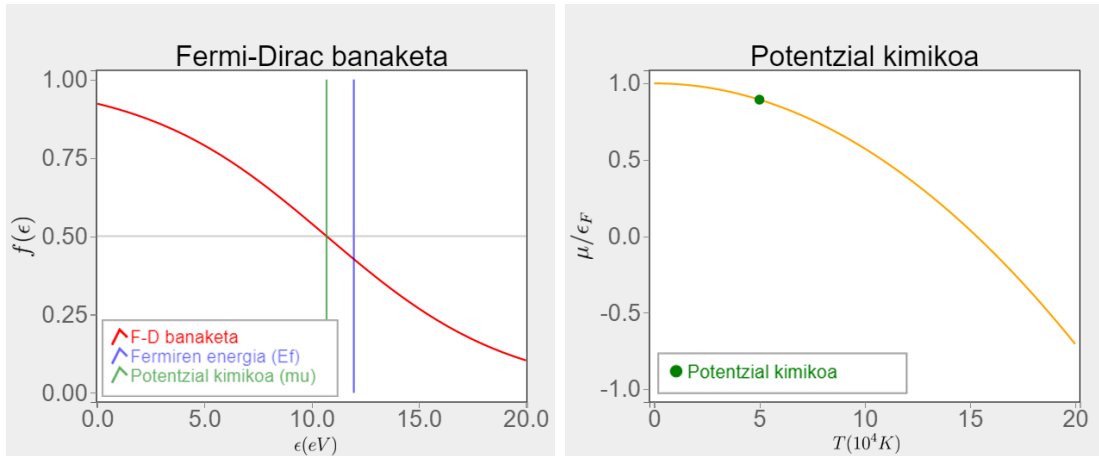
Adierazpen horretan, $f(\epsilon)$ eta $g(\epsilon)$ ordezkatzuz, $\mu(T)$ funtzioak bete beharreko baldintza lortzen da:

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu(T))} + 1} = \frac{2}{3}\epsilon_F^{\frac{3}{2}} \quad (3.59)$$

Azken ekuazioak $\mu(T)$ definitzen du. Hala ere, adierazpen horretatik ezin da $\mu(T)$ analitikoki askatu. Horren ordez, Sommerfeld-en garapena erabili daiteke honako hurbilketa lortzeko [22]:

$$\mu(T) \approx \epsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \right] \quad (3.60)$$

Sommerfeld-en garapena erabiliz, potentzial kimikoaren tenperaturarekiko menpekotasuna irudikatzen du 132-000 aplikazioak.



3.13. irudia: Ezkerrean, Fermi-Dirac banaketa, Fermi-ren energia eta potentzial kimikoa aluminioarentzat $T = 50000K$ denean. Eskuinean, potentzial kimikoaren tenperaturarekiko menpekotasuna (ϵ_F -ren unitateetan). Marka berdeak aldiuneko tenperatura adierazten du. Irudiak 132-000 aplikazioarekin lortu dira.

3.2.5 Energia eta bero-ahalmena

Fermi-ren gas idealaren ereduarekin egin daitekeen beste predikzio bat metalen bero-ahalmenaren tenperaturarekiko menpekotasuna da. Bolumen konstanteko bero-ahalmena modu honetan definitzen da:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \quad (3.61)$$

Energiarentzako lortutako 3.55 adierazpena erabiliz:

$$C_V = \int_0^\infty \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial T} g(\epsilon) \epsilon d\epsilon \quad (3.62)$$

Potentzial kimikoarekin gertatzen den bezala, orokorrean integral hau ez da analitikoa izango. Tenperatura txikia bada ordea, integralaren balio hurbildu bat lor daiteke [21]. 3.56 erabiliz, honela berriatzi daiteke energia:

$$U = \int_{\epsilon_F}^\infty f(\epsilon) g(\epsilon) (\epsilon - \epsilon_F) d\epsilon + \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) [1 - f(\epsilon)] (\epsilon_F - \epsilon) d\epsilon + U_0 \quad (3.63)$$

Adierazpen horretan, tenperaturaren funtzioa den gai bakarra $f(\epsilon)$ da, beraz, 3.62 berriatzi daiteke:

$$C_V = \int_0^\infty \frac{df}{dT} g(\epsilon) (\epsilon - \epsilon_F) d\epsilon \quad (3.64)$$

Integral hori ebazteko gakoa $\frac{df}{dT} g(\epsilon)$ -ren forma da: tenperatura txikietan $\epsilon = \epsilon_F$ inguruan bakarrik izango da ez-nulua. Hori dela eta, bi hurbilketa egin daitezke. Lehenengoa, $g(\epsilon)$ kontsideratu beharrian, ϵ_F -n ebaluatu daiteke eta integraletik kanpora atara. Bigarrena, $f(\epsilon)$ -en adierazpenean $\mu(T)$ erabili beharrian $\mu(0) = \epsilon_F$ erabiltzea da. Hurbilketa hori justifikatua dago, $T = 0$ inguruan potentzial kimikoaren portaera konstantea delako (ez dago Tenperaturaren gai linealik 3.60 adierazpenean).

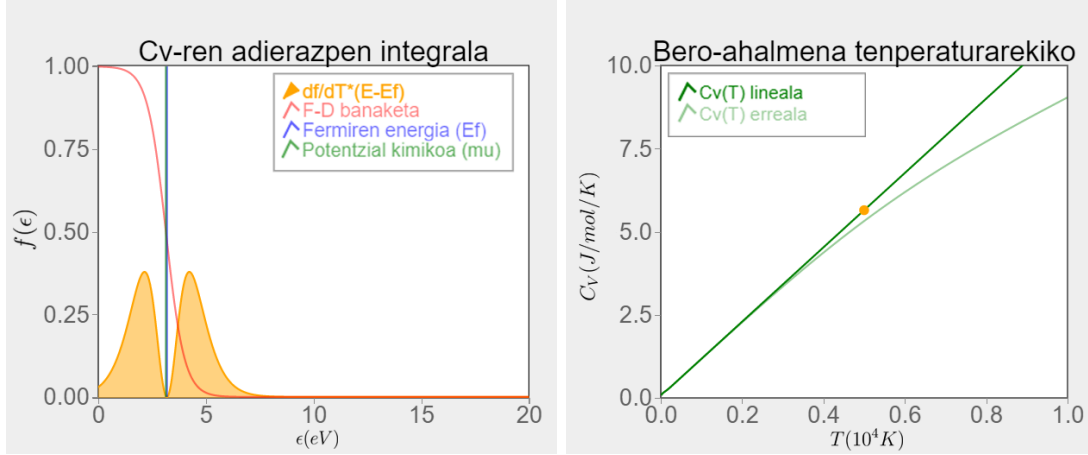
Aipaturiko bi hurbilketak aplikatu eta integrala ebaluatuz, honako emaitza lortzen da:

$$c_V \approx \frac{1}{2} \pi^2 \frac{k_B^2}{\epsilon_F} T \quad (3.65)$$

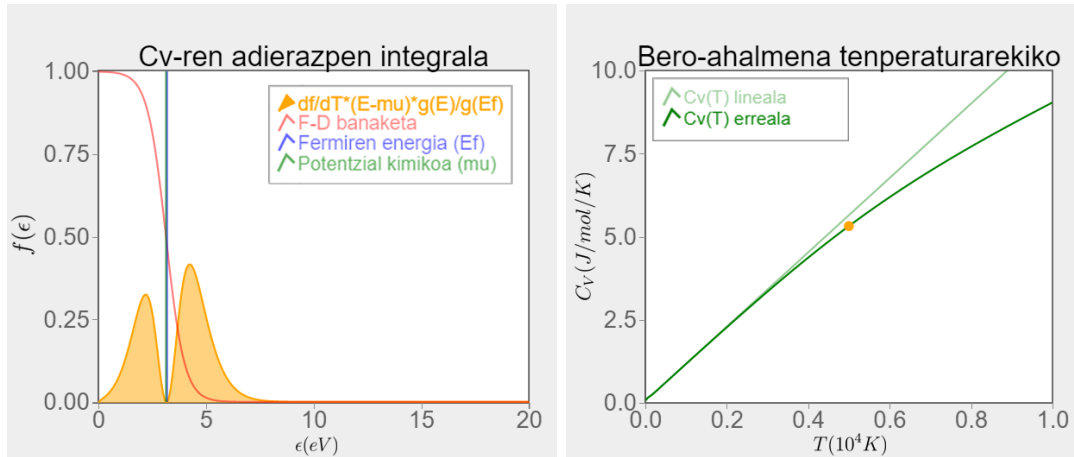
Beraz, tenperatura baxuetan c_V -k tenperaturarekiko portaera lineala du⁹.

⁹Kalkulu honetan ez da kontuan hartu sarearen kontribuzioa.

Tenperatura baxuetarako portaera hori irudikatzeko 134-000 aplikazioa garatu da. Aplikazio horretan, erabiltzaileak tenperatura manipulatu dezake, eta aplikazioak $\frac{df}{dT}g(\epsilon)(\epsilon - \epsilon_F)$ integrakizuna eta $\mu(T)$ funtzioa irudikatuko ditu. Erabiltzaileak aukera du hurbilketa lineala aplikatzeko (3.14 irudia), edo oster, integrakizunaren adierazpen zehatza erabiltzeko (3.15 irudia). Kasu bakoitzean, potentzial kimikoaren kurba nola aldatzen ikus daiteke.



3.14. irudia: Ezkerrean, C_V lortzeko integratu beharreko funtzioa (laranjaz), hurbilketa lineala onartuz. Irudikatzeko, $g(\epsilon_F)$ -ekin zatitu da (unitateak eV/K dira). Eskuinean, $c_V(T)$ grafikoa, hurbilketa linealean. Irudiak 134-000 aplikazioarekin lortu dira.



3.15. irudia: Ezkerrean, C_V lortzeko integratu beharreko funtzioa (laranjaz), hurbilketa linealik gabe. Irudikatzeko, $g(\epsilon_F)$ -ekin zatitu da (unitateak eV/K dira). Eskubian, $c_V(T)$ grafikoa, hurbilketa linealik gabe. Irudiak 134-000 aplikazioarekin lortu dira.

4. kapitulua

Ondorioak

Lan honetan MinervaLab proiektuaren 2.0 bertsioa aurkeztu da. Bertsio horretan 8 aplikazio berri garatu dira. Lehenengo bertsioak zituen 13 aplikazioak gehituta, guztira 21 aplikazio barnebiltzen ditu MinervaLab proiektuak txosten hau idazterako unean.

Bigarren bertsioari markatutako helburua aplikazioen erabilgarritasun-eremua zabaltzea izan da. Helburu hori bete dela esan daiteke, izan ere, lehen lauhilekoan (Termodinamikaren zatian) lantzen diren kontzeptu gehienentzat garatu dira aplikazioak: zero printzipioa, gas ideala, egoera-ekuazioa, bigarren printzipioa... Lehendik garatuta zeuden Van der Waals-en egoera-ekuazioaren eta fase-trantsizioen inguruko aplikazioak kontuan hartzen baditugu, Termodinamikaren zatia bere osotasunean landu dela esan daiteke.

Bigarren lauhilekoari dagokionez (Fisika Estatistikoaren zatia), oraindik badago lan gehiago egiteke. 2.0 bertsioan lehen aldiz inplementatu dira Fisika Estatistikoa lantzeko aplikazioak, baina aplikazio horiek gai konkretu bat lantzen dute soilik: Fermi-ren gas ideala. Hurrengo bertsioetan lantzeko proposamenak izan daitezke, esate baterako: bi mailako sistemen estatistika, Bose-Einstein kondentsazioa, Ising-en eredua...

Hautatutako tresnen inguruko balorazioa ere positiboa da, izan ere, lana asko erraztu da tresna horiei esker. GitHub, Jupyter, Binder eta Read the Docs plataformen arteko integrazioa egokia izan da. GitHubeko dokumentuak eguneratzen ziren bakoitzean, Binder-eko *notebook* exekutagarriak eta Read the Docs-eko dokumentazioak (HTML formatuan konpilatuta) automatikoki eguneratzen ziren. Horri esker, proiektuaren elementu guztiak beti egunean izatea bermatu da.

Azkenik, proiektuaren erabilgarritasunaren inguruko iruzkin bat partekatu nahi da. Lan honetan, zenbait eduki teoriko azaltzeko apunteak prestatu dira aplikazioekin lortutako irudiak erabiliz. PDF formatuaren ezaugarriengatik, apunte horiek ez dira interaktiboak, noski. Aplikazioak erabiltzeko beste modu bat izan liteke zuzenean interaktiboak diren apunteak prestatzea, *notebook*-etan aplikazioen kodea eta azalpenak konbinatuz.

Beste aukera bat izan daiteke aplikazioen bidez ebazteko ariketak proposatzea, edota eskuz lortutako emaitzak egiaztatzeko aplikazioak erabiltzea. Hainbat eta hainbat aukera existitzen dira, eta garatutako proiektua librea denez, irakasle zein ikasleek bere beharretara egokitu dezakete sortutako material guztia. Guzti honengatik, irakaskuntza-proiektu alternatibo bat garatzerako orduan, tresna hau erabilgarria izan daiteke.

Bibliografia

- [1] S. Freeman, S. L. Eddy, M. McDonough, M. K. Smith, N. Okoroafor, H. Jordt, eta M. P. Wenderoth, “Active learning increases student performance in science, engineering, and mathematics,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 111. bol., 23. zb., 8410–8415. orr., 2014. [Online]. Eskuragarri: <https://www.pnas.org/content/111/23/8410>
- [2] L. Deslauriers, E. Schelew, eta C. Wieman, “Improved learning in a large-enrollment physics class,” *Science*, 332. bol., 6031. zb., 862–864. orr., 2011. [Online]. Eskuragarri: <https://science.sciencemag.org/content/332/6031/862>
- [3] T. Fredlund, J. Airey, eta C. Linder, “Exploring the role of physics representations: an illustrative example from students sharing knowledge about refraction,” *European Journal of Physics*, 33. bol., 3. zb., 657–666. orr., mar 2012. [Online]. Eskuragarri: <https://doi.org/10.1088/0143-0807/33/3/657>
- [4] J. Gabirondo-López eta J. M. Igartua, “jongablop/minervalab: First version of minervalab,” Jun. 2020. [Online]. Eskuragarri: <https://doi.org/10.5281/zenodo.3893455>
- [5] J. Gabirondo López, “Minervalab: Jupyter notebook-etan oinarritutako irakaskuntza-proiektu alternatiboa,” 2020. [Online]. Eskuragarri: <https://addi.ehu.es/handle/10810/49094>
- [6] B. Smith, “A quick guide to gplv3,” *Free Software Foundation, Inc*, 4. bol., 2007. [Online]. Eskuragarri: <http://www.gnu.org/licenses/quick-guide-gplv3.html>
- [7] *The Jupyter Notebook*, Jupyter Team. [Online]. Eskuragarri: <https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/notebook.html>
- [8] T. Kluyver, B. Ragan-Kelley, F. Pérez, B. E. Granger, M. Bussonnier, J. Frederic, K. Kelley, J. B. Hamrick, J. Grout, S. Corlay *et al.*, *Jupyter Notebooks-a publishing format for reproducible computational workflows.*, 2016, 2016. bol.

- [9] S. Van Der Walt, S. C. Colbert, eta G. Varoquaux, “The numpy array: a structure for efficient numerical computation,” *Computing in science & engineering*, 13. bol., 2. zb., 22–30. orr., 2011. [Online]. Eskuragarri: <https://arxiv.org/pdf/1102.1523>
- [10] *ipywidgets*, Project Jupyter. [Online]. Eskuragarri: <https://ipywidgets.readthedocs.io/en/stable/index.html>
- [11] S. Chacon eta B. Straub, *Pro git*. Springer Nature, 2014. [Online]. Eskuragarri: <https://git-scm.com/book/en/v2>
- [12] P. Govekar eta S. Budhkar, “Review on version control with git,” 4. bol., 2018.
- [13] J. Gabirondo-López. Minervalab proiektuaren github-eko biltegia. [Online]. Eskuragarri: <https://github.com/jongablop/MinervaLab>
- [14] I. Gonzalez. Minervalab bigarren bertsioaren github-eko biltegia. [Online]. Eskuragarri: <https://github.com/Ikergym/MinervaLab>
- [15] “Read the docs: Documentation simplified,” Read the Docs, Inc & contributors, 2010. [Online]. Eskuragarri: <https://docs.readthedocs.io/en/stable/index.html>
- [16] I. Gonzalez. Minervalab bigarren bertsioaren dokumentazioa. [Online]. Eskuragarri: <https://minervalab-v20.readthedocs.io/en/latest/index.html>
- [17] M. W. Zemansky eta R. H. Dittman, *Heat and thermodynamics: an intermediate textbook; 7th ed.* McGraw-Hill, 1997.
- [18] J. Christians, “Approach for teaching polytropic processes based on the energy transfer ratio,” *International Journal of Mechanical Engineering Education*, 40. bol., 1. zb., 53–65. orr., 2012.
- [19] J. J. Sakurai, *Modern quantum mechanics, revised edition*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1994.
- [20] R. K. Pathria eta P. D. Beale, *Statistical Mechanics 3rd ed.* Butterworth-Heinemann publications, 2011.
- [21] C. Kittel eta H. Kroemer, *Thermal physics*. W. H. Freeman and Company, 1980.
- [22] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin *et al.*, *Solid state physics*. Harcourt College Publishers, 1976.