ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΙΣ ΜΗ ΜΕΛΟΥΣ

ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ.— Παρατηρήσεις τινὲς ἐπὶ τῆς ἐξισώσεως τοῦ Bloch, ὑπὸ ***Ἀστερίου Δ. Γιαννούση****. Ἀνεκοινώθη ὑπὸ τοῦ Ἀκαδημαϊκοῦ κ. Καίσ. Ἀλεξοπούλου.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Ὡς γνωστόν [1], ὅλαι αἱ θερμοδυναμικαὶ ἰδιότητες ἑνὸς συστήματος δύνανται νὰ προσδιορισθοῦν ἐκ τῆς συναρτήσεως

$$Z(\beta) = \mathrm{Spur}\,(e^{-\beta H}) \tag{1}$$

ἔνθα H παριστᾷ τὸν ἐκτελεστὴν τοῦ Hamilton $\beta = 1/KT$, K τὴν σταθερὰν τοῦ Boltzmann καὶ T τὴν ἀπόλυτον θερμοκρασίαν.

Ἡ συνάρτησις $Z(\beta)$ εἰς ἀναλογίαν μὲ τὴν κλασσικὴν θεωρίαν ὀνομάζεται (κανονικὴ) συνάρτησις κατανομῆς ὁλοκλήρου τοῦ συστήματος. Ἡ συνάρτησις αὕτη ὀνομάζεται καὶ «ἄθροισμα καταστάσεων» (Zustandssumme) καὶ δύναται νὰ ὑπολογισθῇ ἀμέσως, ὅταν γνωρίζωμεν τὴν «μήτραν πυκνότητος» (Dichtematrix).

$$\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta) = \sum_j \Psi_j^*(\mathbf{r}') e^{-\beta H} \Psi_j(\mathbf{r}) \tag{2}$$

χωρὶς νὰ γνωρίζωμεν τὰς ἰδιοτιμὰς τοῦ ἐκτελεστοῦ H τοῦ Hamilton, ἤτοι:

$$Z(\beta) = \sum_j e^{-\beta E_j} = \int \Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta)\, d\tau \tag{3}$$

Αἱ συναρτήσεις $\Psi_j(\mathbf{r})$ καὶ E_j εἶναι αἱ ἰδιοσυναρτήσεις καὶ αἱ ἰδιοτιμαὶ τοῦ ἐκτελεστοῦ τοῦ Hamilton, αἱ ὁποῖαι ἐπαληθεύουν τὴν ἐξίσωσιν

$$H\Psi_j(\mathbf{r}) = E_j \Psi_j(\mathbf{r}) \tag{4}$$

Ὅπως ἀπέδειξεν ὁ Bloch [2], ἡ συνάρτησις $\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta)$ πληροῖ τὴν κάτωθι ἐξίσωσιν:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \beta} + H\Psi = 0 \tag{5}$$

ἥτις φέρει καὶ τὸ ὄνομά του καὶ ἡ ὁποία δύναται ἀμέσως νὰ παραχθῇ ἀπὸ τὴν (2) διὰ παραγωγήσεως ὡς πρὸς β.

---

* ASTERIOS D. JANNUSSIS, Some Remarks on the Bloch Equation.

Ἐπὶ πλέον ἰσχύει καὶ ἡ ἀρχικὴ συνθήκη

(6) $$\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}, 0) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$$

ἡ ὁποία προκύπτει εὐκόλως ἀπὸ τὴν (2).

Ἡ ἐξίσωσις τοῦ Bloch (5) δὲν εἶναι παρὰ μία ἐξίσωσις τύπου Schroedinger ἐξαρτωμένη ἀπὸ τὸν χρόνον, μὲ τὴν διαφοράν, ὅτι, ἀντὶ τῆς μεταβλητῆς $i h/2\pi t$, εἰσάγεται ἡ μεταβλητὴ $\beta = 1/KT$.

Ἡ λύσις τῆς ἐξισώσεως τοῦ Bloch ἀπησχόλησεν ἰδιαιτέρως πολλοὺς μαθηματικοὺς καὶ φυσικοὺς μέχρι σήμερον καὶ τὸ ἀποτέλεσμα ὑπῆρξε νὰ ἀναπτυχθοῦν διάφοροι μέθοδοι λύσεων, ἐκ τῶν ὁποίων αἱ κυριώτεραι, ἀναπτυσσόμεναι ἐκτενῶς εἰς τὸ βιβλίον τοῦ Münster [1], εἶναι αἱ κάτωθι:

α) Συλλογικὴ ἀνάπτυξις (Cluster - Entwicklung).

β) Ἀνάπτυξις ὑψηλῶν θερμοκρασιῶν.

γ) Ἀνάπτυξις χαμηλῶν θερμοκρασιῶν.

Ἡ μέθοδος τῆς συλλογικῆς ἀναπτύξεως ἀνεπτύχθη τελευταίως ἀπὸ τοὺς Montroll - Ward [3] τῇ βοηθείᾳ τῆς συναρτήσεως τοῦ Green.

Εἰς ἣν περίπτωσιν ὁ ἐκτελεστὴς τοῦ Hamilton $H = H_0 + H_1$ εἶναι «χερμιτικὸς» καὶ ὁ ἐκτελεστὴς H_1 δύναται νὰ θεωρηθῇ ὡς διαταραχή, τότε ὑπάρχει μία κατάλληλος ἀνάπτυξις τῆς συναρτήσεως $\Psi(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, \beta)$ τῆς μορφῆς:

$$\Psi(\mathbf{r}_0,\mathbf{r},\beta) = G(\mathbf{r}_0,\mathbf{r},\beta) - \int_0^{\beta}\int d\beta' d\tau' G(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}',\beta-\beta')H_1(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}',\mathbf{r},\beta')$$

(7) $$+ \int_0^{\beta}\int_0^{\beta'}\int\int d\beta' d\beta'' d\tau' d\tau'' G(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}',\beta-\beta')H_1(\mathbf{r}')$$

$$\times G(\mathbf{r}',\mathbf{r}'',\beta'-\beta'')H_1(\mathbf{r}'')G(\mathbf{r}'',\mathbf{r},\beta'') \ldots .$$

ἔνθα $G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \beta_2 - \beta_1)$ παριστᾷ τὴν συνάρτησιν τοῦ Green, ἡ ὁποία πληροῖ τὴν κάτωθι ἐξίσωσιν:

(8) $$\left(\frac{\partial}{\partial\beta_2} + H_0(\mathbf{r}_2)\right) G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \beta_2 - \beta_1) = \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\delta(\beta_2 - \beta_1)$$

Ἀφ᾽ ἧς στιγμῆς γνωρίζομεν τὴν συνάρτησιν τοῦ Green τὸ πρόβλημα ἔχει κατὰ βάσιν λυθῆ, ἀπομένει ὅμως νὰ ἐξετασθῇ ἡ σύγκλισις τῆς σειρᾶς (7) διὰ τὴν ὁποίαν ἤδη ὑπάρχουν πολλὰ κριτήρια (ἴδε Münster [1]).

Ἡ μέθοδος ἀναπτύξεως εἰς ὑψηλὰς θερμοκρασίας συνίσταται κυρίως εἰς ἀνάπτυξιν σειρᾶς μὲ δυνάμεις τοῦ h, ἔνθα ὁ πρῶτος ὅρος τῆς σειρᾶς δίδει τὴν ἡμικλασσικὴν ἔκφρασιν. Ἡ μέθοδος αὕτη ἀνεπτύχθη ἐν πρώτοις ἀπὸ τοὺς Wigner [4] καὶ Kirkwood [5] καὶ τελευταίως ἀπὸ τοὺς Goldberger καὶ Adams [6].

Τέλος ὑπάρχει καὶ ἡ μέθοδος ἀναπτύξεως εἰς χαμηλὰς θερμοκρασίας, τῆς ὁποίας ἡ μὲν ἀνάπτυξις εἰς σειρὰν γίνεται εἰς δυνάμεις μιᾶς παραμέτρου συζεύξεως, ὁ δὲ πρῶτος ὅρος δίδει τὴν συνάρτησιν κατανομῆς ἄνευ ἀλληλεπιδράσεως. Ἡ μέθοδος αὕτη ἀνεπτύχθη ἀπὸ τοὺς Goldberger - Adams [6]. Ἐπίσης ὁ Green [7] διὰ μιᾶς ἄλλης μεθόδου ἔλαβεν ἰσοδύναμον ἀνάπτυξιν.

Ἐνταῦθα θὰ ἀναπτύξωμεν μίαν ἄλλην μέθοδον, ἡ ὁποία συνίσταται εἰς τὴν ἀπ' εὐθείας ἀνάπτυξιν τῆς λύσεως εἰς σειρὰν δυνάμεων τῆς μεταβλητῆς $\beta = 1/KT$, μέθοδον ἰσχύουσαν δι' ὑψηλὰς θερμοκρασίας.

Ἤδη ἡ λύσις δι' ἐλεύθερα σωματίδια ὁδηγεῖ εἰς μὴ ἀναλυτικὰς συναρτήσεις τοῦ β, ἀλλὰ παρὰ ταῦτα θὰ ἴδωμεν, ὅτι εἶναι δυνατὴ μία τοιαύτη λύσις.

2. ΛΥΣΙΣ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΕΩΣ ΤΟΥ BLOCH ΔΙΑ ΤΗΝ ΠΕΡΙΠΤΩΣΙΝ ΤΗΣ ΜΙΑΣ ΔΙΑΣΤΑΣΕΩΣ

Ἡ ἐξίσωσις τοῦ Bloch διὰ τὴν περίπτωσιν τῆς μιᾶς διαστάσεως λαμβάνει τὴν κάτωθι μορφήν:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \beta} = \frac{h^2}{8m\pi^2} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V(x)\Psi \tag{9}$$

ἔνθα $V(x)$ εἶναι ἡ δυναμικὴ συνάρτησις μὴ ἐπιδεχομένη ἀνωμαλίας, m ἡ μᾶζα τοῦ σωματιδίου καὶ h ἡ σταθερὰ τοῦ Planck. Ἐὰν χρησιμοποιήσωμεν ἀτομικὰς μονάδας $2m = 1$, $\frac{h}{2\pi} = 1$ καὶ θέσωμεν $V(x) = -U(x)$, ἡ ἐξίσωσις (9) γράφεται:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \beta} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi \tag{10}$$

μὲ τὴν ἀρχικὴν συνθήκην

$$\lim_{\beta = 0} \Psi(x,\beta) = \Psi_0(x) \tag{11}$$

ἔνθα $\Psi_0(x)$ εἶναι μία τυχοῦσα κατανομή.

Ἔστω, ὅτι ἡ λύσις τῆς ἐξισώσεως (10) δύναται νὰ ἀναπτυχθῇ εἰς σειρὰν τῆς μορφῆς:

$$\Psi(x, \beta) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \Psi_\nu(x)\beta^\nu \tag{12}$$

ὁπότε αἱ συναρτήσεις $\Psi_\nu(x)$ θὰ ἐπαληθεύουν τὸ κάτωθι διαφορικὸν σύστημα

$$(\nu + 1)\Psi_{\nu+1} = \frac{\partial^2 \Psi_\nu}{\partial x^2} + U(x)\Psi_\nu \tag{13}$$

Διὰ $\nu = -1$ εἶναι ἐν γένει $\Psi_0(x) \neq 0$.

Ἡ λύσις τοῦ συστήματος (13) ἐπιτυγχάνεται τώρα εὐκόλως, καθόσον λαμβάνεται διὰ διαδοχικῶν παραγωγήσεων: ἤτοι διὰ $\nu = 0$ ἔχομεν

$$\Psi_1 = \Psi'_0 + U(x)\Psi_0 \tag{14}$$

Διὰ $\nu=1$ εἶναι

$$2\Psi_2=\Psi_1''+U(x)\Psi_1$$

ἢ

$$(15)\qquad \Psi_2=\frac{1}{2!}\left[\Psi_0^{(4)}+U''\Psi_0+2U'\Psi'_0+2U\Psi_0''+U^2\Psi_0\right]$$

Διὰ $\nu=2$ εἶναι

$$3\Psi_3=\Psi_2''+U(x)\Psi_2$$

καὶ δι᾽ ἀντικαταστάσεως τῆς συναρτήσεως Ψ_2 ἐκ τῆς σχέσεως (15) λαμβάνομεν

$$(16)\qquad \begin{aligned}\Psi_3=\frac{1}{3!}\Big[&\Psi_0^{(6)}+3U\Psi_0^{(4)}+6U'\Psi_0^{(3)}+(7U''+3U^2)\Psi_0''\\&+(4U^{(3)}+6UU')\Psi'_0+(U^{(4)}+2U'^2+3UU''+U^3)\Psi_0\Big]\end{aligned}$$

Ἐκτελοῦντες τὴν αὐτὴν ἐργασία διὰ $\nu=3,4,5,\ldots$ ὑπολογίζομεν κατὰ τὸν αὐτὸν τρόπον τὰς συναρτήσεις Ψ_4, Ψ_5, ..., ὁπότε ἐπιτυγχάνομεν τὴν λύσιν τοῦ συστήματος (13).

Ἡ λύσις λοιπὸν τῆς ἐξισώσεως τοῦ Bloch (10) θὰ ἔχῃ τώρα τὴν κάτωθι μορφήν:

$$(17)\qquad \begin{aligned}\Psi(x,\beta)=\Psi_0&+\frac{\beta}{1!}\left(\Psi_0''+U\Psi_0\right)+\frac{\beta^2}{2!}\left[\Psi_0^{(4)}+2U\Psi_0''+2U'\Psi'_0+(U''+U^2)\Psi_0\right]\\&\frac{\beta^3}{3!}\Big[\Psi_0^{(6)}+3U\Psi_0^{(4)}+6U'\Psi_0^{(3)}+(7U''+3U^2)\Psi_0''\\&+(4U^{(3)}+6UU')\Psi'_0+(U^{(4)}+2U'^2+3UU''+U^3)\Psi_0\Big]+\ldots\end{aligned}$$

Εἰς τὴν λύσιν (17) ἐμφανίζονται αἱ κάτωθι σειραὶ

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{\beta^\nu}{\nu!}\Psi_0^{(2\nu)}(x)\ ,\qquad \sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\beta^\nu U^\nu}{\nu!}$$

καθὼς καὶ διάφοροι ὅροι, οἱ ὁποῖοι ἐξαρτῶνται ἀπὸ τὰς συναρτήσεις Ψ_0, U καὶ τὰς παραγώγους αὐτῶν.

Ἐπὶ πλέον εἶναι γνωστόν, ὅτι ἰσχύει ὁ κάτωθι τύπος [8]

$$(18)\qquad \sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{\beta^\nu}{\nu!}\Psi_0^{(2\nu)}(x)=\frac{1}{2\sqrt{\pi\beta}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_0(x')\,e^{-\frac{(x-x')^2}{4\beta}}\,dx'$$

μὲ τὸν ἤδη γνωστὸν περιορισμόν, τὸν ὁποῖον θὰ πρέπῃ νὰ πληροῖ ἡ συνάρτησις $\Psi_0(x)$ [9].

Ἡ γενικὴ λύσις τῆς ἐξισώσεως (10) εἶναι ἡ κάτωθι:

$$\Psi(x,\beta) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x')\, e^{-\frac{(x-x')^2}{4\beta}} dx' + (e^{\beta U} - 1)\Psi_0(x) \tag{19}$$

$$+ \beta^2 F(U, \Psi_0, U', \Psi'_0, \ldots, \beta)$$

Ἡ ἀνωτέρω λύσις διὰ $U = 0$ δίδει τὴν γνωστὴν λύσιν τοῦ ἐλευθέρου σωματιδίου. Ἡ συνάρτησις

$$\frac{e^{-\frac{(x-x')^2}{4\beta}}}{2\sqrt{\pi\beta}} \tag{20}$$

εἶναι ἀκριβῶς ἡ συνάρτησις τοῦ Green δι' ἐλεύθερον σωματίδιον.

Τὸ δὲ ὁλοκλήρωμα εἰς τὴν (19) εἶναι ἡ γνωστὴ λύσις τοῦ Fourier τῆς ἐξισώσεως τῆς θερμότητος.

Ἡ λύσις (19) πληροῖ τὴν ἀρχικὴν συνθήκην (11), δηλ. διὰ $\beta = 0$ εἶναι $\Psi(x,0) = \Psi_0(x)$, καθόσον ἡ συνάρτησις (20) τοῦ Green διὰ β τεῖνον πρὸς τὸ μηδὲν βαίνει πρὸς τὴν συνάρτησιν τοῦ Dirac. Ἑπομένως θὰ ἔχωμεν

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x')\,\delta(x - x')\,dx' = \Psi_0(x) \tag{21}$$

Ἡ εὑρεθεῖσα λύσις (19) δύναται νὰ χρησιμοποιηθῇ εἰς διάφορα φυσικὰ προβλήματα, ἔνθα ὑπεισέρχεται ἡ θερμοκρασία, καὶ ἰδιαιτέρως διὰ μεγάλας θερμοκρασίας.

Ἡ λύσις τῆς ἐξισώσεως τοῦ Bloch (5) ἐπιτυγχάνεται ὑπὸ κλειστὴν μορφὴν μόνον δι' ὡρισμένας μορφὰς τῆς δυναμικῆς συναρτήσεως. Ἡ περίπτωσις τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτοῦ ἔχει μελετηθῇ ὑπὸ τοῦ Davies [10] καὶ ἡ περίπτωσις τοῦ ἐλευθέρου σωματιδίου ἐντὸς ὁμογενοῦς ἐξωτερικοῦ πεδίου ὑπὸ τῶν Sondheimer - Wilson [11].

Ἡ περίπτωσις τῆς κινήσεως τοῦ ἐλευθέρου ἠλεκτρονίου ὑπὸ τὴν ἐπίδρασιν ὁμογενῶν ἐξωτερικῶν πεδίων, δηλ. ἠλεκτρικοῦ καὶ μαγνητικοῦ, ἐμελετήθη ὑπὸ τοῦ συγγραφέως [12]. Ἐπίσης καὶ ἡ περίπτωσις τοῦ πλεγματικοῦ ἠλεκτρονίου ἐντὸς ὁμογενοῦς μαγνητικοῦ πεδίου ἐμελετήθη ὑπὸ τοῦ συγγραφέως [13] μὲ τὴν μέθοδον τῆς Cluster - Entwicklung, ἔνθα προσδιωρίσθη ἡ συνάρτησις Z(β) καὶ εὑρέθη ἡ σταθερὰ διαμαγνητικὴ ἐπιδεκτικότης.

Ἡ ἐφαρμοσθεῖσα ἐνταῦθα μέθοδος δύναται νὰ ἐπεκταθῇ καὶ εἰς τὴν περίπτωσιν τῶν τριῶν διαστάσεων.

SUMMARY

In this paper some remarks are made on the Bloch equation, which is related to quantum statistics.

The method of high temperatures consists in expanding in powers of Planck's constant h, of which the first term corresponds to the semi-classical expression. Here a new solution of the Bloch equation is given, in a power series, not of h, but of 1/KT.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1]. A. Münster, Prinzipien der statistischen Mechanik, Handbuch der Physik, Bd. III/2, Seite 325, 331 (1959).
[2]. F. Bloch, Zeit. Physik 74, 295 (1932).
[3]. E. Montroll J. Ward, Phys. Fluids 1, 55 (1958).
[4]. E. Wigner, Phys. Rev. 40, 749 (1932).
[5]. J. Kirkwood, Phys. Rev. 44, 31 (1933).
[6]. M. Goldberger - E. Adams, J. Chem. Phys. 20, 240 (1952).
[7]. H. Green, J. Chem. Phys. 19, 955 (1951).
[8]. A. Jannussis, Bulletin de la soc. Math. Grèce 4, 127 (1963).
[9]. G. Valiron, Equations fonctionelles applications (Masson et Cie, Paris 1945, 590).
[10]. H. Davies, Proc. Camb. Phil. Soc. 53, 199 (1957).
[11]. E. Sondheimer - A. Wilson, Proc. Roy. Soc. A 210, 173 (1951).
[12]. A. Jannussis, Ὑπὸ δημοσίευσιν.
[13] A. Jannussis, Physica Status Solidi 8, 765 (1964).