



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ

**ΘΕΡΜΟΦΥΣΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ
ΚΡΥΟΓΟΝΙΚΟΥ ΗΛΙΟΥ**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
ΤΟΥ
ΔΟΜΕΝΙΚΟΥ ΓΕΩΡΓΙΟΥ-ΡΑΦΑΗΛ**

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: **ΡΟΓΔΑΚΗΣ ΕΜΜΑΝΟΥΗΛ**
ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ Ε.Μ.Π

Περιεχόμενα

1 Εισαγωγή.....	5
1.1 Σκοπός της εργασίας	5
1.2 Καινοτόμα Στοιχεία Εργασίας.....	5
1.3 Αποτελέσματα Περιγραφής περιοχών Ηλίου	6
1.4 Σύντομη Εισαγωγή στο Ήλιο	7
2 Ιστορική αναδρομή και παρουσίαση των μοντέλων.....	10
2.1 Η θεώρηση του London.....	11
2.2 Η θεώρηση του Landau	12
3 Περιγραφή των Quasiparticles – Phonons, Rotons και Maxons	14
3.1 Περιοχή Φωνονίων	14
3.2 Περιοχή Μαξονίων	17
3.3 Περιοχή Ροτονίων.....	18
4 1 ^{ος} 2 ^{ος} και 3 ^{ος} ήχος στο HeII.....	23
5 Εύρεση θερμοκρασίας συμπύκνωσης Bose-Einstein.....	26
6 Superfluid	33
6.1 Θεωρητικό μέρος.....	34
6.2 Μελέτη Πειραματικών Δεδομένων	37
6.3 Το διάγραμμα μετά το roton minimum.....	52
6.4 Υπολογισμός θερμοδυναμικών στοιχείων.....	66
7 Vapor	81
7.1 Θεωρητική Μελέτη.....	81
7.2 Πειραματική Μελέτη.....	86
8 Liquid.....	95
9 Vapor Pressure.....	102
10 Θερμοκρασία Tλ	105
11 Συναρτήσεις πινάκων.....	109
11.1 Υπερρευστό.....	109
11.1.1 Εύρεση μορφής συνάρτησης θεωρητικά	109
11.1.2 Παρουσίαση αριθμητικών συναρτήσεων για υπερρευστό	121
11.2 Περιοχή Υγρού (HeI)	132
11.3 Περιοχή ατμού.....	137
12 Helium 3	142

12.1 Υπερρευστότητα στο He3	142
12.1.1 Απαγορευτική αρχή του Pauli	143
12.1.2 Θεώρηση του Cooper	143
12.2 Μηδενικός Ήχος	148
12.3 Ενέργεια Fermi	149
12.4 Θερμοδυναμική Μελέτη He3	152
12.4.1 Θεωρητική Προσέγγιση	152
12.4.2 Καταστατική εξίσωση κρυογονικού ηλίου 3 – (0.1,3.375) K	159
12.5 Σύγκριση θεωρητικών και πειραματικών τιμών:	168
13 Μαθηματικό παράρτημα	170
13.1 Bose - Einstein Distribution Function	170
13.2 Fermi – Dirac Distribution Function	175
14 Βιβλιογραφία	179

1 Εισαγωγή

1.1 Σκοπός της εργασίας

Στην εργασία αυτή καλούμαστε να πραγματευτούμε, να μελετήσουμε και να μοντελοποιήσουμε τις ασυνήθιστες και ιδιαίτερες ιδιότητες του στοιχείου Ηλίου (Helium), και των δύο ισωτόπων του Helium-3 και Helium-4 στις πολύ χαμηλές θερμοκρασίες. Κατά τη μελέτη αυτή ουσιαστικά ανατρέχουμε στα υπάρχοντα δεδομένα της βιβλιογραφίας που έχουν προέλθει από πολλαπλά πειράματα και μελέτες άλλων επιστημόνων κατά τη διάρκεια του 20^{ου} αιώνα, καθώς και στις φυσικές γνώσεις περί του θέματος και τα διάφορα φαινόμενα και μοντέλα που επεξηγούν κομμάτια του. Μετά το πέρας αυτού εμείς καλούμαστε να κάνουμε έναν συνδυασμό από όλες αυτές τις παραπάνω γνώσεις καθώς και να προσθέσουμε δικά μας στοιχεία ώστε τελικά να μπορέσουμε να δώσουμε μία ακριβή μοντελοποίηση για τις φυσικές και θερμοδυναμικές ιδιότητες του στοιχείου αυτού σε όλες τις φάσεις του καθώς και στα δύο διαφορετικά ισότοπά του. Γενικά κρίνουμε ότι η μελέτη αυτή δίνει τη δυνατότητα στον να κατανοηθεί εις βάθος τόσο μακροσκοπικά όσο και μικροσκοπικά τις συμπεριφορές του κρυογονικού ηλίου, καθώς και να κάνει χρήση της μοντελοποίησης που έχει γίνει ώστε να παράξει δεδομένα που μπορεί να του φανούν χρήσιμα σε μελλοντικές εφαρμογές ή σχετικές μελέτες.

1.2 Καινοτόμα Στοιχεία Εργασίας

Η εργασία αυτή, όπως προαναφέρθηκε, κάνει χρήση υπάρχουσας γνώσης από τη βιβλιογραφία και τα πειραματικά δεδομένα, ωστόσο έχουμε κάνει και διάφορα επιπλέον βήματα ώστε να μπορέσουμε να παράγουμε αποτελέσματα σε μη μελετημένες περιοχές ή να βελτιώσουμε την ακρίβεια των ήδη υπαρχόντων. Όσον αφορά τα διαφορετικά χαρακτηριστικά της εργασίας αυτής, αρχικά πρέπει να αναφέρουμε πως θεωρήσαμε σωστό σε κάθε σημείο που γίνεται χρήση κάποιου τύπου που έχει προέλθει από κβαντομηχανική ή στατιστική φυσική τότε να προβαίνουμε οι ίδιοι σε απόδειξή του, καθώς σε πολλούς από αυτούς τους τύπους στη βιβλιογραφία γίνεται χρήση διάφορων θεωρήσεων που μπορεί να μη συνάδουν με τη δική μας αντίστοιχα περίπτωση οπότε τους ανακατασκευάζουμε απ' την αρχή και η χρήση των θεωρητικών τύπων αυτών τελικά περιγράφει όλες τις περιπτώσεις μελέτης του κρυογονικού ηλίου ως κβαντικό αέριο.

Άλλη μία διαφοροποίηση στη συνέχεια της εργασίας από τη βιβλιογραφία γίνεται κατά τη μελέτη του Ηλίου 4 κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία, όπου ουσιαστικά προβαίνουμε σε κατασκευή δικών μας εξισώσεων για τα maxons, rotons και την πυκνότητα με βάση απευθείας τα πειραματικά στοιχεία, καθώς και σε επίλυση του μαθηματικού προβλήματος όπως αυτό παρουσιάζεται στο αντίστοιχο κεφάλαιο με διαφορετικό τρόπο. Σημαντικό εδώ είναι να αναφερθεί ότι έγινε τροποποίηση όχι μόνο των αριθμητικών τιμών για μεγαλύτερη ακρίβεια αλλά και των εξισώσεων που έχουν προέλθει από τη στατιστική, ώστε να συνάδουν με το πρόβλημα και πλέον να μας δώσουν τα επιθυμητά αποτελέσματα.. Συνολικά λοιπόν έχουμε μία

ανάλογη αλλά πιο λεπτομερή ανάλυση και λύση του προβλήματος, η οποία εν τέλει μας παρουσιάζει αρκετά μικρότερα σφάλματα στο τέλος της καθώς όμως και στα επιμέρους κομμάτια κατά τη διάρκεια, κι επίσης είναι ικανή να περιγράψει το Ήλιο σε όλες τις τιμές του εύρους αυτού και όχι πλέον μόνο στις πινακοποιημένες.

Στη συνέχεια της εργασίας για τις διάφορες φάσεις του Ηλίου 4 θέλουμε να εφαρμόσουμε αντίστοιχες εξισώσεις ώστε να μπορέσουμε να περιγράψουμε τα πειραματικά δεδομένα. Η περιγραφή αποδεικνύεται ιδιαίτερος δύσκολη, γι' αυτό προτού κάνουμε την περιγραφή των πειραματικών δεδομένων προσπαθούμε να περιγράψουμε θεωρητικά την εξίσωση, ώστε να δούμε τη μορφή της. Κβαντομηχανικά λοιπόν καταλήγουμε σε μία εξίσωση της οποίας το διάγραμμα μας δείχνει μία εκθετική συμπεριφορά των τιμών. Το γεγονός αυτό κρίνεται ιδιαίτερα σημαντικό για την εργασία καθώς με βάση αυτό καθ' όλες τις υπολογιστικές διαδικασίες των δεδομένων γνωρίζουμε από πριν ότι επεξεργαζόμενοι κατάλληλα τα δεδομένα ώστε να τα φέρουμε σε μία μορφή στην οποία θα μπορέσει το υπολογιστικό πρόγραμμα να τα επεξεργαστεί πολύ πιο εύκολα και κυρίως δίνοντάς μας πολύ μεγαλύτερη ακρίβεια από άλλες προσπάθειες που έχουν γίνει για απευθείας περιγραφή των δεδομένων.

Τέλος, ανάλογα δουλεύοντας και στο Ήλιο 3, αρχικά πριν προβούμε σε θερμοδυναμική μελέτη και μελέτη των δεδομένων, προβαίνουμε σε φυσική ανάλυσή του, ώστε να δούμε τη μορφή των διαγραμμάτων και των εξισώσεων και μετά να κρίνουμε ποιες από τις εξισώσεις τη βιβλιογραφίας θα είναι κατάλληλες, ώστε να το περιγράψουν με ικανή ακρίβεια. Επίσης μ' αυτόν τον τρόπο γίνεται η κατασκευή μιας λειτουργικής θεωρητικής εξίσωσης που να περιγράφει τις θερμοδυναμικές ιδιότητες για το Ήλιο 3, οπότε μπορούμε πλέον να τη συγκρίνουμε με τις πειραματικές.

1.3 Αποτελέσματα Περιγραφής περιοχών Ηλίου

Βασικός σκοπός της εργασίας αυτής όπως προαναφέρθηκε είναι η περιγραφή των θερμοδυναμικών χαρακτηριστικών του Ηλίου στις διάφορες περιοχές.

Ήλιο 4

Υπερρευστό: Στο υπερρευστό κομμάτι έγινε η πιο ενδελεχής έρευνα, οπότε είναι ένα κομμάτι που περιγράφεται με μεγάλη ακρίβεια. Συγκεκριμένα στο κομμάτι των θερμοκρασιών από 0 έως 1.8 K έχουμε μία εξαιρετική περιγραφή των αποτελεσμάτων από την καταστατική εξίσωση που έχουμε καταστρώσει με αποκλίσεις από τα πειραματικά δεδομένα μικρότερες του 1%, καθώς και τη δυνατότητα να παράγουμε τα υπόλοιπα θερμοδυναμικά στοιχεία με ικανοποιητική ακρίβεια, με απόκλιση από τις πειραματικές τιμές της τάξεως του 5%. Οι ίδιες εξισώσεις περιγράφουν τη συμπεριφορά του ηλίου μέχρι τη θερμοκρασία T_l, δηλαδή ανάλογα με την πίεση περίπου στους 2.187K. Σε αυτό το εύρος θερμοκρασιών βλέπουμε ότι τα σφάλματα αυξάνονται κατά μικρό βαθμό, μη αλλάζοντας τάξη μεγέθους, οπότε οι εξισώσεις που παρουσιάζονται μπορούν ακόμα να χρησιμοποιηθούν σε εκείνες τις περιοχές.

Τλ: Η θερμοκρασία Τλ έχει περιγραφεί με απόλυτη ακρίβεια τόσο όσον αφορά την πίεση, όσο και την πυκνότητα, οπότε οι εξισώσεις που παρουσιάζονται περιγράφουν επακριβώς τα πειραματικά δεδομένα.

Ατμός: Στην περιοχή του ατμού η συνάρτηση που έχουμε παράξει ουσιαστικά περιγράφει σε θερμοκρασίες ανώτερες του Τλ. Οι αποκλίσεις της καταστατικής αυτής εξίσωσης από τα πειραματικά δεδομένα είναι πάρα πολύ μικρές <1%, και μας δίνει τη δυνατότητα και πάλι να παράγουμε και τα υπόλοιπα θερμοδυναμικά στοιχεία με καλή ακρίβεια με αποκλίσεις <10%. Ωστόσο είναι σημαντικό να σημειωθεί στο σημείο αυτό ότι στο εύρος που καλύπτει η εξίσωση αυτή υπάρχουν και σημεία συνύπαρξης του ατμού με το ρευστό. Στα σημεία αυτά η εξίσωση δεν μπορεί να περιγράψει ικανοποιητικά το μίγμα, και κυρίως τις παράγωγες θερμοδυναμικές ιδιότητες, οπότε συνίσταται προσοχή στην εφαρμογή της, ώστε να περιγράφει μόνο το αέριο.

Ρευστό: Στο ρευστό η καταστατική εξίσωση που έχει δημιουργηθεί είναι ικανή να περιγράψει τα μεγέθη που αφορά, δηλαδή την ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs συναρτήσει της θερμοκρασίας και της πίεσης με καλή ακρίβεια, ωστόσο δεν είναι σε θέση να μας παράξει τα παράγωγα θερμοδυναμικά μεγέθη με ακρίβεια σε ικανοποιητικό βαθμό.

Vapor Pressure: Η συνάρτηση που έχει δοθεί για το vapor pressure (τάση ατμών) είναι σε θέση να περιγράψει με απόλυτη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα που έχουν δοθεί από το McCarty οπότε και μπορεί να χρησιμοποιηθεί όπως έχει δοθεί.

Ήλιο 3

Ρευστό: Στο Ήλιο 3 η καταστατική εξίσωση που έχει δοθεί με βάση τα πειραματικά δεδομένα αφορά μόνο το απλό ρευστό το οποίο είναι σε θέση να περιγράψει με ικανή ακρίβεια. Όσον αφορά την περιγραφή του υπερρευστού, παρουσιάζεται η θεωρητική μελέτη του, της οποίας οι εξισώσεις ισχύουν και θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για την παραγωγή αποτελεσμάτων στις εξαιρετικά χαμηλές θερμοκρασίες.

1.4 Σύντομη Εισαγωγή στο Ήλιο

Τα συνήθη αέρια που μελετώνται στην επιστήμη της θερμοδυναμικής, υπακούν τους γνωστούς θερμοδυναμικούς νόμους, οι οποίοι μπορούν να προκύψουν από την κινητική θεωρία των μορίων που τα απαρτίζουν. Ωστόσο, όπως παρατηρήθηκε στις αρχές του περασμένου αιώνα κάποια αέρια, με την πρώτη παρατήρηση να γίνεται στο He, σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες αποκτούν αρκετά διαφορετική συμπεριφορά.

Όπως, εν συνεχεία κατανόησε η επιστημονική κοινότητα, αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες, οι επιδράσεις της κβαντομηχανικής αποκτούν σημαντικό βάρος, αρκετά ικανό να επιδράσει στη μακροσκοπική συμπεριφορά του μέσου. Το γεγονός αυτό οδηγεί σε πολλά φαινόμενα τα οποία φαντάζουν ξένα σε σχέση με την κλασική ρευστομηχανική και φυσική, καθώς αρχικά φαίνεται να παραβιάζουν τους νόμους των παραπάνω.

Τα υγρά αυτά σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες, όπως προαναφέρθηκε, αποκτούν πολύ διαφορετικές συμπεριφορές. Το πρώτο κρυογονικό υλικό που παρατηρήθηκε ήταν το υγρό He₄, και παρατηρήθηκε πρώτη φορά στο πείραμα του Heike Kamerlingh Onnes στο πανεπιστήμιο του Leiden στην Ολλανδία.

Αυτό που παρατηρήθηκε ήταν το γεγονός ότι, ενώ αρχικά το υγρό φαινόταν να είναι σε ανισορροπία και μόνο με την τάση ατμών του, εν συνεχεία, καθώς σε επόμενα πειράματα το υγρό ψύχθηκε περαιτέρω, φάνηκε απότομα να ηρεμεί και στην επιφάνειά του να μην υπάρχουν καθόλου αναταραχές.

Στη συνέχεια των πειραμάτων διαπιστώθηκε ότι το He δεν στερεοποιείται σε οποιαδήποτε θερμοκρασία υπό την πίεση ατμών του. Ωστόσο, διαπιστώθηκε ότι το He στερεοποιήθηκε με την εφαρμογή πίεσης της τάξεως των 25 atm. Για τον λόγο αυτό το He αποτέλεσε αντικείμενο επεξεργασίας για τη μελέτη των συμπεριφορών του στο απόλυτο 0 καθώς παραμένει ακόμα και εκεί υγρό.

Όπως θα δούμε εν συνεχεία με μεγαλύτερη λεπτομέρεια το He, στις θερμοκρασίες αυτές, αποτελεί ένα κβαντικό υγρό, κατά το οποίο το μήκος κύματος των σωματιδίων που το απαρτίζουν (de Broglie wavelength) είναι σε μέγεθος αντίστοιχο με την ενδομοριακή απόσταση, δηλαδή την απόσταση μεταξύ των ατόμων του υγρού. Για τον λόγο αυτό οι στατιστικές επιπτώσεις της κβαντομηχανικής παίζουν σημαντικό ρόλο.

Όσον αφορά το He₄, καθώς αποτελείται από άρτιο αριθμό μποζονίων, γνωρίζουμε ότι θα υπακούει τη στατιστική Bose-Einstein στη κβαντομηχανική του στατιστική. Αυτό σημαίνει ότι ο οποιοσδήποτε αριθμός ατόμων μπορεί να βρεθεί σε κοινή κβαντομηχανική κατάσταση. Όταν αυτή η κατάσταση αποτελεί τη βασική ενεργειακή κατάσταση του συστήματος (ground state), τότε αναφερόμαστε στο φαινόμενο αυτό ως συμπύκνωση Bose-Einstein.

Το He₃ αντιθέτως έχει περιττό αριθμό μποζονίων οπότε υπακούει τη στατιστική Fermi-Dirac στη κβαντομηχανική του κατάσταση. Κατά τη στατιστική αυτή δύο κβαντικά σωματίδια του ίδιου συστήματος δεν μπορούν να βρίσκονται στην ίδια ενεργειακή κατάσταση.

Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τα δύο ισότοπα του He να συμπεριφέρονται πολύ διαφορετικά στις χαμηλές θερμοκρασίες.

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, κατά την περαιτέρω ψύξη του υγρού He₄ παρατηρήθηκε ότι κάτω από μία θερμοκρασία το υγρό φαίνεται να ηρεμεί και να παύει ο βρασμός. Αυτή η θερμοκρασία αποτελεί τους 2.17 K σε πίεση ατμών. Αυτό παρατηρήθηκε σε συνδυασμό με το γεγονός ότι κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία αυτή το υγρό γίνεται εξαιρετικά καλός αγωγός θερμότητας. Αυτό έχει ως συνέπεια οι ανομοιομορφίες της θερμοκρασίας μέσα στο υγρό να διαλύονται πολύ γρήγορα, οπότε να μην υπάρχουν στοιχεία του υγρού που να επιταχύνονται από και προς την επιφάνεια. Επίσης, στις θερμοκρασίες αυτές παρατηρήθηκε ότι οι ιδιότητες της ροής του υγρού έγιναν πολύ διαφορετικές.

Παραδείγματα της συμπεριφοράς αυτής του He που παρατηρήθηκαν, είναι ότι είχε τη δυνατότητα να διαρρέει μέσα από τη παραμικρή οπή που υπήρχε στο δοχείο που βρισκόταν. Επίσης, αξιομνημόνευτο παράδειγμα αποτελεί το γεγονός ότι αν ένα δοκιμαστικός σωλήνας με υγρό He κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία ανυψωνόταν πάνω από το δοχείο του υγρού, τότε

το υγρό σχηματίζοντας ένα λεπτό φιλμ στα τοιχώματα του σωλήνα θα επέστρεφε στο δοχείο αδειάζοντας τελικά το σωλήνα.

Παρόμοιο και αντίστοιχα ενδιαφέρον φαινόμενο αποτελεί και το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας. Η υπεραγωγιμότητα αποτελεί το φαινόμενο κατά το οποίο ένας αγωγός έχει μηδενική αντίσταση. Η ιδιότητα αυτή αποτελεί ιδιότητα των ηλεκτρονίων, τα οποία έχουν ημιακέραιο spin, οπότε υπακούν στατιστική Fermi-Dirac. Κατά τη στατιστική αυτή όπως περιγράφεται, μαθηματικά παρακάτω, σε ένα κβαντικό σύστημα δεν μπορούν να υπάρχουν δύο διαφορετικά στοιχεία τα οποία να βρίσκονται στην ίδια ενεργειακή κατάσταση. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα σε ένα αέριο φερμιονίων που βρίσκεται σε θερμοκρασία απόλυτου 0, τα στοιχεία του ρευστού θα βρίσκονται στις χαμηλότερες διαφορετικές ενεργειακές καταστάσεις, μέχρι την ενεργειακή κατάσταση που αντιπροσωπεύεται από την ενέργεια Fermi. Το γεγονός αυτό άμεσα δείχνει ότι θεωρητικά δεν θα μπορούσε να σχηματιστεί συμπύκνωμα Bose-Einstein σε ένα φερμιονικό αέριο. Ωστόσο, για την εξήγηση του φαινομένου της υπεραγωγιμότητας που είχε παρατηρηθεί, οι Bardeen, Cooper και Schieffer έκαναν τη θεώρηση ότι πρέπει να υπάρχει κάποια αλληλεπίδραση μεταξύ των φερμιονίων η οποία να τους δίνει τη δυνατότητα να συμπεριφέρονται με κάποιο τρόπο ώστε να έχουν μακροσκοπικά παρόμοιες ιδιότητες με μποζόνια. Το φαινόμενο αυτό περιγράφεται από τα λεγόμενα Cooper pairs, δηλαδή ζευγάρια φερμιονίων τα οποία είναι συζευγμένα (entangled). Τα ζευγάρια αυτά των φερμιονίων καθώς αθροιστικά έχουν ακέραιο spin συμπεριφέρονται με ιδιότητες παρόμοιες των μποζονίων οπότε μπορούν τελικά να σχηματίσουν Bose-Einstein Condensate και να εξηγήσουν το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας. Η κβαντομηχανική αυτή σύζευξη ουσιαστικά προδιαθέτει τη διατήρηση των Cooper Pairs σε χαμηλές θερμοκρασίες ακόμη και όταν τα δύο φερμιόνια βρίσκονται σε άπειρη απόσταση μεταξύ τους, οπότε η επιφάνεια Fermi, που όπως θα δούμε παρακάτω χαρακτηρίζει το φαινόμενο αυτό, μπορεί να έχει άπειρο μέγεθος, πράγμα που μας δείχνει ότι σε κατάλληλη θερμοκρασία το φαινόμενο αυτό μπορεί να συμβεί σε κάθε φερμιονικό αέριο. Ο τρόπος με τον οποίο τα δύο φερμιόνια, ηλεκτρόνια στην περίπτωση της υπεραγωγιμότητας, σχηματίζουν αυτή την κατάσταση σύζευξης είναι μέσω των electron-phonon interactions. Με άλλα λόγια, τα δύο ηλεκτρόνια έχουν αρνητικό φορτίο οπότε απωθούνται, ωστόσο κατά την κίνησή τους μέσα στον κρύσταλλο προκαλούν πόλωση της κρυσταλλικής δομής (η μεταβολή της κρυσταλλικής αυτής δομής εκφράζεται ως φωνόνιο), η οποία οδηγεί σε μία θετική φόρτιση της περιοχής που βρίσκεται το ηλεκτρόνιο με αποτέλεσμα την έλξη λοιπών ηλεκτρονίων άρα και τη δυνατότητα σύζευξής τους άπαξ και έρθουν σε κατάλληλες συνθήκες μέσα στο ίδιο κβαντομηχανικό σύστημα.

Η θερμοκρασία αυτή κατά την οποία σχηματίζονται τα ζευγάρια αυτά σε ένα φερμιονικό αέριο είναι εξαιρετικά χαμηλή, δηλαδή περίπου 1000 φορές μικρότερη από τη θερμοκρασία Fermi. Απ' αυτό καταλαβαίνουμε ότι η κρίσιμη θερμοκρασία ενός φερμιονικού υπερρευστού θα είναι πολύ χαμηλότερη από την αντίστοιχη κρίσιμη θερμοκρασία ενός μποζονικού.

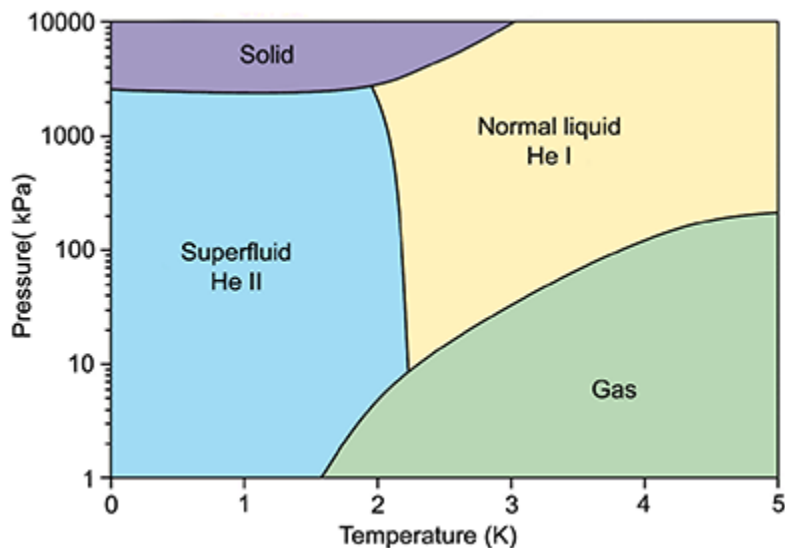
Η θεώρηση, λοιπόν, αυτή εκτός από την υπεραγωγιμότητα σε αέριο ηλεκτρονίων, μπορεί να εφαρμοστεί και οποιοδήποτε φερμιονικό αέριο, όπως He3. Η διαφορά στην περίπτωση αυτή είναι ότι τα σωματίδια έχουν σαφώς αρκετά μεγαλύτερη μάζα και καθώς βρίσκονται μέσα σε υγρό αλληλοεπιδρούν πολύ ισχυρότερα το ένα με το άλλο. Τα βαρύτερα και ισχυρότερα αλληλοεπιδρώντα σωματίδια αυτά αναφέρονται με τον όρο quasiparticles.

2 Ιστορική αναδρομή και παρουσίαση των μοντέλων

Το υπερρευστό ως ορισμός αναφέρθηκε πρώτη φορά από τον Pyotr Kapitza, επιστήμονα στη Σοβιετική Ένωση, και δευτερευόντως από τους Allen και Misener από τα πανεπιστήμια του Toronto και του Lieden αντίστοιχα.

Η παρατήρηση του υπερρευστού Ηλίου 4 έγινε για πρώτη φορά κατά τον «αγώνα προς το απόλυτο 0» (κατά τον οποίο γίνονταν προσπάθεια ψύχοντας διαφορετικά στοιχεία να φτάσουν όσο το δυνατόν χαμηλότερα στην κλίμακα Kelvin) . Μετά την υγροποίηση του Υδρογόνου το μόνο στοιχείο που είχε απομείνει ήταν το Ήλιο, οπότε και ξεκίνησε ένας αγώνας μεταξύ εργαστηρίων στο Cambridge και το Lieden για την υγροποίησή του. Πρώτη φορά το Ήλιο τελικά υγροποιήθηκε στο πανεπιστήμιο του Lieden, όπου πολύ σύντομα μετά από αυτό έγινε η παρατήρηση ότι συμπεριφέρεται διαφορετικά από τα υπόλοιπα ρευστά. Αυτό που έκανε εντύπωση στους ερευνητές, ώστε να αρχίσουν σχεδόν άμεσα να αναζητούν εξήγηση για την παράξενη συμπεριφορά του Ηλίου, ήταν ότι κάτω από μία θερμοκρασία, το ρευστό σταμάταγε πλέον να είναι σε κατάσταση βρασμού αλλά ηρεμούσε. Εν συνεχεία έγιναν κι άλλες παρατηρήσεις, όπως η ικανότητά του όταν το ψύχανε σε ακόμη χαμηλότερες θερμοκρασίες να «ξεφεύγει» από το σημείο που είχε αρχικά τοποθετηθεί.

Σε πειράματα λοιπόν ο Willen Keeson συνειδητοποίησε ότι η θερμοκρασία κάτω από την οποία το Ήλιο 4 άρχισε να έχει αυτές τις συμπεριφορές είναι περίπου στους 2.17K και ονομάστηκε τελικά T_λ, λόγω του σχήματος που έχει στο διάγραμμα φάσεων.



Διάγραμμα 2.0.1: Διάγραμμα φάσεων Ηλίου 4 συναρτήσει πίεσης και θερμοκρασίας.

Εν συνεχεία ο Keeson ασχολήθηκε με τη μέτρηση της θερμικής αγωγιμότητας του Ηλίου στις θερμοκρασίες αυτές όπου παρατήρησε ότι οι τιμές της ήταν ασυνήθιστα μεγάλες. Το

φαινόμενο αυτό επίσης παρατηρήθηκε και μελετήθηκε από τον Rollin στο πανεπιστήμιο της Οξφόρδης.

Ο Karitzza, ήταν ο πρώτος που αναλογίστηκε ότι πρέπει να υπάρχει κάποια σύνδεση μεταξύ της υψηλής αυτής θερμικής αγωγιμότητας καθώς και του εξαιρετικά χαμηλού ιξώδους που παρατηρούνταν στο Ήλιο στις χαμηλές θερμοκρασίες. Ο ίδιος χρησιμοποίησε πρώτη φορά το όρο υπερρευστό σε άρθρο του που έκανε τον παραλληλισμό μεταξύ της συμπεριφοράς του ρευστού αυτού και του φαινομένου της υπεραγωγιμότητας, δηλαδή της δυνατότητας κάποιων αγωγών σε εξαιρετικά χαμηλές θερμοκρασίες να παρουσιάζουν μηδενική ηλεκτρική αντίσταση.

Το 1938 ο London αναλογίστηκε το υπερρευστό ως ένα ρευστό που ουσιαστικά αποτελεί ένα κβαντικό σύστημα, και χρησιμοποίησε την ιδέα του αυτή αρχικά για να προσπαθήσει να εξηγήσει τη θερμική συμπεριφορά των υπερρευστών ως προς τη θερμική τους αγωγιμότητα. Η ιδέα αυτή του London για την καθ' αυτόν τον τρόπο μελέτη του υπερρευστού του δόθηκε από μία θεώρηση του Einstein κατά την οποία τα διαφορετικά σωματίδια/μόρια που απαρτίζουν ένα κβαντικό σύστημα μπορούν να μελετηθούν ως ένα σωματίδιο, οπότε και να επιδείξουν τις αντίστοιχες κβαντικές ιδιότητες. Ένα τέτοιο σύστημα χαρακτηρίζεται ως συμπύκνωμα Bose-Einstein.

2.1 Η θεώρηση του London.

Τα σωματίδια του Ηλίου 4 αποτελούν μποζόνια, οπότε μπορούμε να θεωρήσουμε αντίστοιχα ως κβαντικό αέριο, του οποίου μάλιστα η κινητική ενέργεια είναι αρκετά υψηλή (λόγω της μάζας των ατόμων Ηλίου) οπότε αναμένεται απουσία κρυσταλλικών διατάξεων σε χαμηλές πιέσεις.

Πριν από τη θεώρηση του London τα συμπυκνώματα Bose-Einstein αποτελούσαν μονάχα θεωρητικές θεωρήσεις, αλλά τώρα με αυτόν τον τρόπο έρχονται μέσω της θεώρησης του London να ερμηνεύσουν αυτή την απότομη μεταβολή στη θερμική αγωγιμότητα του Ηλίου πριν και μετά το Tλ.

Οπότε βασικά η εικόνα του London, παρουσιάζει το υπερρευστό Ήλιο κάτω από το Tλ ως «μίγμα» δύο διαφορετικών ρευστών, του κανονικού ρευστού Ηλίου, το οποίο ο ίδιος θεωρεί ως ιδανικό αέριο και αυτού που βρίσκεται σε κατάσταση συμπυκνώματος Bose-Einstein. Ωστόσο και ο ίδιο αναφέρει ότι αυτή αποτελεί μία απλουστευμένη θεώρηση.

Κατόπιν, μετά από συνεργασία του London με τον Tisza, ο δεύτερος επέκτεινε την θεώρηση του London, προσθέτοντας ότι το μέρος του ρευστού που αποτελεί συμπύκνωμα Bose-Einstein έχει μηδενική εντροπία και ιξώδες, ενώ το υπόλοιπο έχει τα στοιχεία του ιδανικού αερίου Ηλίου. Συμφωνά με αυτό δηλαδή το υπερρευστό αποτελεί ένα εκφυλισμένο συμπύκνωμα Bose-Einstein.

Αυτό το μοντέλο των δύο ρευστών στο HeII, ελέγχθηκε πειραματικά από τον Tisza, με πειραματική διαδικασία κατά την οποία ανάγκαζε το ρευστό να διέλθει μέσα από σχισμή η οποία ήταν αρκετά στενή, ώστε μόνο το κομμάτι του ρευστού με μηδενικό ιξώδες να έχει τη δυνατότητα να διέλθει (ανάλογα με την λειτουργία του σημερινού dilution cooling), όπως και

τελικά έγινε. Οπότε με αυτόν τον τρόπο η συνολική αυτή θεώρηση του London με τον Tisza ήταν πλέον σε θέση να εξηγήσει τη συμπεριφορά της θερμικής αγωγιμότητας καθώς και του μηδενικού ιξώδους του υπερρευστού.

2.2 Η θεώρηση του Landau

Ο σοβιετικός κι αυτός Landau, δουλεύοντας αρχικά στο Cambridge κι έπειτα στο πανεπιστήμιο της Μόσχας, διαφωνούσε με την εικόνα που είχε παρουσιάσει ο Tisza, καθώς έλλειπε η εξήγηση για ποιον λόγο τα άτομα του κανονικού ρευστού δεν συγκρούονται με τα άτομα που βρίσκονται στην κατάσταση του συμπυκνώματος.

Πρέπει να τονίσουμε ότι ο Landau διαφωνούσε με καθ' όλη την ύπαρξη ή τη σχέση της υπερρευστότητας με τα συμπυκνώματα Bose-Einstein.

Ο Landau, λοιπόν, κατέστρωσε μία εικόνα κατά την οποία θα μελετούσε το υπερρευστό ως ένα κβαντικό υγρό στο οποίο, κάθε διεγερμένη κατάσταση αποτελεί άθροισμα μεμονωμένων θεμελιωδών διεγέρσεων του συστήματος.

Περιγράφει τις θεμελιώδεις αυτές διεγέρσεις ως δύο ειδών. 1. Γραμμικών ταλαντώσεων του πλέγματος των ατόμων του ρευστού που αποκαλεί phonons και 2. Στροφικών διεγέρσεων με τη μορφή θεμελιωδών δινών (vortices) που αποκαλεί rotons.

Με βάση αυτή τη θεώρηση είναι πλέον σε θέση να υπολογίσει την κρίσιμη ταχύτητα του υπερρευστού (δηλαδή την ταχύτητα του 2^{ου} ήχου, όπως θα αναφερθεί παρακάτω), δείχνοντας ότι είναι για το HeII ανεξάρτητη της θερμοκρασίας και της πίεσης.

Ωστόσο κατά τους υπολογισμούς του ήρθε σε αποτελέσματα που του έδιναν ταχύτητα πολύ υψηλότερη από τη μετρούμενη.

Για την επίλυση του προβλήματος αυτού ο Landau αναγκάστηκε ουσιαστικά να ενώσει τα δύο μοντέλα, δηλαδή το δικό του που βασιζόταν στις διεγέρσεις κι έβλεπε συνολικά το ρευστό, με αυτό του Tisza των δύο ρευστών. Κατά την ένωση αυτή θεώρησε ότι αυτό που ανέφερε ο Tisza ως συμπύκνωμα Bose-Einstein είναι αυτό που περιγράφει ο ίδιος με το μοντέλο των διεγέρσεων, ενώ το υπόλοιπο αποτελεί απλό ρευστό ήλιο 4.

Τα δύο αυτά μοντέλα είναι παρόμοια, με την έννοια ότι μπορούν να εξηγήσουν τη διαφορά μεταξύ δύο διαφορετικών πεδίων ταχυτήτων και θερμοκρασιών μέσα στο ρευστό, καθώς και την δυνατότητα του υπερρευστού να ρέει μέσα στο κανονικό ρευστό χωρίς να διαχέεται.

Η διαφορά τους επέρχεται στο γεγονός ότι το μοντέλο του Tisza δεν ήταν σε θέση να προβλέψει την ύπαρξη της κρίσιμης αυτής ταχύτητας, και στο γεγονός ότι ο Tisza αποδίδει τις ιδιότητες της υπερρευστότητας στην ύπαρξη συμπυκνώματος BE ενώ ο Landau στα quasiparticles.

Έπειτα, για την επιβεβαίωση του ενοποιημένου αυτού μοντέλου στήθηκαν πειραματικές διαδικασίες από τον Donnelly και τον Peshkov όπουδείχθηκε τελικά ότι το συνολικό μοντέλο του Landau επιβεβαιώνεται σε σχέση με αυτό του Tisza, με βάση τις τιμές της ταχύτητας του

δευτέρου ήχου καθώς η θερμοκρασία πλησιάζει το 0K. Σύμφωνα με τη θεώρηση του Tisza η ταχύτητα αυτή θα έπρεπε να τείνει στο 0 για μηδενική θερμοκρασία, ενώ με βάση το Landau θα έπρεπε να τείνει στην τιμή των $c/\sqrt{3}$, όπου c η ταχύτητα του πρώτου ήχου.

Το μοντέλο αυτό του Landau, με τα δεδομένα της εποχής χρησιμοποιήθηκε εν συνεχεία από τον Donnelly, ώστε να μπορέσει να παράγει τα διάφορα θερμοδυναμικά μεγέθη.

Ωστόσο, το μοντέλο αυτό δεν ήταν τέλειο καθώς παρουσίαζε και αυτό κάποιες φυσικές αλλά και μαθηματικές για την εποχή δυσκολίες. Αρχικά, το φυσικό πρόβλημα έγκειται το γεγονός της κβάντωσης της περιστροφικής κίνησης των σωματιδίων του Ηλίου. Συγκεκριμένα ο Landau αναφέρει ότι υπάρχει ένα άλμα στις στροφορμές των μορίων, πράγμα που δεν μπορεί μέχρι στιγμής να εξηγήσει φυσικά.

Αργότερα, καθώς αναπτύχθηκε περαιτέρω η φυσική πίσω από τα συμπυκνώματα BE, ο Bogoliubov έδειξε ότι σε ένα τέτοιο συμπύκνωμα, δεν μπορούν να υπάρξουν μεμονωμένες κινήσεις σε χαμηλές ενέργειες, τόσο για τα phonons όσο και για τα rotons. Επίσης έδειξε ότι τέτοιου είδους διεγέρσεις μπορούν να εμφανιστούν μόνο πάνω από το σημείο όπου έχει πλέον ξεπεραστεί η κρίσιμη ταχύτητα. Οπότε με αυτόν τον τρόπο εξηγείται πλέον ο προβληματισμός του άλματος της στροφορμής στη θεώρηση του Landau.

Συμπερασματικά σήμερα το μοντέλο που έχει επικρατήσει, εμπεριέχει και τις τρεις θεωρίες, αυτή των δύο ρευστών, όπου το ένα είναι το κανονικό ρευστό, και αυτό που αποτελείται από τα quasiparticles τα οποία όμως όπως δείχθηκε βρίσκονται σε κατάσταση συμπυκνώματος Bose-Einstein.

3 Περιγραφή των Quasiparticles – Phonons, Rotons και Maxons

Με βάση την περιγραφή του Landau, οι Donnelly και Brooks έδωσαν μία μαθηματική περιγραφή των παραπάνω σωματιδίων.

Παραπάνω διαπιστώσαμε τον τρόπο με τον οποίο τα ισότοπα του Ηλίου σε χαμηλές θερμοκρασίες σχηματίζουν υπερρευστό. Η μελέτη λοιπόν του Ηλίου σε τέτοιες θερμοκρασίες είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα τόσο από θερμοδυναμικής όσο και από ρευστομηχανικής απόψεως.

Για τη μελέτη του ρευστού καθώς πλέον στις θερμοκρασίες αυτές έχουμε δύο φάσεις του ρευστού, το αντιμετωπίζουμε ως άθροισμα δύο διαφορετικών ρευστών, ενός κανονικού ρευστού και του υπερρευστού. Η περιοχή στην οποία έχουμε και τα δύο αναφέρεται ως περιοχή Helium-II, ενώ η περιοχή στην οποία το συνολικό υγρό έχει ιδιότητες παρόμοιες μ' αυτές του υπερρευστού, την αναφέρουμε ως περιοχή Helium-I.

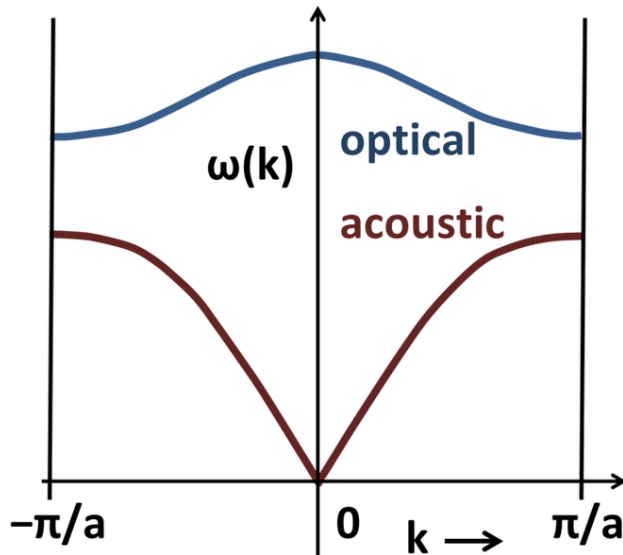
Ο λόγος για τον οποίο ένα υγρό ξεκινά να εισέρχεται στην περιοχή I με την αύξηση της θερμοκρασίας, είναι ότι καθώς αρχίζουν να υπάρχουν διάφορες διεγέρσεις των ατόμων του υπερρευστού, τότε παύουν να είναι σε κατάσταση συμπύκνωσης Bose-Einstein. Στις χαμηλές, συγκριτικά με την κλίμακα που βρισκόμαστε, θερμοκρασίες οι διεγέρσεις αυτές αποτελούν κατά κύριο λόγο «κρυσταλλικές» ταλαντώσεις. Πιο συγκεκριμένα, καθώς δεν έχουμε κρύσταλλο, αποτελούν ταλαντώσεις κατά τις οποίες η κίνηση του ενός σωματιδίου επηρεάζει και γειτονικά του στοιχεία, πράγμα που κανονικά δε θα συνέβαινε σε ένα τέλειο υπερρευστό. Γι' αυτό το λόγο οι διεγέρσεις αυτές μελετώνται ως κρυσταλλικές ταλαντώσεις, άρα ως φωνόνια (phonons).

3.1 Περιοχή Φωνονίων

Γενικά, υφίστανται δύο διαφορετικές κατηγορίες φωνονίων, τα ακουστικά φωνόνια και τα οπτικά φωνόνια:

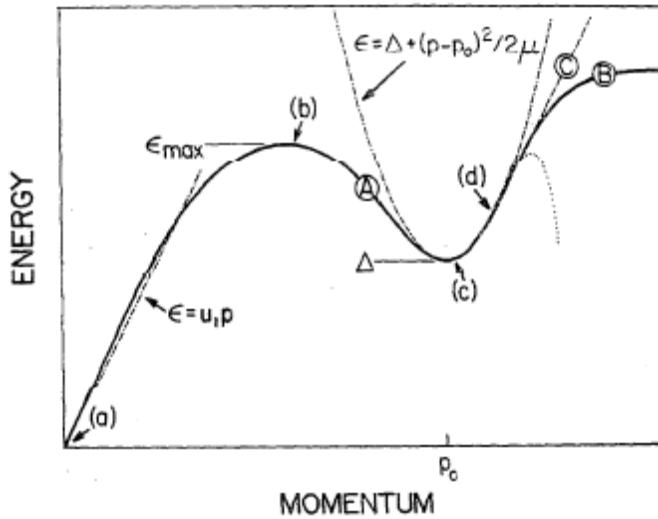
- Τα ακουστικά φωνόνια αποτελούν κύματα μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα σωματιδίων που βρίσκονται σε κινητική ισορροπία, τα οποία έχουν συγκεκριμένη διεύθυνση και φορά. Το μήκος κύματος ενός φωνονίου τέτοιου είδους, κατά τον Landau, αποτελεί το μήκος κύματος του κύματος μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα, δηλαδή την απόσταση ενδεικτικά μεταξύ δύο κορυφών. Τα ακουστικά φωνόνια έχουν γραμμική σχέση μεταξύ της συχνότητάς τους και του κυματανίσματός τους.
- Τα οπτικά φωνόνια αποτελούν ταλαντωτικές συμπεριφορές σωματιδίων του κρυσταλλικού πλέγματος προς τυχαίες κατευθύνσεις, καθώς παράγονται από εξωτερικές διεγέρσεις μεμονωμένων σωματιδίων, συνήθως φωτονίων του ορατού ή του υπέρυθρου φάσματος.

Για τα δύο είδη των φωνονίων μπορούμε να δούμε το ακόλουθο σχήμα που απεικονίζει την ενέργεια του ενός φωνονίου απ' το κάθε είδος μέσα σε τετραγωνικό απειροδιάστατο πηγάδι δυναμικού.



Διάγραμμα 3.0.1.1: Κυματάνισμα φωνονίων

Εν συνεχεία, σε υψηλότερες θερμοκρασίες εκτός από κινηματικές-ταλαντωτικές διεγέρσεις αρχίζουμε να έχουμε πιο περίπλοκες διεγέρσεις, οι οποίες μελετώνται και πάλι ως σωματίδια τα οποία ονομάζονται ροτόνια (rotons). Τα ροτόνια, μπορούν να μελετηθούν και ως κβαντισμένοι μικροσκοπικοί στροβιλισμοί μέσα στο υπερρευστό. Αξίζει εδώ να σημειωθεί ότι η μελέτη των στροβιλισμών μέσα σ' ένα υπερρευστό αποτελεί ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον φαινόμενο καθώς, μην έχοντας τριβή μεταξύ των στοιχείων του υπερρευστού δίνεται η δυνατότητα συνεχούς ύπαρξης στροβιλισμών ακόμα και σε κατάσταση ισορροπίας του συστήματος, κάτι που μας προϊδεάζει για το γεγονός ότι τα ροτόνια, παρότι είναι στροβιλισμοί θα εξαρτώνται τελικά μόνο από τις θερμοδυναμικές συνθήκες στις οποίες βρίσκεται το ρευστό, οπότε θα εμφανίζονται ανεξαρτήτως της ύπαρξης εξωτερικής διέγερσης. Τέλος, σε ακόμα υψηλότερες ενέργειες στην περιοχή του πρώτου μεγίστου του ακόλουθου διαγράμματος, οι διεγέρσεις έχουν ελαφρώς διαφορετική μορφή και ονομάζονται maxons.



Διάγραμμα 3.1.2 – πηγή [1]: Ενέργεια quasiparticles-ορμή

Στο ανωτέρω διάγραμμα παρουσιάζονται οι παραπάνω περιοχές:

- (a) Phonons
- (b) Maxons
- (c) Rotons

Στην περιοχή των φωνονίων η καμπύλη που ακολουθεί η συνάρτηση ενέργειας ορμής μπορεί να θεωρηθεί πρακτικά ευθεία, πράγμα που μας ωθεί στο να πιστέψουμε ότι αποτελούν ακουστικά φωνόνια καθώς η ενέργειά τους αυξάνεται γραμμικά με την ορμή οπότε συμπεραίνουμε ότι πρόκειται για δομημένες κινήσεις του κρυσταλλικού πλέγματος.

Οι ακόλουθες εξισώσεις των maxons, rotons και phonos που χρησιμοποιούνται σ' αυτό το κεφάλαιο δίνονται απ' το paper των Donnelly and Brooks [1]

Τα φωνόνια αυτά διέπονται από την εξίσωση Schrodinger με βάση την ακόλουθη χαμηλοτονιακή:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2 \cdot m} + \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (x_i - x_j)^2 \quad 3.1.1 - \text{πηγή [1]}$$

Έτσι επιλύοντας τελικά κατά τα γνωστά την εξίσωση Schrodinger καταλήγουμε ότι όπως και σε έναν κβαντικό ταλαντωτή μηδενικής ενέργειας η ενέργεια θα είναι της μορφής:

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar \omega. \quad 3.1.2 - \text{πηγή [1]}$$

Οπότε βλέπουμε ότι τα φωνόνια αποτελούν σωματίδια με ημισακέραιο spin, δηλαδή φερμιόνια.

3.2 Περιοχή Μαξονίων

Στην περιοχή των μαξονίων η συνάρτηση που ακολουθείται έχει μελετηθεί αντίστοιχα στην πίεση ατμών για το He4.

Για την πίεση ατμών:

$$\frac{\varepsilon_{\max}(0, \rho_0)}{k} = E_0 + E_1 \cdot \rho_0 + E_2 \cdot \rho_0^2 + E_3 \cdot \rho_0^3 \quad 3.2.1 - \text{πηγή [1]}$$

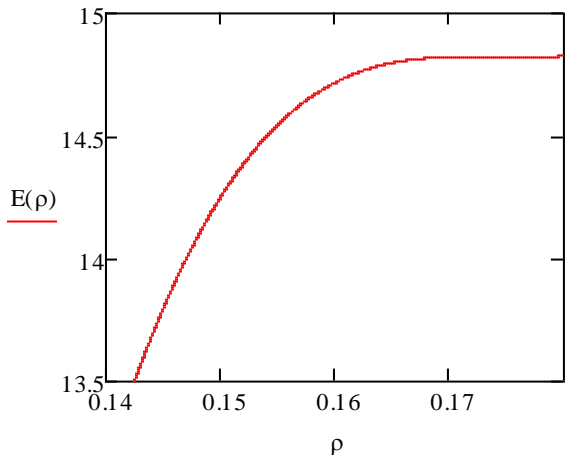
Με γνωστές σταθερές

$$\begin{aligned} E_0 &= -216.5672 \\ E_1 &= 3998.6005 \\ E_2 &= -23028.6027 \\ E_3 &= 44199.7232 \end{aligned}$$

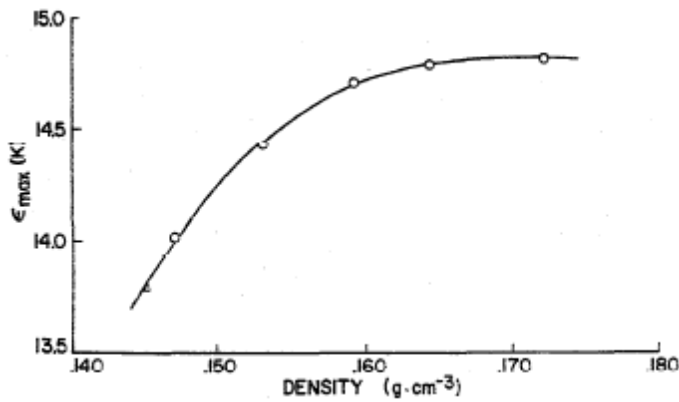
Πίνακας 3.2.1 – πηγή [1]

Και ρ_0 η πυκνότητα του He4 στους 0 K, και k η σταθερά Boltzmann.

Με βάση την παραπάνω εξίσωση προκύπτει το ακόλουθο διάγραμμα το οποίο συνάδει με το διάγραμμα των πειραματικών δεδομένων για τη συσχέτιση της ενέργειας των μαξονίων σε σχέση με την πυκνότητα για το He4.



Διάγραμμα 3.0.2.1: Ενέργεια ταχύτητας-πυκνότητα



Διάγραμμα 3.2.2 – πηγή [1]: Ενέργεια ταχύτητας-πυκνότητα

3.3 Περιοχή Ροτονίων.

Αντίστοιχα και στην περιοχή αυτή οι εξισώσεις που διέπουν τα ροτόνια είναι οι ακόλουθες:

Η ενέργεια του ροτονίου δίνεται απ' τον τύπο:

$$E_{\text{roton}}(\rho, T, p) = \Delta(\rho, T) + \frac{(p - p_0(\rho))^2}{2 \cdot \mu(\rho, T)}$$

3.3.1 – πηγή [1]

$$p_o(\rho) := 3.64\rho^{\frac{1}{3}} \cdot \text{hbar}$$

3.3.2 – πηγή [1]

Όπου ρ η πυκνότητα, T η θερμοκρασία και p η πίεση. Βοηθητική συνάρτηση της διαφοράς της ενέργειας των φωνονίων και μ η φαινόμενη μάζα των φωνονίων, με:

$$\Delta(\rho, T) = \left[\Delta_1 + \Delta_2 \cdot \rho + \Delta_3 \cdot e^{t(\rho, T)} \cdot \frac{T}{\rho} + \Delta_4 \cdot e^{2t(\rho, T)} \cdot \rho + \left(\Delta_5 + \Delta_6 \cdot \rho + \Delta_7 \cdot \rho^2 \right) \cdot e^{3t(\rho, T)} \right] \cdot k$$

3.3.3 – πηγή [1]

Και

$$\mu(\rho, T) = U_1 + U_2 e^{t(\rho, T)} \cdot T + U_3 \cdot \rho + U_4 \cdot e^{t(\rho, T)} \cdot \frac{T}{\rho} + \left(U_5 + U_6 \cdot \rho \right) \cdot e^{3t(\rho, T)}$$

3.3.4 – πηγή [1]

Με σταθερές U και Δ να είναι:

$\Delta_1 = 1.741647E+01$
 $\Delta_2 = -6.048823E+01$
 $\Delta_3 = -5.307478E-01$
 $\Delta_4 = 1.817261E+04$
 $\Delta_5 = -1.351398E+07$
 $\Delta_6 = 1.621499E+08$
 $\Delta_7 = -5.062661E+08$

Πίνακας 3.3.1 – πηγή [1]

$U_1 = 3.420601E-01$
 $U_2 = 1.239037E+00$
 $U_3 = -1.238153E+00$
 $U_4 = -2.234561E-01$
 $U_5 = 1.342995E+04$
 $U_6 = 6.321971E+05$

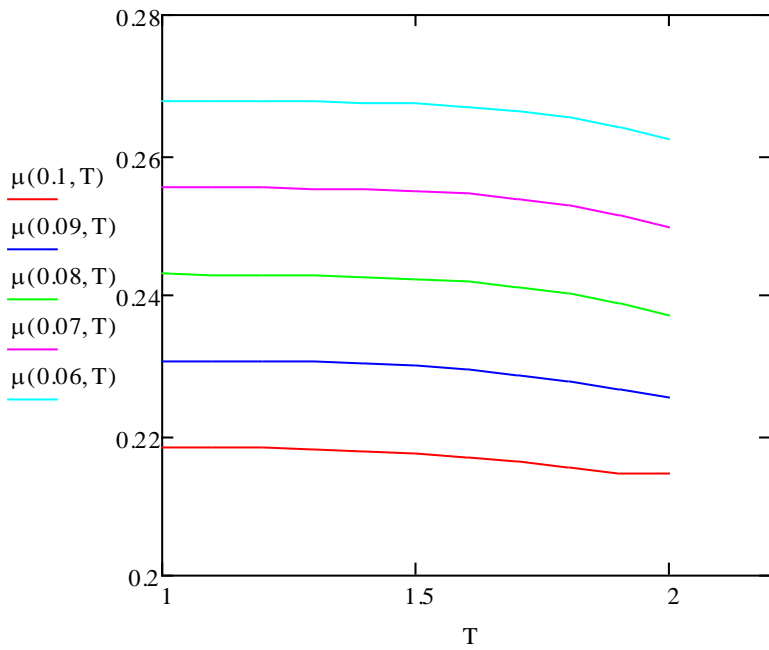
Πίνακας 3.3.2 – πηγή [1]

Και :

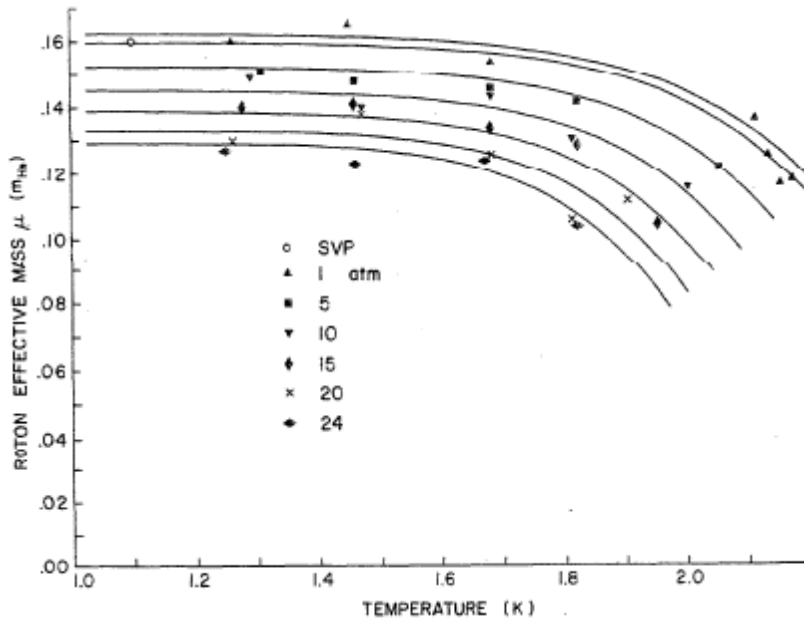
$$t(\rho, T) = \frac{-(16.99 - 57.31\rho)}{T}$$

3.3.5 – πηγή [1]

Οπότε από τα παραπάνω προκύπτει για τη φαινόμενη μάζα των ροτονίων το ακόλουθο διάγραμμα:



Διάγραμμα 3.0.3.1: Μάζα rotons - θερμοκρασία

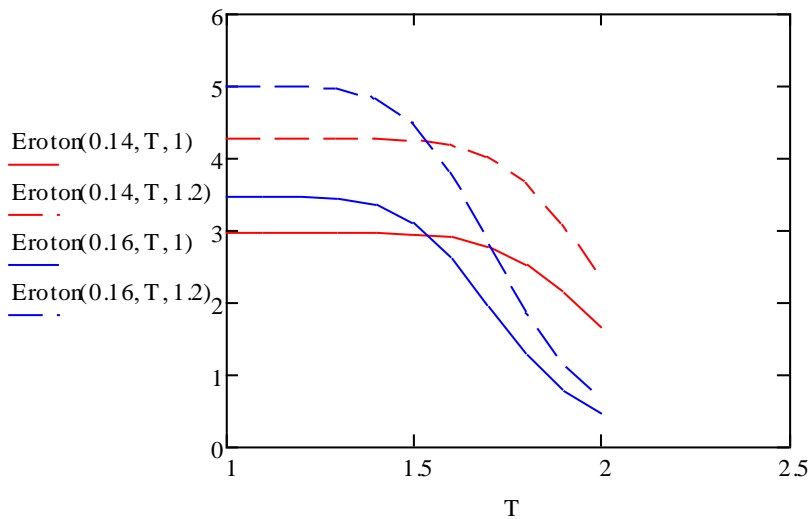


Διάγραμμα 3.3.2 - πηγή [1]: Μάζα rotons – θερμοκρασία

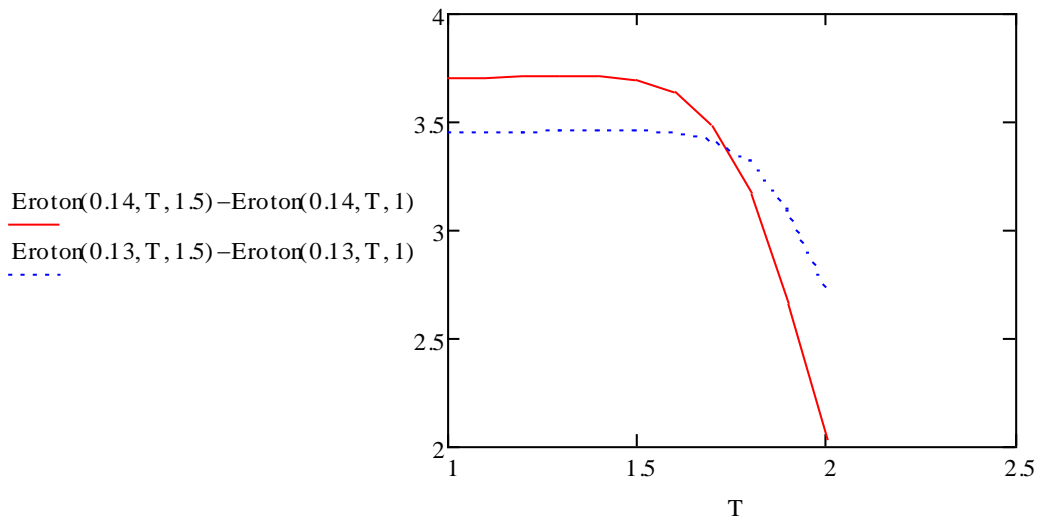
Βλέπουμε λοιπόν ότι σε σχέση με το διάγραμμα που παρατίθεται απ' τον Donnelly παρατηρούμε την ίδια πτωτική τάση στη φαινόμενη μάζα των ροτονίων, ωστόσο παρατηρούμε

μία ελαφρά μετατόπιση της μάζας τους . Υποπευόμαστε ότι το γεγονός αυτό οφείλεται στην αστοχία του υπολογιστικού προγράμματος να υπολογίσει με βέλτιστη ακρίβεια τις σταθερές.

Κατόπιν με βάση την προαναφερθείσα εξίσωση της ενέργειας των ροτονίων κατασκευάζουμε κατάλληλα γραφήματα εις τρόπον ώστε να δούμε τη μεταβολή της ενέργειάς τους ανάλογα με τη θερμοκρασία, συναρτήσει της πυκνότητας και της πίεσης του υπερρευστού.



Διάγραμμα 3.3.3: Ενέργεια rotons - θερμοκρασία



Διάγραμμα 3.3.0.4: Roton energy gap - θερμοκρασία

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών:

[MathCad references\Phonons - Maxons - Rotons.xmcd](#)

[1] The Calculated Thermodynamic Properties of Superfluid Helium 4 [Text references\Calculated therm Properties of Superfluid He4 NIST - Donnelly & Brooks 1977.pdf](#)

4 1^{ος} 2^{ος} και 3^{ος} ήχος στο Hell

Γενικά όπως γνωρίζουμε ο ήχος αποτελεί ένα κύμα μέσα σ' ένα μέσο. Το διάμηκες αυτό κύμα προέρχεται από τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των στοιχείων του ρευστού.

Όστόσο στην περίπτωση του κρυογονικού Ηλίου, ή οποιουδήποτε άλλου κρυογονικού ρευστού, παίζει ρόλο και το υπερρευστό που σχηματίζεται. Όταν ο ρευστό βρίσκεται σε θερμοκρασία κάτω από την κρίσιμη του ($T_c=2,1768$ για το He4) τότε, όπως προαναφέρθηκε, βρισκόμαστε στη 2^η περιοχή δηλαδή στην περιοχή εμφάνισης υπερρευστού, οπότε δουλεύουμε σαν να έχουμε δύο διαφορετικά υγρά.

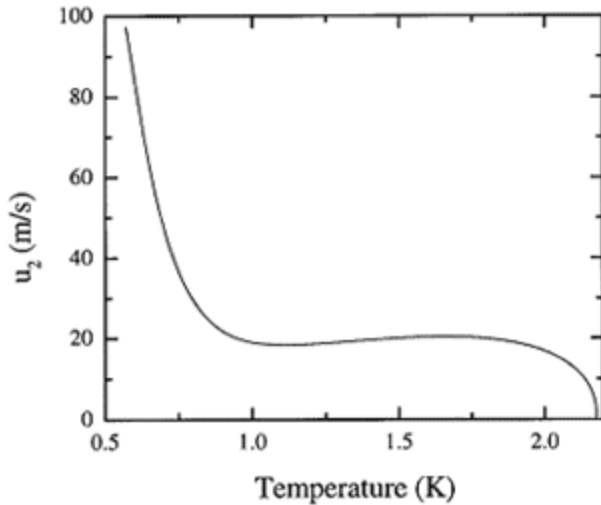
1^{ος} Ήχος :

Στην περίπτωση που βρισκόμαστε πάνω από την κρίσιμη θερμοκρασία όλα τα στοιχεία του ρευστού αλληλεπιδρούν κατά τα γνωστά μεταξύ τους, οπότε έχουμε τον 1^ο ήχο, όπως τον γνωρίζουμε σε οποιοδήποτε ρευστό.

2^{ος} Ήχος :

Όταν βρισκόμαστε κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία, τα στοιχεία του υπερρευστού δεν αλληλεπιδρούν με τριβές, ιξώδες, μεταξύ τους καθώς και με τα στοιχεία του κανονικού ρευστού. Για τον λόγο αυτό έχουμε δύο διαφορετικές κινήσεις μέσα στο σύστημα: την κίνηση του κανονικού ρευστού που επηρεάζεται από τα τοιχώματα και τα υπόλοιπα στοιχεία του και την κίνηση του υπερρευστού δια μέσου του κανονικού ρευστού χωρίς καμία αντίσταση. Σ' αυτού του είδους τις κινήσεις γενικά αξίζει να σημειωθεί ότι η πυκνότητα του συνολικού συστήματος σε κάθε σημείο παραμένει σταθερή, καθώς για τη διατήρηση του όγκου του συνολικού ρευστού η ροή των δύο είναι αντίθετη. Αυτού του είδους την κίνηση την ονομάζουμε 2^ο ήχο και έχει διαφορετική ταχύτητα διάδοσης από τον 1^ο ήχο στο ρευστό. Ενδεικτικά, για το He4 σε θερμοκρασία 1,8K η ταχύτητα του δεύτερου ήχου είναι περίπου 20m/s. Η ταχύτητα του δεύτερου ήχου μειώνεται όσο πλησιάζουμε στην κρίσιμη θερμοκρασία, όπου και μηδενίζεται, όταν φθάσουμε εκεί. Ανάλογα η ταχύτητα αυτή αυξάνεται όσο μειώνεται η θερμοκρασία και πλησιάζουμε στην πλήρη συμπύκνωση Bose-Einstein καθώς αυξάνεται το ποσοστό του υπερρευστού.

Άλλο ένα χαρακτηριστικό του 2^{ου} ήχου είναι ότι τελικά, καθώς η πυκνότητα παραμένει σταθερή, θεωρείται ότι κατά τη διάδοση του κύματος αυτού έχουμε ένα κύμα αύξησης και μείωσης της θερμοκρασίας από το κανονικό ρευστό και το υπερρευστό αντίστοιχα.

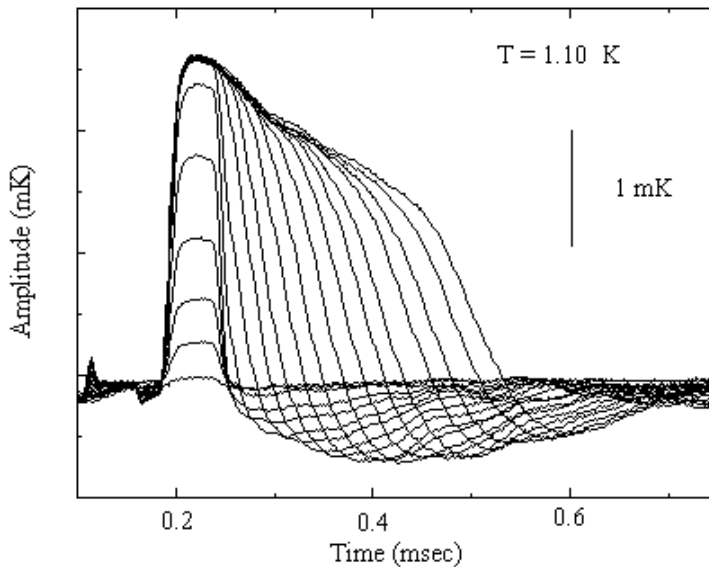


Διάγραμμα 4.1: ταχύτητα δεύτερου ήχου - θερμοκρασία

Στο ανωτέρω διάγραμμα βλέπουμε σχηματικά τη σχέση της θερμοκρασίας του συστήματος και της ταχύτητας του δεύτερου ήχου, για το 4He .

3^{ος} Ήχος :

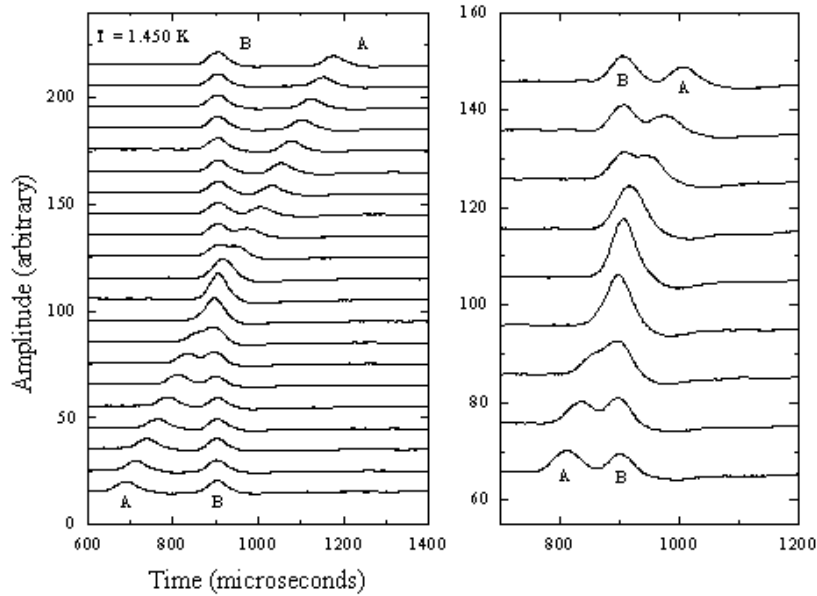
Ο τρίτος ήχος αποτελεί μία ειδικότερη περίπτωση. Θεωρούμε ένα film πολύ μικρού πάχους από ^3He στην κατάσταση II (ρευστό + υπερρευστό), το οποίο τοποθετούμε πάνω σε μία επιφάνεια. Κατ' αυτόν τον τρόπο, τα στοιχεία του κανονικού ρευστού αλληλεπιδρούν με την επιφάνεια μέσω τριβών, οπότε το κανονικό ρευστό μένει ακίνητο πάνω στην επιφάνεια. Τα στοιχεία, ωστόσο, του υπερρευστού δεν περιορίζονται από τις τριβές οπότε και κινούνται ελεύθερα στην επιφάνεια του ρευστού, σχηματίζοντας τελικά ένα επιφανειακό κύμα. Η ταχύτητα διάδοσης του κύματος αυτού είναι και πάλι διαφορετική από τον 1^ο ήχο και το 2^ο ήχο.



Διάγραμμα 4.2: Πλάτους 3ου ήχου – Χρόνου / πηγή people.umass.edu

Στο παραπάνω διάγραμμα βλέπουμε την εξέλιξη ενός επιφανειακού κύματος υπερρευστού (δηλαδή το κύμα του $3^{ου}$ ήχου) συναρτήσει με το χρόνο.

Όπως και σε όποιο κανονικό επιφανειακό κύμα, με την ύπαρξη παραπάνω από ενός κύματος υπερρευστού, παρατηρείται συμβολή. Αυτό συμβαίνει καθώς ναι μεν το υπερρευστό δεν αλληλεπιδρά με το κανονικό ρευστό, ωστόσο για να παραμείνει ο όγκος του συστήματος σταθερός τα δύο κύματα υπερρευστού δεν μπορούν να περάσουν το ένα μέσα από το άλλο. Το φαινόμενο της συμβολής δύο κυμάτων υπερρευστού μέσα στο χρόνο φαίνεται καλύτερα εποπτικά στο ακόλουθο διάγραμμα.



Διάγραμμα πλάτους 4.3: Πλάτους 3ου ήχου – Χρόνου / πηγή people.umass.edu

Τα παραπάνω διάγραμμα αναπαριστά τα κύματα του $3^{ου}$ ήχου στην επιφάνεια He II πάχους 4,9 ατομικά διαμέτρων.

5 Εύρεση θερμοκρασίας συμπύκνωσης Bose-Einstein

Όπως είδαμε παραπάνω το πιο σημαντικό ίσως κομμάτι για την ύπαρξη ενός υπερρευστού αποτελεί η δημιουργία συμπυκνώματος Bose-Einstein. Είναι λοιπόν σαφές ότι για την μελέτη οποιουδήποτε υπερρευστού είναι πολύ σημαντικό να μπορούμε να προσδιορίσουμε τη θερμοκρασία στην οποία η διαδικασία αυτή λαμβάνει χώρα.

Για να γίνει κατανοητή η παραπάνω φυσική διαδικασία, αναζητούμε τη θερμοκρασία συμπύκνωσης Bose-Einstein σ' ένα μποζονικό αέριο μέσα σε ερμητικά κλειστό πεπερασμένο κουτί.

Ένα τέτοιο αέριο αποτελεί το He4 καθώς με τον άρτιο αριθμό αδρονίων που έχει, έχει τελικά ακέραιο spin.

Θεωρούμε Hamiltonian

Όπου V ο όγκος του κουτιού

$$H = \frac{-\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{d^2}{dV^2} \right) \quad 5.1$$

Η εξίσωση Shroedinger που ακολουθούν τα σωματίδια του αερίου θα είναι της μορφής:

$$H \cdot \Psi(r) - V_0 \cdot \Psi(0) = E \cdot \Psi(r) \quad 5.2$$

Θεωρώντας ότι το αέριο βρίσκεται σε ερμητικά κλεισμένο κουτί, συνάγουμε ότι ο η κυματοσυνάρτηση των σωματιδίων του θα πρέπει να αποτελεί στάσιμο κύμα με κόμβους μηδενισμού στα άκρα του κουτιού.

Έστω οι διαστάσεις του κουτιού L_x, L_y, L_z , και τα τοιχώματα του κουτιού μπορούν να θεωρηθούν ως δυναμικό συνάρτησης Dirac, και στο εσωτερικό μηδενικό δυναμικό.

Άρα

$$H \cdot \Psi(r) = E \cdot \Psi(r) \quad 5.3$$

Και οι οριακές συνθήκες Dirichlet της εξίσωσης

$$\Psi(x + L, y) = \Psi(x, y) \quad 5.4$$

$$\Psi(x, L + y) = \Psi(x, y) \quad 5.5$$

Οι λύσεις της διαφορικής :

$$\Psi(r) = \frac{e^{i \cdot k \cdot r}}{\sqrt{V}} \quad 5.6$$

Και εφαρμόζοντας τις οριακές συνθήκες:

$$e^{i \cdot k_r \cdot Lr} = 1 \quad \text{όπου} \quad k_r = m \cdot \frac{2 \cdot \pi}{Lr} \quad m := 0, 1..M \quad 5.7$$

Οπότε:

$$E_k = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m} \quad 5.8$$

Αντίστοιχα για περισσότερα σωματίδια θα έχουμε:

$$H_N = \sum_N H \quad 5.9$$

με αντίστοιχα occupational numbers $n=1,2,..$

Καθώς το αέριο ακολουθεί κατανομή B-E γνωρίζουμε ότι οι occupational numbers θα είναι της μορφής:

$$N = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta \cdot (E_k - \mu)} - 1} \quad 5.10$$

όπου $\beta = \frac{1}{k_B \cdot T}$ με k_B τη σταθερά Boltzmann

Ανάγοντας λοιπόν στο θερμοδυναμικό όριο για τον όγκο του κουτιού προκύπτει:

$$N = \frac{V}{(2 \cdot \pi)^3} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta \cdot (E_k - \mu)} - 1} dk_x dk_y dk_z \quad 5.11$$

Θεωρώντας τον αντίστοιχο όγκο σφαίρας για τις διαστάσεις του κουτιού.

Μετασχηματίζοντας λοιπόν με χρήση της 5.11 έχουμε:

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{(4\pi)^2} \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E_k}}{\left[e^{\beta \cdot (E_k - \mu)} - 1 \right]} dE_k \quad 5.12$$

Θα χρειαστεί εν συνεχεία να υπολογίσουμε το phase density, κατά το οποίο χρειαζόμαστε το θερμικό μήκος κύματος κατά de Broglie**

****Απόδειξη του τύπου του μήκους κύματος κατά de Broglie**

Ξεκινώντας από την κατανομή M-B για ταχύτητες u των σωματιδίων:

$$f(u) = 4 \cdot \pi \cdot \sqrt{\left(\frac{m}{2 \cdot \pi \cdot k_B \cdot T}\right)^3} \cdot u^2 \cdot e^{\frac{-m \cdot u^2}{2 \cdot k_B \cdot T}} \quad 5.13$$

για το κλασικό μήκος κύματος γνωρίζουμε τη σχέση:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot u} \quad 5.14$$

κανονικοποιώντας λοιπόν την παραπάνω σχέση έχουμε:

$$\lambda_T = \frac{h}{m} \cdot \int_0^{\infty} \frac{f(u)}{u} du \quad 5.15$$

$$\int_0^{\infty} \frac{f(u)}{u} du \rightarrow \lim_{u \rightarrow \infty} \frac{4 \cdot T \cdot k_B \cdot e^{\frac{-m \cdot u^2}{2 \cdot T \cdot k_B}} \cdot \sqrt{\frac{m^3}{8 \cdot T^3 \cdot k_B^3}}}{\sqrt{\pi} \cdot m} + \frac{4 \cdot T \cdot k_B \cdot \sqrt{\frac{m^3}{8 \cdot T^3 \cdot k_B^3}}}{\sqrt{\pi} \cdot m} \quad 5.16$$

$$\frac{4 \cdot T \cdot k_B \cdot 0 \cdot \sqrt{\frac{m^3}{8 \cdot T^3 \cdot k_B^3}}}{\sqrt{\pi} \cdot m} \rightarrow 0 \quad 5.17$$

Άρα τελικά η σχέση που προκύπτει για το de Broglie μήκος κύματος είναι:

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \beta}{m}} \quad 5.18$$

Το phase density γνωρίζουμε ότι δίνεται απ' τον τύπο:

$$\rho_{ph} = \frac{N}{V} \cdot \lambda_T^3 \quad 5.19$$

άρα από τις 2,3 έχουμε:

$$\rho_{ph} = \frac{1}{(4\pi)^2} \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \int_0^\infty \frac{\sqrt{E_k}}{\left[e^{\beta \cdot (E_k - \mu)} - 1 \right]} dE_k \cdot \left(\sqrt{\frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \beta}{m}}\right)^3 \quad 5.20$$

απλοποιώντας έχουμε:

$$\rho_{ph} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^\infty \frac{\sqrt{E_k}}{\left[e^{\beta \cdot (E_k - \mu)} - 1 \right]} dE_k \quad 5.21$$

Στο όριο του phase density ο όρος βμ μπορεί να θεωρηθεί ότι τείνει στο 0 οπότε στο όριο του, αμελείται (αντίστοιχο συμπέρασμα βγαίνει και αν αναπτυχθεί η παραπάνω σχέση με τη μορφή δυναμοσειράς).

$$\rho_{\text{ph_lim}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E_k}}{(e^{E_k} - 1)} dE_k = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad 5.21$$

όπου ζ η συνάρτηση Riemann:

$$\zeta(x) = \frac{1}{\int_0^{\infty} x^{s-1} \cdot e^{-x} dx} \cdot \int_0^{\infty} \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx \quad 5.22$$

Είδαμε προηγούμενα ότι η κατανομή των σωματιδίων ανάλογα με την ενέργειά τους ακολουθούν, κατανομή B-E:

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta \cdot (E_k - \mu)} - 1} = N_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta \cdot (E_k - \mu)} - 1} \quad 5.23$$

όπου N_0 τα σωματίδια με μηδενική ενέργεια

Άρα για phase density $\rho_{\text{ph}} > \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$ για τα σωματίδια, από τη σχέση 4, θα έχουμε:

$$N = N_0 + \frac{2 \cdot V}{\sqrt{\pi} \cdot \lambda_T^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E_k}}{(e^{E_k} - 1)} dE_k \quad 5.24$$

$$N = N_0 + \frac{V}{\lambda_T^3} \cdot \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad 5.25$$

$$N_0 = N - V \left(\frac{m \cdot k_B \cdot T}{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad 5.26$$

Η μετατροπή του αερίου σε B-E condensate θα γίνει κατά τη μεταβολή όπου για πρώτη φορά $N_0=0 \rightarrow N_0>0$ (βλέποντας τις θερμοκρασίες να αυξάνονται). Λύνοντας λοιπόν ως προς τη θερμοκρασία βλέπουμε ότι η θερμοκρασία που δημιουργείται συμπύκνωμα τύπου B-E είναι :

$$T_c = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2}{m \cdot k_B} \cdot \left(\frac{N}{V \cdot \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right)^{\frac{2}{3}} \quad 5.27$$

Με αυτόν λοιπόν τον τρόπο γίνεται κατανοητό σε ποιο σημείο της θερμοκρασιακής κλίμακας συμβαίνει αυτού του είδους η συμπύκνωση καθώς και οι φυσικές αρχές που διέπουν την διαδικασία της συμπύκνωσης.

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών:

[MathCad references\B-E condensation temperature of ideal gas.xmcd](#)

6 Superfluid

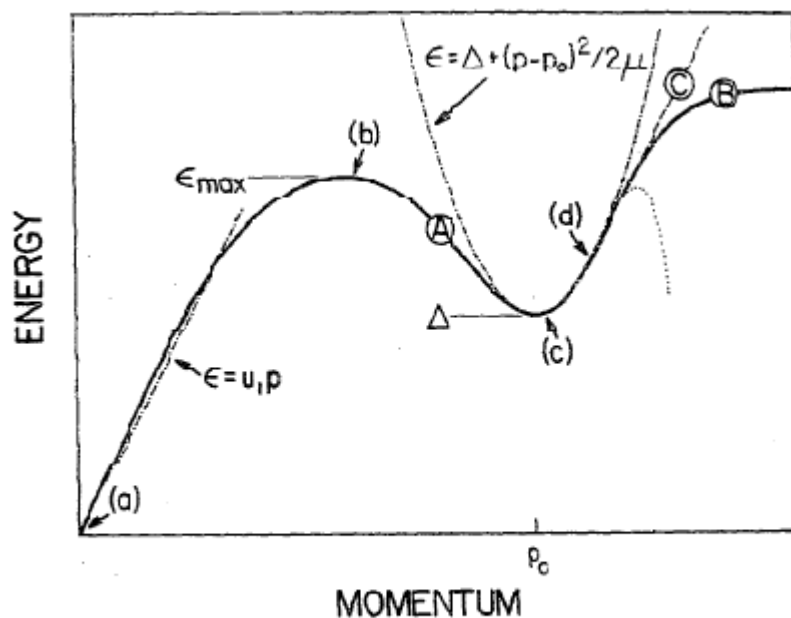
Μελέτη Κρυγονικού He4 σε θερμοκρασίες κάτω από το λ

Αναφερόμενη δημοσίευση:[1] [Text references\Calculated therm Properties of Superfluid He4 NIST - Donnelly & Brooks 1977.pdf](#)

Κατά γενική ομολογία όταν μελετάται το Ήλιο σε θερμοκρασίες κάτω από το λ, μελετάται ως σύστημα δύο υγρών, κανονικού ρευστού και υπερρευστού αντίστοιχα. Αυτό οδηγεί σε αποτελέσματα που κάνουν τη συμπεριφορά του υγρού Ηλίου στις θερμοκρασίες αυτές πολύ διαφορετική από τη συμπεριφορά ενός απλού ρευστού.

Κατεβαίνοντας σε ακόμη χαμηλότερες θερμοκρασίες, για να μελετήσουμε το Ήλιο, γίνεται χρήση της θεώρησης του Landau κατά την οποία όλο το υγρό θεωρείται υπερρευστό όταν βρισκόμαστε στο απόλυτο 0.

Όσο λοιπόν απομακρυνθεί κανείς από το απόλυτο μηδέν, παρατηρεί ότι στο σύστημα αρχίζουν και υπάρχουν διάφορες διεγέρσεις, οι οποίες όντας σε κβαντικό επίπεδο θεωρούνται και μελετώνται ως σωματίδια, τριών ειδών, όπως θα αναφερθούν εν συνεχεία.



Διάγραμμα 6.1 - πηγή [1]: συσχέτιση Ενέργειας -Ορμής

Τα σωματίδια αυτά και οι ενέργειές τους απεικονίζονται με τη μορφή του παραπάνω διαγράμματος που προτάθηκε αρχικά από το Landau, και αποτελεί ουσιαστικά τη διασπορά των ενεργειών με βάση την ορμή των διεγέρσεων.

Σκοπός του διαγράμματος αυτού, το οποίο έχει επαληθευτεί και από πιο σύγχρονες πειραματικές μελέτες με χρήση μη ελαστικών σκεδάσεων νετρονίων για την ανίχνευση και τον προσδιορισμό της ενέργειας των διεγέρσεων, χρησιμοποιείται με σκοπό τον προσδιορισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του Ηλίου στις θερμοκρασίες αυτές. Είναι σημαντικό εδώ να τονίσουμε ότι το διάγραμμα αυτό αφορά το HeII σε ισορροπία και όχι σε μεταβατικές φάσεις. Επίσης όπως θα δούμε στη συνέχεια, ο λόγος που γίνεται χρήση του διαγράμματος αυτού για τις θερμοδυναμικές ιδιότητες είναι ότι όπως θα φανεί από τις εξισώσεις η μορφή του διαγράμματος εξαρτάται μονοσήμαντα από την πίεση και τη θερμοκρασία.

Στη δημοσίευσή τους ο Donnelly και ο Brook έχουν κάνει μία μελέτη και προσδιορισμό του διαγράμματος αυτού με βάση τους πίνακες του Wilks του 1972, ωστόσο ζητούν στο μέλλον που θα υπάρχουν νεότερα πειραματικά στοιχεία να επαναληφθεί η μελέτη τους αυτή με βάση τα νέα δεδομένα. Αναφέρεται επίσης ότι στη δημοσίευση αυτή δεν γίνεται αναφορά/μελέτη των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων κοντά στη γραμμή λ, και για τέτοιου είδους στοιχεία, οι συγγραφείς παραπέμπουν σε αντίστοιχη εργασία του McCarty.

Στη μελέτη αυτή οι τιμές των πινάκων που αναφέρονται, ουσιαστικά έχουν προκύψει με χρήση των σχέσεων που έχουν δοθεί από τους Roberts και Donnelly, οι οποίες ήταν οι πρώτες σχέσεις που επέτρεψαν τον προσδιορισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων, απουσία εμπειρικών σχέσεων με μόνη είσοδο τα πειραματικά δεδομένα για την διασπορά των ενεργειών των διεγέρσεων όπως απεικονίστηκε στο παραπάνω διάγραμμα.

6.1 Θεωρητικό μέρος

Κατά τη μελέτη των διεγέρσεων κατά το Landau και όλους τους υπόλοιπους συγγραφείς, έχουν γίνει οι υποθέσεις ότι μέσα στο υπερρεστό Ήλιο οι διεγέρσεις μπορούν να αντιμετωπιστούν ως σωματίδια μέσα σε weakly interacting gas, καθώς και ότι οι διεγέρσεις αυτές υπακούουν στη στατιστική Bose-Einstein. Με βάση αυτό η πυκνότητα των διεγέρσεων περιγράφεται από τον ακόλουθο τύπο

$$n(p, T, P) = \frac{1}{h^3} \cdot \left[e^{\left(\frac{E(p, T, P)}{T} - 1 \right)} \right]^{-1} \quad 6.1.1 - \text{πηγή [1]}$$

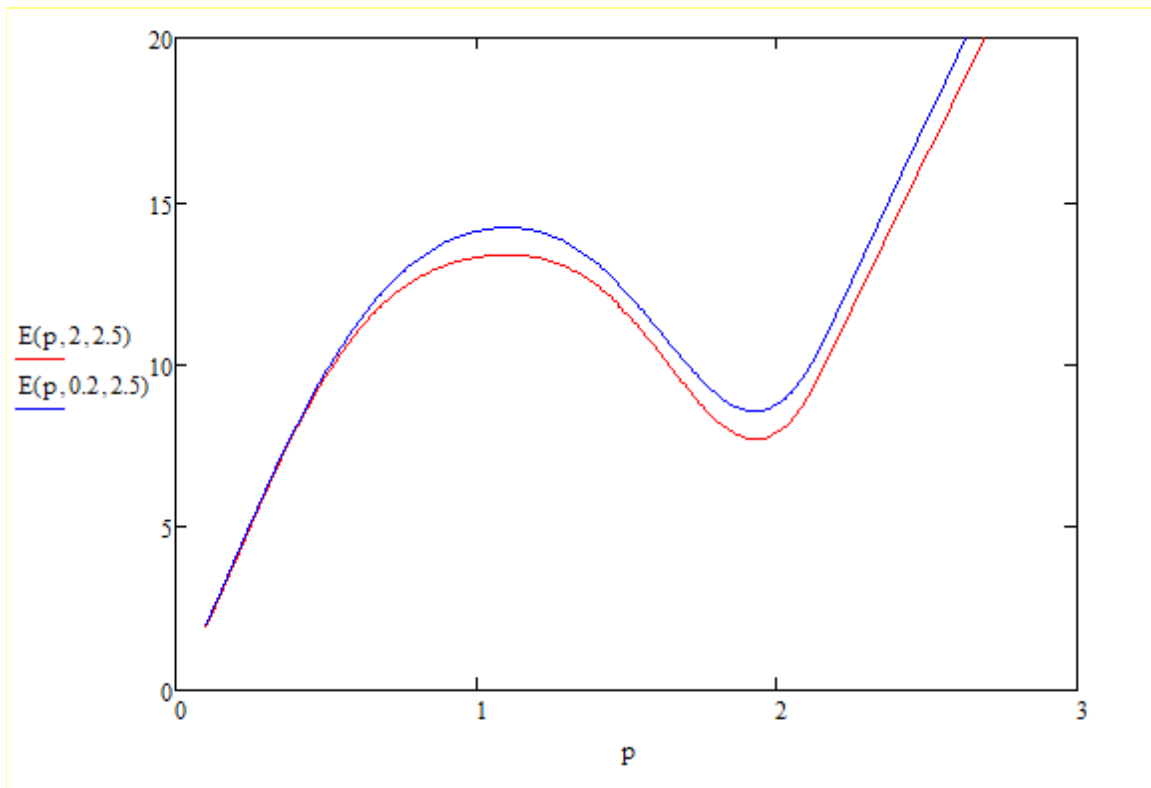
Με βάση την εξίσωση αυτή διαφαίνεται ότι οι περιοχές που έχουν ενδιαφέρον, και επιδρούν κυρίως στις θερμοδυναμικές ιδιότητες, είναι αυτές των χαμηλών ενεργειών.

Όπως φαίνεται στο διάγραμμα στην αρχή έχουμε μία γραμμική συσχέτιση, που αποτελεί την περιοχή των phonons, που καταλήγει σε ένα μέγιστο, την περιοχή των maxons, και κατόπιν ένα παραβολικό ελάχιστο που αποτελεί την περιοχή των rotons. Αυτές οι δύο τελευταίες περιοχές μας απασχολούν ιδιαίτερα καθώς έχουν και υψηλή ενέργεια και υψηλή πυκνότητα διεγέρσεων.

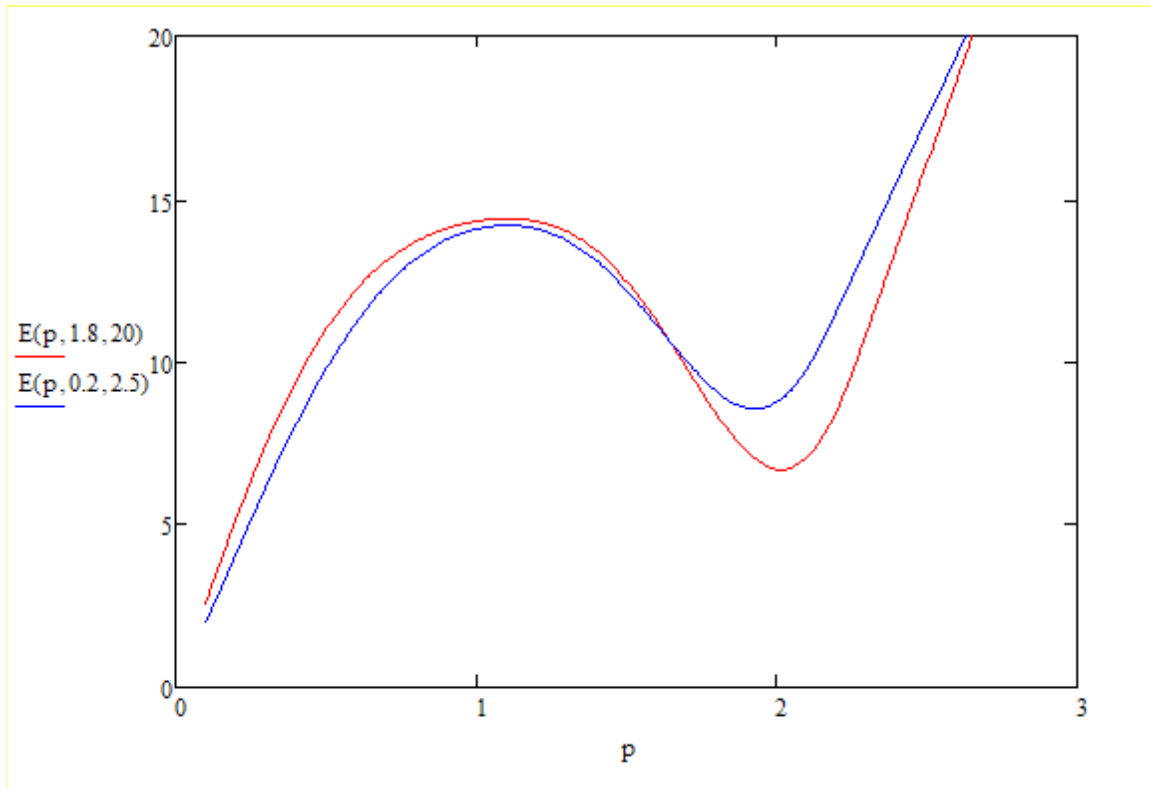
Συγκεκριμένα πειραματικά έχει παρατηρηθεί ότι για την περιοχή των rotons η πυκνότητα των διεγέρσεων είναι τόσο μεγάλη που μπορεί να περιγραφεί ικανοποιητικά από στατιστική Maxwell-Boltzmann.

Κατόπιν, οι συγγραφείς αναφέρουν ότι στην περίπτωση που κάποιος μπορούσε να γνωρίζει με ικανή ακρίβεια τη γραμμή διασποράς τότε θα μπορούσε θεωρητικά εύκολα να γίνει υπολογισμός που να μας περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις μέσα στο (θεωρούμενο ως αέριο) υπερρευστό, ωστόσο όπως αναφέρει κάτι τέτοιο την περίοδο της μελέτης δεν ήταν δυνατό.

Σε υψηλότερες θερμοκρασίες το πλάτος των διεγέρσεων αυξάνεται πολύ γρήγορα, για τα rotons ημιέυρος μέσου ύψους Γ να πλησιάζει την ενέργεια αυτή καθ' αυτή των διεγέρσεων καθώς το T πλησιάζει το T_λ . Αυτό σημαίνει ότι πλέον ο χρόνος ζωής των διεγέρσεων είναι πολύ μικρότερος. Επίσης παρατηρείται ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας και της πίεσης η διαφορά ενέργειας των rotons Δ μειώνεται.



Διάγραμμα 6.1.1: Ενέργειας (K) - Ορμής (A^{-1}) σε χαμηλές πιέσεις



Διάγραμμα 6.1.2: Ενέργειας (K) - Ορμής ($A^{\wedge}-1$) σύγκριση υψηλών-χαμηλών πιέσεων

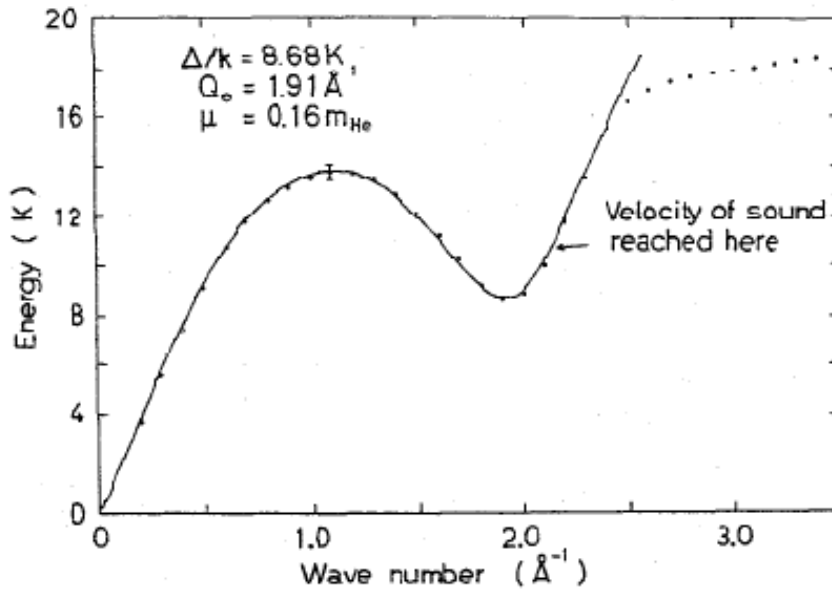
Από τα παραπάνω λοιπόν διαγράμματα, των οποίων οι αναλυτικές σχέσεις θα δοθούν στη συνέχεια της εργασίας, μπορούμε απευθείας να παρατηρήσουμε τα λεγόμενα των συγγραφέων, ότι δηλαδή με την θερμοκρασία να πλησιάζει στο λ , το Γ τείνει στην ενέργεια της διέγερσης, και ότι με την αύξηση της πίεσης και της θερμοκρασίας το Δ , δηλαδή η ενέργεια των rotons, μειώνεται όπως φαίνεται ξεκάθαρα από το 2ο διάγραμμα.

Κατά τη μελέτη αυτή, παρά τη γνώση από προηγούμενες δημοσιεύσεις ότι οι υπολογισμοί απαιτούν μία πιο αναλυτική θεωρία που να περιγράφει την γραμμή των διεγέρσεων, οι Roberts και Donnelly στη μελέτη τους έδειξαν ότι είναι δυνατός ο προσδιορισμός των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων συναρτήσει της θερμοκρασίας και της πίεσης παίρνοντας τη γραμμή διασποράς ως εξίσωση από τα πειραματικά δεδομένα και την πυκνότητα των διεγέρσεων να υπακούει στη στατιστική Bose-Einstein.

6.2 Μελέτη Πειραματικών Δεδομένων

Η μελέτη θα γίνει, όπως αναφέρουν οι συγγραφείς, με βάση τις τιμές που έχουν δοθεί από τους Bendt, Cowan και Yarnell, και έχουν μετρηθεί με χρήση μη ελαστικής σκέδασης νετρονίων.

Με βάση αυτές τις τιμές δίνεται το ακόλουθο διάγραμμα σε θερμοκρασία 1.1K σε πίεση κορεσμένου ατμού, το οποίο ακολουθεί πλήρως τα πειραματικά δεδομένα.



Διάγραμμα 6.2.1 - πηγή [1]: Συσχέτιση Ανηγμένης ενέργειας - ορμής

Το διάγραμμα αυτό θα μας απασχολήσει εν συνεχεία, όταν θα κληθούμε να συγκρίνουμε τις τιμές των δικών μας συναρτήσεων με αυτές των συναρτήσεων των συγγραφέων καθώς και με τις πειραματικές.

Η μελέτη των πειραματικών δεδομένων, ακόλουθα ξεκινά από την περιοχή των phonons. Με την ορμή να τείνει στο 0, πειραματικά αλλά και με βάση τις θεωρητικές προβλέψεις του Feenberg, θεωρείται ότι η συσχέτιση μεταξύ ενέργειας και ορμής είναι γραμμική. Αυτό ανάλογα σημαίνει:

$$\lim_{p \rightarrow 0} E(p, T, P) = u \cdot p$$

6.2.1 – πηγή [1]

όπου u_1 η πρώτη ταχύτητα του ήχου, της οποίας η τιμή μπορεί να βρεθεί είτε με το όριο της συνάρτησης διασποράς στο μηδέν είτε, όπως γίνεται στην παρούσα εργασία για μεγαλύτερη ακρίβεια και χρήση της ως δεδομένο, με τις τιμές που έχουν μετρηθεί για την ταχύτητα αυτή πειραματικά.

Οι συγγραφείς εδώ επίσης σημειώνουν ότι αυτή η θεώρηση της γραμμικότητας μπορεί να αποτελέσει πρόβλημα κατά την άνοδο των θερμοκρασιών, οπότε αυτό είναι ένα θέμα που παρακάτω θα αντιμετωπιστεί όχι με απόλυτη θεώρηση γραμμικότητας αλλά με τοποθέτηση κατάλληλων οριακών συνθηκών στις εξισώσεις, ώστε να υπάρχει ικανοποιητική ακρίβεια στις περιοχές αυτές.

Εν συνεχεία για την κατάστροψη της εξίσωσης της διασποράς πρέπει να μας είναι γνωστή η ενέργεια των maxons , δηλαδή το πρώτο τοπικό μέγιστο της συνάρτησης διασποράς.

Για την εύρεση της ενέργειας αυτής οι συγγραφείς έχουν κάνει χρήση πειραματικών δεδομένων από διάφορες πηγές και αναφέρεται ότι γενικά σε όλα τα πειράματα δεν παρατηρείται κάποια εξάρτηση της ενέργειας των maxons από τη θερμοκρασία. Συνεπώς οι συγγραφείς έχοντας τις πειραματικές αυτές τιμές προτείνουν την ακόλουθη συνάρτηση, η οποία όπως φαίνεται εξαρτάται μόνο από την πυκνότητα:

Maxon Equation

$$\begin{aligned} E_0 &= -216.5672 \\ E_1 &= 3998.6005 \\ E_2 &= -23028.6027 \\ E_3 &= 44199.7232 \end{aligned}$$

Πίνακας 6.2.1 – πηγή [1]

$$E(\rho) := E_0 + E_1 \cdot \rho + E_2 \cdot \rho^2 + E_3 \cdot \rho^3$$

6.2.2 – πηγή [1]

Ωστόσο έχοντας τις πειραματικές τιμές των συγγραφέων κρίναμε κι εμείς αναγκαίο να δημιουργήσουμε μία αντίστοιχη πολυωνυμική συνάρτηση η οποία να μη συνδέει άμεσα την ενέργεια των maxons με την πυκνότητα αλλά με την πίεση και τη θερμοκρασία. Επιλέγουμε να προβούμε στο βήμα αυτό από τη μία για έλεγχο των τιμών των συγγραφέων κι από την άλλη θεωρούμε ότι ίσως με μία πιο μακροσκελή συσχέτιση που να προέρχεται από πιο σύγχρονο υπολογιστικό πρόγραμμα πιθανώς να μπορέσουμε να περιγράψουμε και την εξάρτηση της ενέργειας των maxons από τη θερμοκρασία όσο μικρή κι αν είναι αυτή.

Οπότε η συνάρτηση τελικά που χρησιμοποιούμε είναι:

$$r(T,P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(C_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right) \quad 6.2.3$$

Με τους αντίστοιχους συντελεστές που προκύπτουν από το υπολογιστικό πρόγραμμα να είναι:

$$E_{min} := 12.69 \text{ K}$$

$$E_{max}(T,P) := r(T,P) + E_{min} \quad 6.2.4$$

C	1	2	3	4
1	1.12340783680785E+00	1.90278674702429E-01	-1.76107431289385E-02	1.09136759469051E-03
2	2.32227381107554E-02	-7.10963906175820E-03	3.68553068869350E-03	-6.85845438143984E-04
3	-1.08639726452818E-01	3.04943412520287E-02	-1.53843029153328E-02	2.83722430405318E-03
4	2.33911782560733E-01	-5.66933590653491E-02	2.77872712566193E-02	-5.07473939528078E-03
5	-2.62545519041840E-01	4.90600121435995E-02	-2.39755236760623E-02	4.38105387824810E-03
6	1.59440262179954E-01	-1.95910197629305E-02	9.82806120126067E-03	-1.81317391632544E-03
7	-4.97306384892706E-02	2.75870296075948E-03	-1.53110688355868E-03	2.88908977956630E-04
C	5	6	7	
1	-4.59350872893183E-05	1.13374985923213E-06	-1.19833527549803E-08	
2	5.56791945705498E-05	-2.06339481940072E-06	2.86517683639059E-08	
3	-2.29824551328747E-04	8.52231918822012E-06	-1.18559888123124E-07	
4	4.10349235212432E-04	-1.52402176802582E-05	2.12620395322912E-07	
5	-3.55564665431676E-04	1.32730319474259E-05	-1.86173937543055E-07	
6	1.48340852802602E-04	-5.58070432213910E-06	7.88447826125048E-08	
7	-2.39296453503834E-05	9.09228454787620E-07	-1.29553963274760E-08	

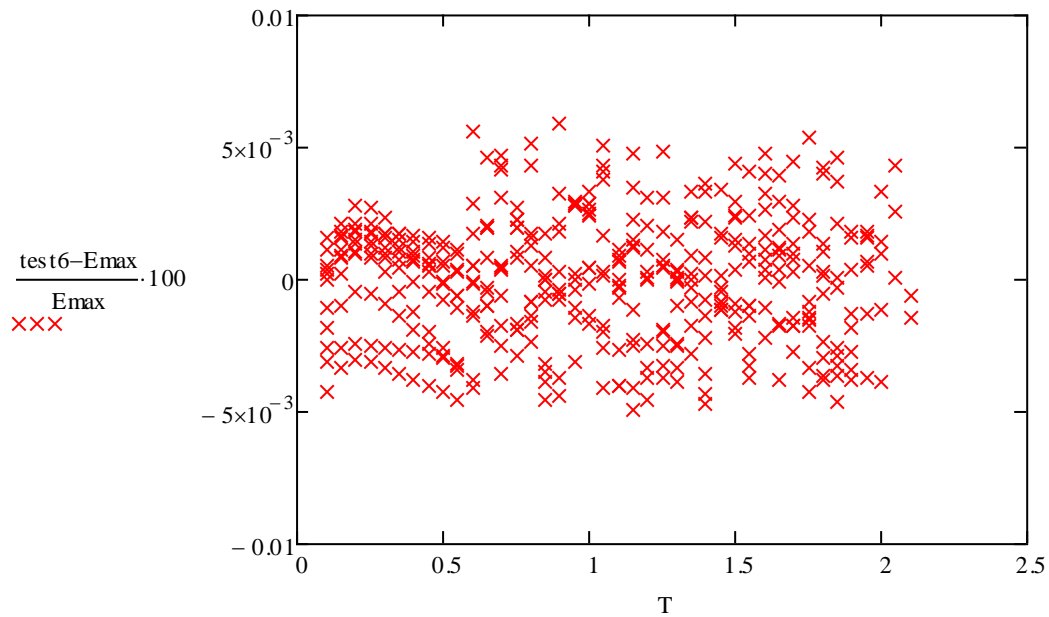
Πίνακας 6.2.2: Σταθερές εξίσωσης 6.2.3

Η εξίσωση παίρνει τιμές σε K και atm και δίνει τιμές σε K

Σημειώνεται ότι η παραπάνω εξίσωση δίδεται κατά αυτή τη μορφή, καθώς κατά την υπολογιστική διαδικασία αφαιρέσαμε την ελάχιστη των τιμών και έγινε regression στη διαφορά τους, ώστε να κερδίσουμε σε ακρίβεια, μην αναγκάζοντας το πρόγραμμα να δουλεύει με μεγαλύτερους αριθμούς, οπότε στην τελική συνάρτηση πρέπει να προστεθεί η τιμή αυτή.

Κατόπιν καθώς πλέον αυτή αποτελεί δική μας συνάρτηση κρίνεται αναγκαίο να συγκριθούν τα αποτελέσματα της συνάρτησης αυτής με τις πειραματικές τιμές.

Η απόκλιση που έχει το παραπάνω regression από τις πειραματικές τιμές είναι:



Διάγραμμα 6.2.2: % απόκλισης της συνάρτησης E_{max60} από τις πειραματικές τιμές της ενέργειας των *Maxons* συναρτήσει της θερμοκρασίας σε [K]

Βλέπουμε, λοιπόν ότι οι αποκλίσεις που έχουμε είναι εξαιρετικά μικρές οπότε συνεχίζουμε την επεξεργασία με αυτή τη συνάρτηση που δημιουργήσαμε.

$$E_{max}(T, P) := E_{max60}(T, P) \quad 6.2.5$$

Έπειτα θέλουμε να συγκρίνουμε τη συνάρτησή μας αυτή με τη συνάρτηση που έχει δοθεί από τους συγγραφείς. Καθώς όμως η συνάρτηση των συγγραφέων συσχετίζει την ενέργεια με την πυκνότητα και η δικιά μας την ενέργεια με την θερμοκρασία και την πίεση, πρέπει να συσχετίσουμε την πυκνότητα με τη θερμοκρασία και την πίεση. Αυτό το κάνουμε με παρόμοιο τρόπο καθώς κάνουμε χρήση του ίδιου υπολογιστικού προγράμματος για τις πειραματικές τιμές της πυκνότητας με την θερμοκρασία και την πίεση, οπότε έχουμε:

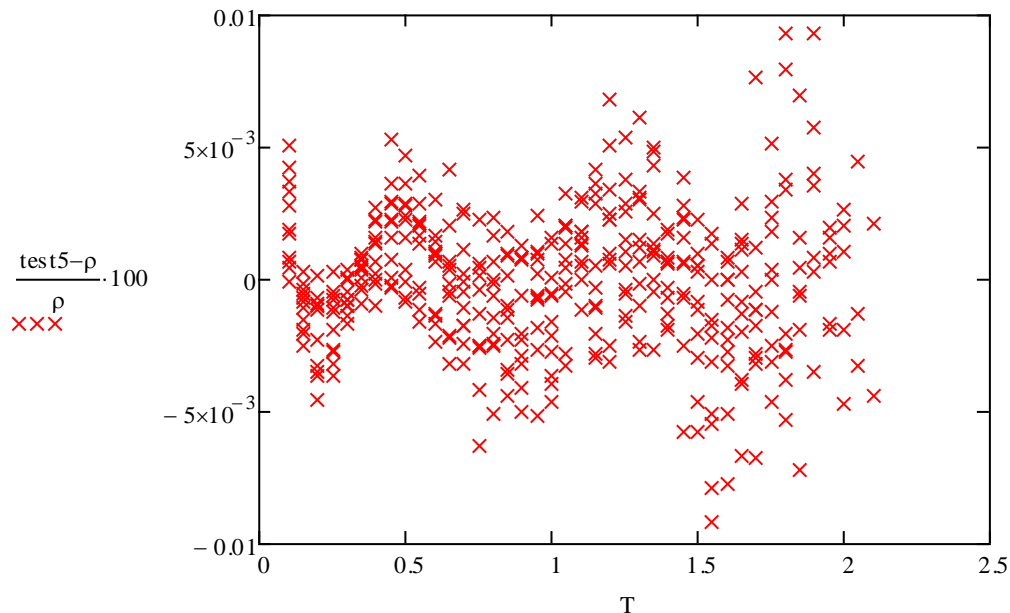
$$m_{he} := 4.00254027 \quad 6.2.6$$

C	1	2	3	4
1	1.45139150110117E+02	1.78480423137078E+00	-5.86949444755787E-02	2.31507519245964E-03
2	-1.38124955351028E-01	-8.61220776456178E-02	1.80469004872112E-02	4.35064563498225E-04
3	6.37365170017148E-01	2.9390688332453E-01	-4.02845974593528E-02	-7.90198351012986E-03
4	-1.18037818659294E+00	-4.70072947160410E-01	1.08193642790865E-02	2.67699430229499E-02
5	9.38954139855644E-01	4.21539756338472E-01	2.46735397602840E-02	-3.15463131820886E-02
6	-3.49516739257827E-01	-1.89162287929465E-01	-1.87164873087587E-02	1.54704655168743E-02
7	5.94512848290045E-02	3.42036515273812E-02	3.91821909968359E-03	-2.73155766802971E-03
C	5	6	7	
1	-5.32349485669305E-05	1.87605033600500E-07	9.26433119384490E-09	
2	-2.73819378302382E-04	1.63960275327994E-05	-2.87650937164275E-07	
3	1.62785018282992E-03	-8.61534424402031E-05	1.44329021236430E-06	
4	-4.01042105377878E-03	1.96347419827969E-04	-3.18075728201371E-06	
5	4.26742672361042E-03	-2.02344667651739E-04	3.23408552924799E-06	
6	-2.01842369006380E-03	9.46961855121219E-05	-1.51055153810163E-06	
7	3.51737498663273E-04	-1.64850646473686E-05	2.64111224391997E-07	

Πίνακας 6.2.3: Σταθερές εξίσωσης 6.2.7

$$r_{\text{exp}}(T, P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(C_{i+1, j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right)$$

6.2.7



Διάγραμμα 6.2.3: % απόκλισης της συνάρτησης r από τις πειραματικές τιμές της πυκνότητας συναρτήσεως της θερμοκρασίας σε [K]

$$\rho_r(T,P) := r(T,P)$$

6.2.8

Οπότε συγκρίνοντας και πάλι με τις πειραματικές τιμές βλέπουμε ότι έχουμε πολύ καλή ακρίβεια.

Έχουμε λοιπόν μέχρι στιγμής τη δυνατότητα να υπολογίσουμε την ενέργεια των μαχονς με τρεις διαφορετικούς τρόπους, θέλουμε οπότε να επαληθεύσουμε εάν μας δίνουν κοινά αποτελέσματα ή όχι.

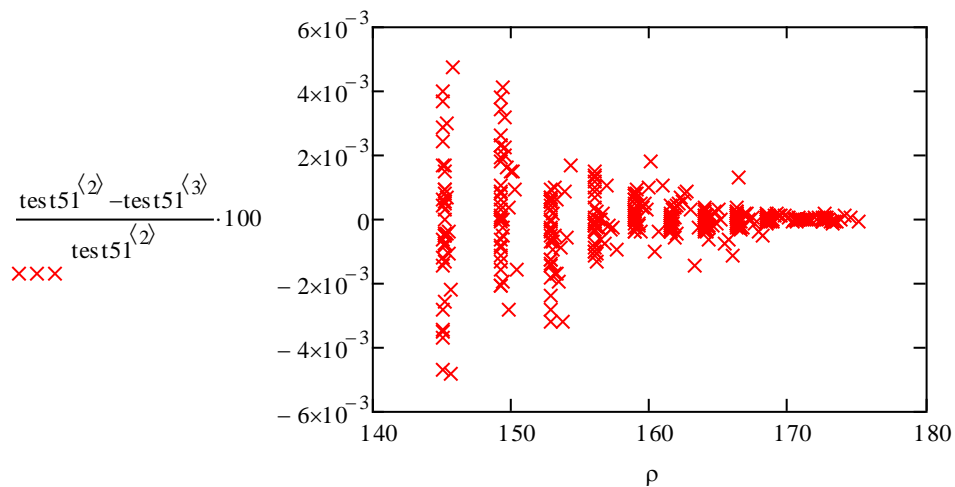
Αρχικά λοιπόν για κάποιες μεμονωμένες τιμές βλέπουμε ότι υπάρχει εξαιρετική σύγκλιση:

$$E(0.15603) = 14.5921552327$$

$$E_{\max}(0.6, 7.5) = 14.5918223954$$

$$E(\rho_r(0.6, 7.5) \cdot 10^{-3}) = 14.5920055607$$

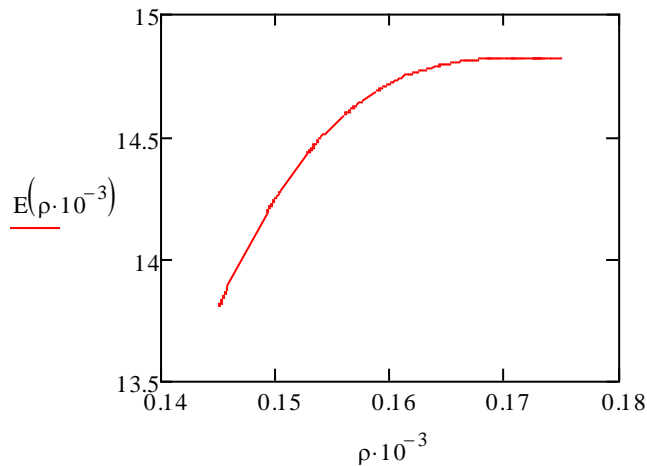
6.2.9



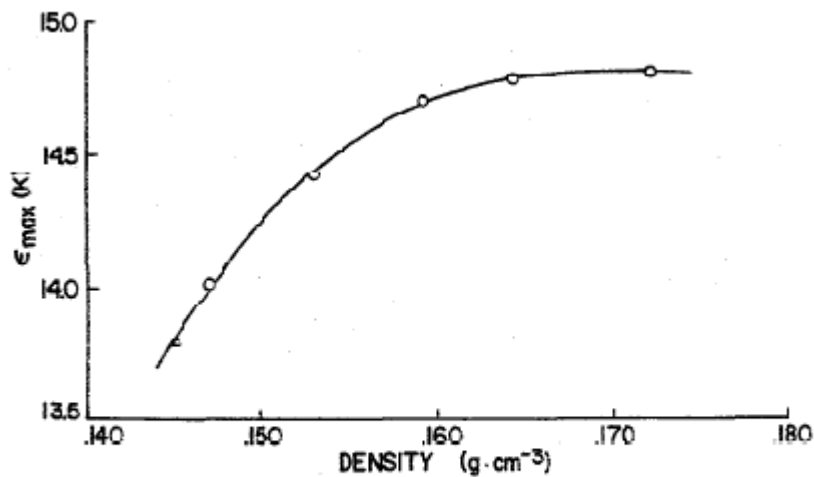
Διάγραμμα 1.2.4: Σύγκριση των αποτελεσμάτων των τριών εξισώσεων για την ενέργεια των Maxons

Βλέπουμε λοιπόν και εδώ ότι οι τιμές πρακτικά συγκλίνουν απόλυτα καθώς έχουν αποκλίσεις της τάξεως του 0,001%

Με βάση λοιπόν το παραπάνω θέλουμε να αναπαράγουμε το αντίστοιχο διάγραμμα των συγγραφέων για την ενέργεια των μαχονς συναρτήσει με την πυκνότητα.



Διάγραμμα 6.2.5: ενέργειας [K] των Μαχονς συναρτήσει της πυκνότητας [kg/m³]



Διάγραμμα 6.2.6 - πηγή [1]: Ενέργεια μαχονς – πυκνότητα

Βλέπουμε λοιπόν ότι τα δύο αυτά διαγράμματα συμπίπτουν, συνεπώς είμαστε σε θέση να είμαστε ακόμη πιο σίγουροι για τις τιμές των συναρτήσεων που κατασκευάσαμε πρωθύστερα καθώς εκτός από τις πινακοποιημένες τιμές συμπίπτουν και με το διάγραμμα.

Παρατήρηση

$$\rho(T, P) := \rho_r(T, P)$$

6.2.10

Με την παραπάνω εξίσωση να παίρνει τιμές σε K και atm και να δίνει τιμές σε kg/m³, καθώς λοιπόν η παρούσα εργασία δέχεται παντού τιμές g/cm³ στην πυκνότητα είναι σημαντικό στην παρούσα της μορφή, όπου η πυκνότητα χρησιμοποιείται, να γίνεται ο κατάλληλος μετασχηματισμός.

Rotons

Κατόπιν, πρέπει να προσδιοριστεί η ενέργεια στο χωρίο των rotons, σύμφωνα με τη θεώρηση του Landau. Το χωρίου του ελαχίστου των rotons μπορεί να περιγραφεί ικανοποιητικά από μία παραβολή, η οποία θα είναι της μορφής:

$$\varepsilon_{\text{roton}} = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2 \cdot \mu}$$

6.2.11 – πηγή [1]

$$p_0(p) := \text{hbar} \cdot 3.64 \left(\rho \cdot 10^{-3} \right)^{\frac{1}{3}}$$

6.2.12

Με το p_0 να βγαίνει σε A⁻¹ και την πυκνότητα να εισάγεται σε ατμόσφαιρες.

Εν συνεχεία ο Donnelly έχει παραθέσει κάποιες απλές σχέσεις που συσχετίζουν το Δ και το μ με την πυκνότητα σε T=0K, καθώς και εν συνεχεία σε ανώτερες θερμοκρασίες.

$$\Delta_0(\rho) := k_B \cdot (16.9957.31 \cdot \rho)$$

6.2.13 – πηγή [1]

ρ (atm), k boltzmann constant, Δ (K)

$$\mu_0(\rho) := (0.32 - 1.103\rho)$$

μ_0 (m)

6.2.14 – πηγή [1]

Και αντίστοιχα συσχετίζοντας αυτές τις δύο σχέσεις για υψηλότερες θερμοκρασίες έχουμε:

$$\frac{\mu(\rho, T)}{\mu_0(\rho)} = \frac{\Delta(\rho, T)}{\Delta_0(\rho)} \quad 6.2.15 - \text{πηγή [1]}$$

Επίσης εκτός από το παραπάνω οι Donnelly και Brooks έχουν αναφέρει και την ακόλουθη σχέση για τον απευθείας προσδιορισμό της ελάχιστης ενέργειας των rotons συναρτήσει θερμοκρασίας και πυκνότητας:

$$\Delta(\rho, T) = \Delta_0(\rho) - k_B \cdot \frac{\rho n}{\rho} \cdot T \cdot \left(1 - \frac{a' \cdot Nr}{T} \right) \quad 6.2.16 - \text{πηγή [1]}$$

Nr = roton number density
 ρ n: normal fluid density

$$a' := 8.75 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3 \cdot \text{K} \quad 6.2.17 - \text{πηγή [1]}$$

Η παραπάνω σχέση ωστόσο όπως αναφέρουν και η ίδιοι δίνει μία καλή περιγραφή για τα αποτελέσματα του Dietrich, ωστόσο με σφάλμα της τάξεως του 20% στην ενέργεια. Γι' αυτό το λόγο οι συγγραφείς προχώρησαν σε εφαρμογή ελαχίστων τετραγώνων στα πειραματικά αποτελέσματα, και τελικά δίνουν την ακόλουθη συνάρτηση για την ενέργεια και τη μάζα των rotons αντίστοιχα.

$$\Delta(\rho, T) = \left[\Delta_1 + \Delta_2 \cdot \rho + \Delta_3 \cdot e^{t(\rho, T)} \cdot \frac{T}{\rho} + \Delta_4 \cdot e^{2t(\rho, T)} \cdot \rho + \left(\Delta_5 + \Delta_6 \cdot \rho + \Delta_7 \cdot \rho^2 \right) \cdot e^{3t(\rho, T)} \right] \cdot k \quad 6.2.18 - \text{πηγή [1]}$$

Και

$$\mu(\rho, T) = U_1 + U_2 e^{t(\rho, T)} \cdot T + U_3 \cdot \rho + U_4 \cdot e^{t(\rho, T)} \cdot \frac{T}{\rho} + (U_5 + U_6 \cdot \rho) \cdot e^{3t(\rho, T)} \quad 6.2.19 - \text{πηγή [1]}$$

Με σταθερές U και Δ να είναι:

$$\begin{aligned}\Delta 1 &= 1.741647E+01 \\ \Delta 2 &= -6.048823E+01 \\ \Delta 3 &= -5.307478E-01 \\ \Delta 4 &= 1.817261E+04 \\ \Delta 5 &= -1.351398E+07 \\ \Delta 6 &= 1.621499E+08 \\ \Delta 7 &= -5.062661E+08\end{aligned}$$

Πίνακας 6.2.4 – πηγή [1]
Σταθερές εξίσωσης 6.2.18

$$\begin{aligned}U 1 &= 3.420601E-01 \\ U 2 &= 1.239037E+00 \\ U 3 &= -1.238153E+00 \\ U 4 &= -2.234561E-01 \\ U 5 &= 1.342995E+04 \\ U 6 &= 6.321971E+05\end{aligned}$$

Πίνακας 6.2.5 – πηγή [1]
Σταθερές εξίσωσης 6.2.19

$$t(\rho, T) := \frac{-(16.99 - 57.31\rho)}{T}$$

6.2.20 – πηγή [1]

$$\Delta(\rho, T) := \left[\Delta_1 + \Delta_2 \cdot \rho + \Delta_3 \cdot e^{t(\rho, T)} \cdot \frac{T}{\rho} + \Delta_4 \cdot e^{2t(\rho, T)} \cdot \rho + \left(\Delta_5 + \Delta_6 \cdot \rho + \Delta_7 \cdot \rho^2 \right) \cdot e^{3 \cdot t(\rho, T)} \right] \quad 6.2.21 - \text{πηγή [1]}$$

$$\mu(\rho, T) := \left[U_1 + U_2 e^{t(\rho, T)} \cdot T + U_3 \cdot \rho + U_4 \cdot e^{t(\rho, T)} \cdot \frac{T}{\rho} + \left(U_5 + U_6 \cdot \rho \right) \cdot e^{3t(\rho, T)} \right] \quad 6.2.22 - \text{πηγή [1]}$$

Για τους δικούς μας υπολογισμούς, όπως προαναφέρθηκε, οι παραπάνω εξισώσεις πρέπει να μετασηματιστούν, ώστε να παίρνουν σωστές μονάδες στην πυκνότητα, οπότε ακολούθως έχουμε:

$$\Delta(T, P) := \Delta(\rho(T, P) \cdot 10^{-3}, T)$$

6.2.23

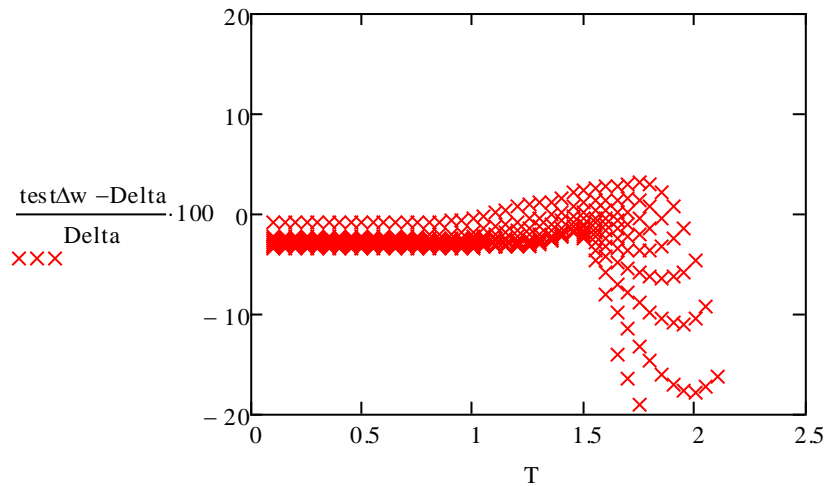
$$\underline{\mu}(T, P) := \mu(\rho(T, P) \cdot 10^{-3}, T)$$

6.2.24

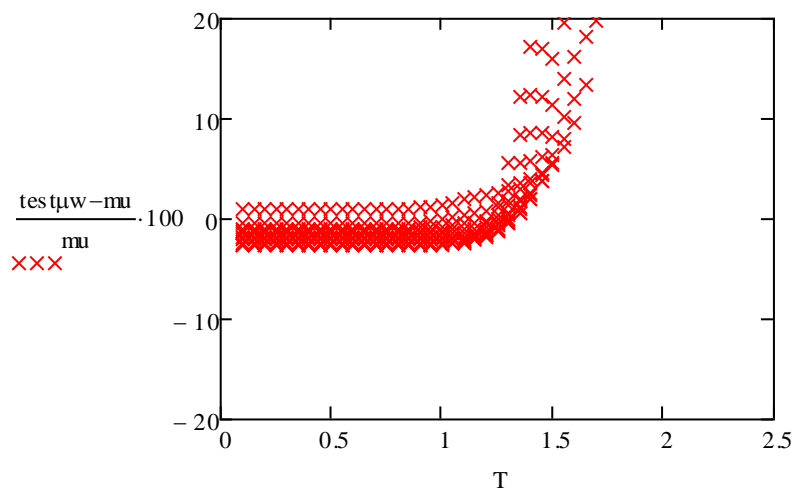
Οι παραπάνω εξισώσεις που περιγράφουν την περιοχή των rotors

Θα πραγματοποιήσουμε τώρα και πάλι έλεγχο των τιμών της συνάρτησης των συγγραφέων σε σχέση με τις πειραματικές.

Ελέγχουμε κατόπιν τις τιμές των συναρτήσεων



Διάγραμμα 6.2.7: % απόκλισης της συνάρτησης από τις πειραματικές τιμές του $\Delta[K]$ συναρτήσει της θερμοκρασίας $[K]$



Διάγραμμα 6.2.8: % απόκλισης της συνάρτησης από τις πειραματικές τιμές του $\mu[m.he]$ συναρτήσει της θερμοκρασίας $[K]$

Και στα δύο μεγέθη παρατηρούμε ότι οι συναρτήσεις των συγγραφέων μας δίνουν αποτελέσματα κοντά στα πειραματικά σε χαμηλότερες θερμοκρασίες, ωστόσο και αυτά με

σφάλματα της τάξεως του 10%, ενώ σε υψηλότερες οι τιμές τους αποκλίνουν αρκετά.

Για το λόγο αυτό μπαίνουμε και πάλι στη διαδικασία να περάσουμε τις ίδιες πειραματικές τιμές από δικό μας υπολογιστικό κώδικα, ώστε να μπορέσουμε να βελτιώσουμε τα αποτελέσματα αυτά.

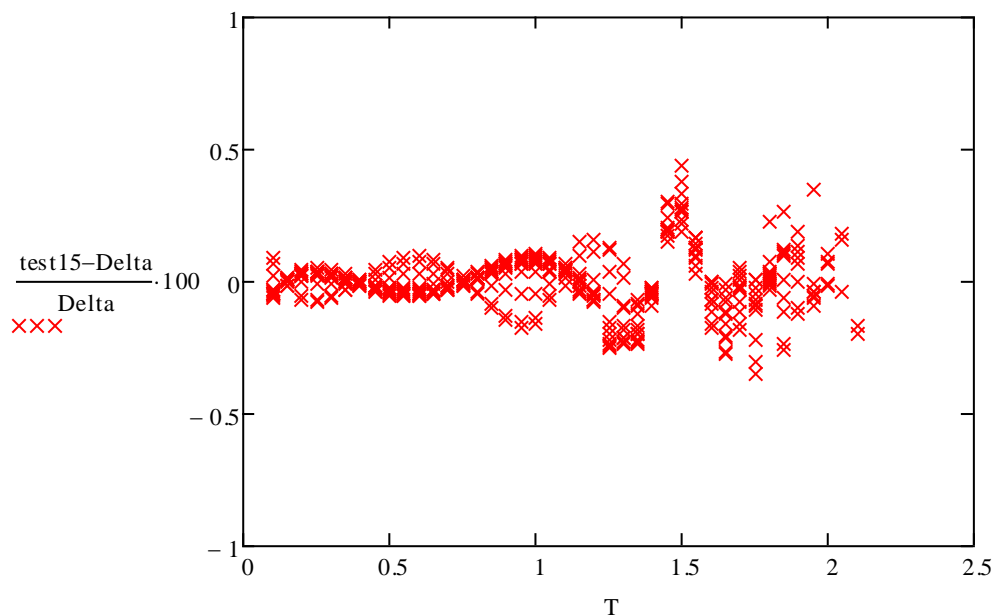
Για το Δ

C	1	2	3	4
1	8.75912075499844E+00	-2.59220879950556E-02	-1.93089807563059E-02	2.56340461074565E-03
2	-5.62905179068936E-01	-1.03619740345193E-01	9.60890667616678E-02	-1.51373866970690E-02
3	1.96510742552822E+00	4.36793701674245E-01	-3.95608076564197E-01	6.40877932770557E-02
4	-2.68685590350211E+00	-7.82619871705514E-01	6.92658803305416E-01	-1.16279410445259E-01
5	1.54271426465430E+00	6.73904037658949E-01	-5.79204969785905E-01	1.01331034993240E-01
6	-3.78023101501382E-01	-2.85080758182889E-01	2.35277041998888E-01	-4.27238638143685E-02
7	1.97212100398805E-02	4.71561626268643E-02	-3.74712740233152E-02	7.00584590706022E-03
C	5	6	7	
1	-1.53111012105538E-04	4.42178409056354E-06	-5.03044291141218E-08	
2	1.03733133702550E-03	-3.34843340602857E-05	4.16548713875004E-07	
3	-4.49299480302568E-03	1.47527199384705E-04	-1.85844695517942E-06	
4	8.37623400031738E-03	-2.80475428124019E-04	3.58376383602310E-06	
5	-7.51973840976014E-03	2.57092243253785E-04	-3.33438009583094E-06	
6	3.25480826404864E-03	-1.13317186964728E-04	1.48908951549789E-06	
7	-5.45083252114345E-04	1.92606266788678E-05	-2.55939822304271E-07	

Πίνακας 6.2.6: Σταθερές εξίσωσης 6.2.25

$$r_{\text{max}}(T, P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(C_{i+1, j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right) \quad 6.2.25$$

$$r(T, P) := r(T, P) \quad 6.2.26$$



Διάγραμμα 6.2.9: % απόκλισης της συνάρτησης $dstyle60$ από τις πειραματικές τιμές του $\Delta [K]$ συναρτήσει της θερμοκρασίας $[K]$

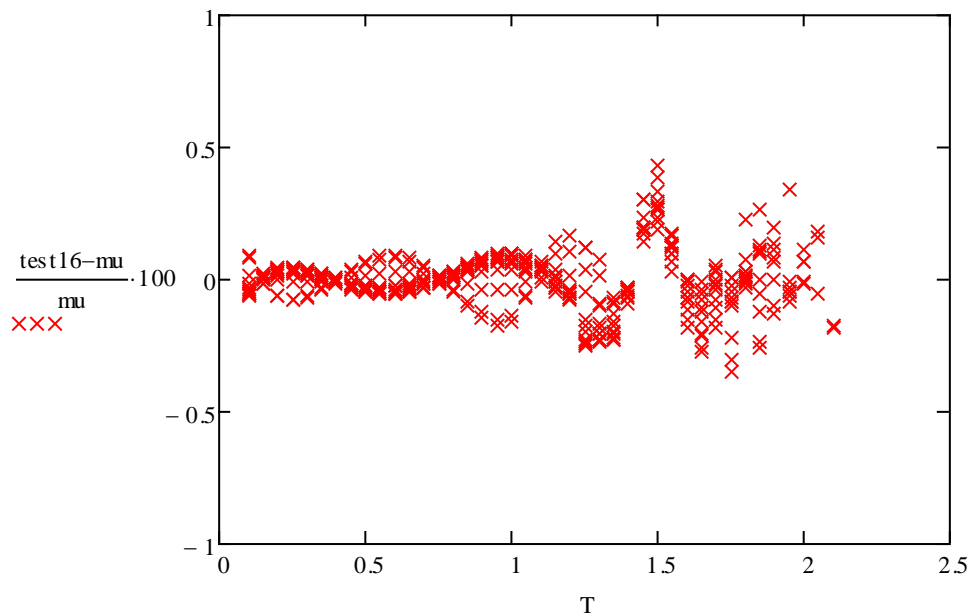
Και αντίστοιχα για το μ

C	1	2	3	4
1	1.61601574323651E-01	-2.12535868851853E-04	-5.17421534400588E-04	7.49229640180214E-05
2	-9.64403505094492E-03	-5.96494243410799E-03	3.68776467849086E-03	-6.03560934901519E-04
3	3.35329419087559E-02	2.27487846207486E-02	-1.42633584616742E-02	2.36601137611216E-03
4	-4.51738173129917E-02	-3.81083580781494E-02	2.40507353385515E-02	-4.06866462745352E-03
5	2.49674551058074E-02	3.13253088867410E-02	-1.97255295993177E-02	3.41826432447402E-03
6	-5.63361971252945E-03	-1.25721944635301E-02	7.85737555640051E-03	-1.39319166226166E-03
7	1.65421623511670E-04	1.96512248418623E-03	-1.22071839292627E-03	2.20696454221903E-04
C	5	6	7	
1	-4.94552416951183E-06	1.56608244098704E-07	-1.92392817752710E-09	
2	4.39782001429686E-05	-1.49633833001484E-06	1.93494185485212E-08	
3	-1.73830338103345E-04	5.94593449218696E-06	-7.71756445327076E-08	
4	3.02800626209620E-04	-1.04452695410322E-05	1.36379956650251E-07	
5	-2.58517295596628E-04	9.01268890581161E-06	-1.18554542059336E-07	
6	1.06990682204016E-04	-3.76818961377094E-06	4.99311570990005E-08	
7	-1.71749746015436E-05	6.10403816700907E-07	-8.14365947012489E-09	

Πίνακας 6.2.7: Σταθερές εξίσωσης 6.2.27

$$r(T,P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(C_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right) \quad 6.2.27$$

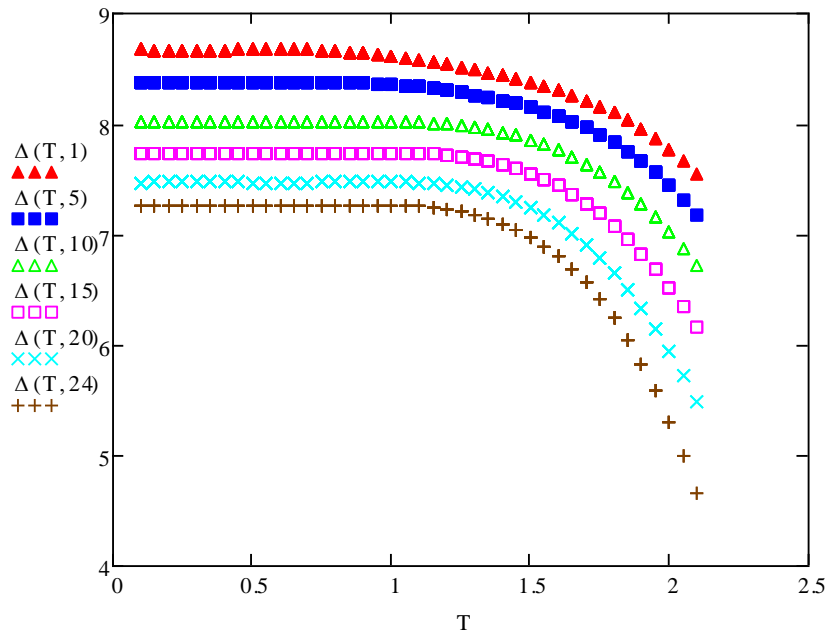
$$\text{mustyle60}(T,P) := r(T,P) \quad 6.2.28$$



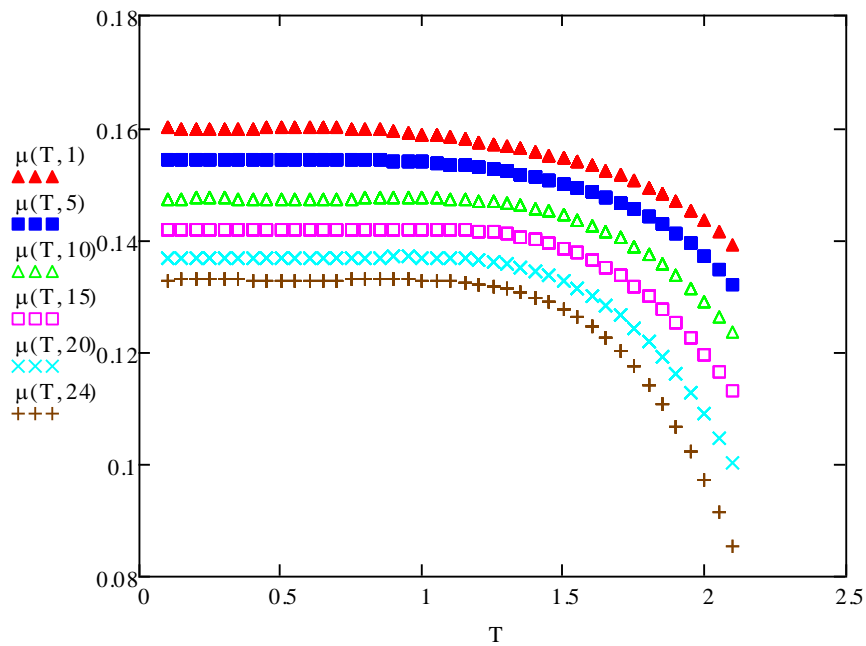
Διάγραμμα 6.2.10: % απόκλισης της συνάρτησης *mustyle60* από τις πειραματικές τιμές του Δ [K] συναρτήσει της θερμοκρασίας [K]

Παρατηρούμε λοιπόν από τα παραπάνω ότι παίρνοντας τις συναρτήσεις του δικού μας υπολογιστικού προγράμματος έχουμε ρίξει δύο φορές την τάξη μεγέθους του σφάλματος σε σχέση με τη συνάρτηση των συγγραφέων, οπότε εν συνεχεία θα πορευτούμε με αυτές τις συναρτήσεις.

Μπορούμε εν συνεχεία να ανακατασκευάσουμε τα διαγράμματα που είχαμε κάνει αναφορά στο θεωρητικό κεφάλαιο των quasiparticles, και είχαν κατασκευαστεί με τις συναρτήσεις των συγγραφέων ενώ τώρα μπορούμε να κατασκευάσουμε με τις δικές μας που είναι ακριβέστερες ως προς τις τιμές.



Διάγραμμα 6.2.11: Roton energy gap[K] συναρτήσει της θερμοκρασίας[K]



Διάγραμμα 6.2.12: Muon's effective mass - θερμοκρασία

6.3 Το διάγραμμα μετά το roton minimum

Όσον αφορά την περιοχή στη συνέχεια, αναφέρεται ότι η συνάρτηση της διασποράς της ενέργειας αυξάνεται και με φθίνοντα βαθμό μέχρις ότου να φτάσει τιμή διπλάσια του Δ , με ορμή p' .

$$\varepsilon(p) = 2 \cdot \Delta - \alpha \cdot e^{\frac{-a}{p' - p}} \quad 6.3.1 - \text{πηγή [1]}$$

όπου οι σταθερές α και a μένουν να προσδιοριστούν.

Ωστόσο, οι συγγραφείς αναφέρουν ότι καθώς η περιοχή αυτή αποτελεί περιοχή αμελητέας σημασίας για τις θερμοδυναμικές ιδιότητες οπότε γίνεται η ακόλουθη θεώρηση. Θεωρείται ότι από το σημείο που η συνάρτηση αποκτά κλίση ίση με την ταχύτητα του ήχου, η συνάρτηση στη συνέχεια αποτελεί ευθεία με την κλίση αυτή. Γενικά αναφέρεται ότι αυτό αναμένεται να συμβεί κάθε φορά κοντά στα $2.15 A^{-1}$

Παρουσίαση του πλήρους φάσματος

Για την εύρεση συνάρτησης περιγραφής του πλήρους φάσματος, ουσιαστικά, γίνεται χρήση πολυωνυμικής συνάρτησης 8ου βαθμού. Ο τρόπος που αντιμετωπίζεται το παρόν πρόβλημα είναι ότι επιλέγουμε πολυώνυμο με 6 άγνωστους συντελεστές, όσες είναι δηλαδή και οι οριακές μας συνθήκες, που θα παρατεθούν παρακάτω λεπτομερώς, ώστε τελικά το σύστημα να επιλύεται δίνοντας μας μία νέα συνάρτηση για κάθε διαφορετική θερμοκρασία και πίεση.

Η συνάρτηση που χρησιμοποιείται για την ενέργεια του φάσματος συναρτήσει της ορμής είναι:

$$\varepsilon/k(p, T, P) = u_1(T, P) \cdot p + a_3(T, P) \cdot p^3 + a_4(T, P) \cdot p^4 + a_5(T, P) \cdot p^5 + a_6(T, P) \cdot p^6 + a_7(T, P) \cdot p^7 + a_8(T, P) \cdot p^8 \quad 6.3.2 - \text{πηγή [1]}$$

Οι συντελεστές a_i είναι ουσιαστικά οι άγνωστοι συντελεστές οι οποίοι κατά τη διαδικασία της επίλυσης προσδιορίζονται κάθε φορά με βάση τις οριακές συνθήκες. Ο συντελεστής u_1 αποτελεί την ταχύτητα του ήχου όπως προαναφέρθηκε, πράγμα που σημαίνει ότι θα βασιστεί στις υπάρχουσες πειραματικές τιμές.

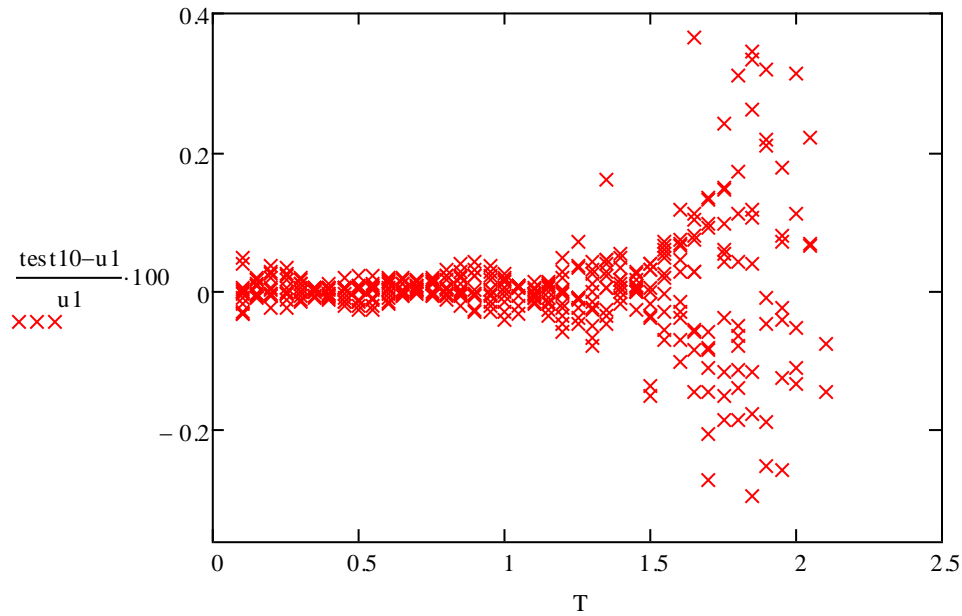
Οπότε πριν μπούμε στη διαδικασία επίλυσης των οριακών συνθηκών, αντίστοιχα με υπολογιστικό πρόγραμμα θέλουμε να προσδιορίσουμε μία συνάρτηση των ταχυτήτων του ήχου που να επιβεβαιώνει τις πειραματικές τιμές, ώστε να μπορέσουμε εν συνεχεία να προσδιορίζουμε το φάσμα όχι μόνο στις μετρημένες πειραματικά θερμοκρασίες αλλά και σε ενδιάμεσες τιμές.

C	1	2	3	4
1	2.37840503877631E+02	8.38945295358913E+00	-5.67659976849839E-02	-4.91016888572012E-02
2	4.52477314717456E+00	1.89420460280832E+00	-4.18577334485998E+00	1.02830495104333E+00
3	-2.04023309389606E+01	-1.65924822149166E+01	2.20922795218899E+01	-5.10869293464971E+00
4	4.35435373320043E+01	4.40068251084052E+01	-4.85218870364069E+01	1.08370619870267E+01
5	-4.54598073999100E+01	-5.08438199917298E+01	5.04136573651460E+01	-1.09989082542075E+01
6	2.15129242917076E+01	2.66706136335389E+01	-2.44921943912116E+01	5.25250425177739E+00
7	-3.81710562898259E+00	-5.16310527786917E+00	4.45052277020675E+00	-9.41657471428408E-01
C	5	6	7	
1	5.41496636891672E-03	-2.23915257953713E-04	3.24614615317546E-06	
2	-9.36875362291661E-02	3.65302019012455E-03	-5.15046084549602E-05	
3	4.54813381876340E-01	-1.75189496196967E-02	2.45085824474172E-04	
4	-9.51026696194910E-01	3.63422855290820E-02	-5.05670109036300E-04	
5	9.55566371147849E-01	-3.63053026833989E-02	5.03021517134148E-04	
6	-4.52978240568647E-01	1.71346174852112E-02	-2.36562480612780E-04	
7	8.07404966523043E-02	-3.04270518245247E-03	4.18615150164477E-05	

Πίνακας 6.3.1: Σταθερές εξίσωσης 6.3.3

$$r_{\omega}(T, P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(C_{i+1, j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right) \quad 6.3.3$$

$$ulstyle60(t, P) := r(T, P) \quad 6.3.4$$



Διάγραμμα 6.3.1: % απόκλισης της ταχύτητας του ήχου u_1 δοσμένης από την υπολογισμένη συνάρτηση, σε σχέση με τις πειραματικές τιμές

$$u_1(T, P) := u_1(T, P) \quad \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

6.3.5

Με τα παραπάνω λοιπόν βλέπουμε ότι πλέον έχουμε προσδιορίσει με πολύ καλή ακρίβεια τις πειραματικές τιμές της ταχύτητας του ήχου οπότε πλέον έχουμε γνωστή τη συνάρτηση $u_1(T, P)$

Όσον αφορά τις μονάδες η παραπάνω συνάρτηση μας δίνει την ταχύτητα σε m/s

Επανερχόμαστε τώρα στο αρχικό πρόβλημα προσδιορισμού των συντελεστών της συνάρτησης $E(\rho, T, P)$.

ρ : A^{-1}

T : K

P : atm

Οι οριακές συνθήκες του προβλήματος όπως παρουσιάζονται από τους συγγραφείς του [1] είναι:

οι δύο πρώτες συνθήκες περιγράφουν τη γραμμικότητα στο χωρίο των rhotons

$$E(0, T, P) = 0 \quad 6.3.6 - \text{πηγή [1]}$$

$$\frac{d}{dp} E(0, T, P) = u_1(T, P) \quad 6.3.7 - \text{πηγή [1]}$$

οι δύο επόμενες συνθήκες περιγράφουν το τοπικό μέγιστο στην περιοχή των maxons

$$E(1.1, T, P) = E_{\max}(T, P) \quad 6.3.8 - \text{πηγή [1]}$$

$$\frac{d}{dp} E(1.1, T, P) = 0 \quad 6.3.9 - \text{πηγή [1]}$$

από την παραβολή στην περιοχή των rotons έχουμε:

$$E(p_0, T, P) = \Delta(T, P) \quad 6.3.10 - \text{πηγή [1]}$$

$$\frac{d}{dp} E(p_0, T, P) = 0 \quad 6.3.11 - \text{πηγή [1]}$$

$$\frac{d^2}{dp^2} E(p_0, T, P) = \frac{1}{\mu} \quad 6.3.12 - \text{πηγή [1]}$$

καθώς και τέλος μετά το roton minimum θα έχουμε:

$$\frac{d}{dp} E(p_c, T, P) \quad 6.3.13 - \text{πηγή [1]}$$

Όπως προαναφέρθηκε πρέπει να αλλάξουμε τις μονάδες της συνάρτησης της πυκνότητας

$$\rho_{\text{xx}}(T, P) := \rho(T, P) \cdot 10^{-3} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \quad 6.3.14$$

Το σημείο ρ_0 όπως ορίστηκε παραπάνω είναι:

$$\rho_{\text{xx}}(T, P) := 3.64(\rho(T, P))^{\frac{1}{3}} \text{ A}^{-1} \quad 6.3.15$$

Ορίζουμε και αντίστοιχα ως συνάρτηση το σημείο ρ_c

$$h_{\text{bar}} \equiv 1.054510^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \quad 6.3.16$$

$$k_{\text{B}} \equiv 1.3805410^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} \quad 6.3.17$$

$$m_{\text{He}} \equiv 6.64610^{-27} \text{ kg} \quad 6.3.18$$

$$\rho_c(T, P) := \mu(T, P) \cdot u_1(T, P) \cdot \frac{m_{\text{He}}}{h_{\text{bar}}} \cdot 10^{-10} + \rho_0(T, P) \text{ A}^{-1} \quad 6.3.19$$

Με βάση τα παραπάνω λοιπόν πρέπει ανάλογα να μετασχηματίσουμε τις μονάδες της ταχύτητας του ήχου u_1 ως:

$$u_1''(T, P) := u_1(T, P) \cdot \frac{h_{\text{bar}}}{k_{\text{B}}} \cdot 10^{10} \text{ K}\cdot\text{A} \quad 6.3.20$$

Γράφοντας κατόπιν αναλυτικά τις οριακές συνθήκες έχουμε:

$$1 \cdot u_1(T, P) + a_3 \cdot 1 \cdot \Gamma^3 + a_4 \cdot 1 \cdot \Gamma^4 + a_5 \cdot 1 \cdot \Gamma^5 + a_6 \cdot 1 \cdot \Gamma^6 + a_7 \cdot 1 \cdot \Gamma^7 + a_8 \cdot 1 \cdot \Gamma^8 = E_{\text{max}}(T, P)$$

$$u_1(T, P) + 3 \cdot a_3 \cdot 1 \cdot \Gamma^2 + 4 \cdot a_4 \cdot 1 \cdot \Gamma^3 + 5 \cdot a_5 \cdot 1 \cdot \Gamma^4 + 6 \cdot a_6 \cdot 1 \cdot \Gamma^5 + 7 \cdot a_7 \cdot 1 \cdot \Gamma^6 + 8 \cdot a_8 \cdot 1 \cdot \Gamma^7 = C$$

$$u_1(T, P) \cdot \rho_0(T, P) + a_3 \cdot \rho_0(T, P)^3 + a_4 \cdot \rho_0(T, P)^4 + a_5 \cdot \rho_0(T, P)^5 + a_6 \cdot \rho_0(T, P)^6 + a_7 \cdot \rho_0(T, P)^7 + a_8 \cdot \rho_0(T, P)^8 = \Delta(T, P)$$

$$u_1(T, P) + 3 \cdot \rho_0(T, P)^2 \cdot a_3 + 4 \cdot a_4 \cdot \rho_0(T, P)^3 + 5 \cdot a_5 \cdot \rho_0(T, P)^4 + 6 \cdot a_6 \cdot \rho_0(T, P)^5 + 7 \cdot a_7 \cdot \rho_0(T, P)^6 + 8 \cdot a_8 \cdot \rho_0(T, P)^7 = 0$$

$$6 \cdot \rho_0(T, P) \cdot a_3 + 12 \cdot \rho_0(T, P)^2 \cdot a_4 + 20 \cdot \rho_0(T, P)^3 \cdot a_5 + 30 \cdot \rho_0(T, P)^4 \cdot a_6 + 42 \cdot \rho_0(T, P)^5 \cdot a_7 + 56 \cdot \rho_0(T, P)^6 \cdot a_8 = \frac{1}{\mu(T, P)}$$

$$u_1(T, P) + 3 \cdot \rho_c(T, P)^2 \cdot a_3 + 4 \cdot a_4 \cdot \rho_c(T, P)^3 + 5 \cdot a_5 \cdot \rho_c(T, P)^4 + 6 \cdot a_6 \cdot \rho_c(T, P)^5 + 7 \cdot a_7 \cdot \rho_c(T, P)^6 + 8 \cdot a_8 \cdot \rho_c(T, P)^7 = u_1(T, P)$$

Σύστημα εξισώσεων 6.3.21

Οι παραπάνω εξισώσεις ανάλογα μετασχηματίζονται σε πινακοποιημένη μορφή:

$$\underline{A}(T, P) := \begin{pmatrix}
 1 \cdot \Gamma^3 & 1 \cdot \Gamma^4 & 1 \cdot \Gamma^5 & 1 \cdot \Gamma^6 & 1 \cdot \Gamma^7 & 1 \cdot \Gamma^8 \\
 3 \cdot 1 \cdot \Gamma^2 & 4 \cdot 1 \cdot \Gamma^3 & 5 \cdot 1 \cdot \Gamma^4 & 6 \cdot 1 \cdot \Gamma^5 & 7 \cdot 1 \cdot \Gamma^6 & 8 \cdot 1 \cdot \Gamma^7 \\
 \rho_0(T, P)^3 & \rho_0(T, P)^4 & \rho_0(T, P)^5 & \rho_0(T, P)^6 & \rho_0(T, P)^7 & \rho_0(T, P)^8 \\
 3 \cdot \rho_0(T, P)^2 & 4 \cdot \rho_0(T, P)^3 & 5 \cdot \rho_0(T, P)^4 & 6 \cdot \rho_0(T, P)^5 & 7 \cdot \rho_0(T, P)^6 & 8 \cdot \rho_0(T, P)^7 \\
 6 \cdot \rho_0(T, P) & 12 \cdot \rho_0(T, P)^2 & 20 \cdot \rho_0(T, P)^3 & 30 \cdot \rho_0(T, P)^4 & 42 \cdot \rho_0(T, P)^5 & 56 \cdot \rho_0(T, P)^6 \\
 3 \cdot \rho_c(T, P)^2 & 4 \cdot \rho_c(T, P)^3 & 5 \cdot \rho_c(T, P)^4 & 6 \cdot \rho_c(T, P)^5 & 7 \cdot \rho_c(T, P)^6 & 8 \cdot \rho_c(T, P)^7
 \end{pmatrix}$$

Σύστημα εξισώσεων πινακοποιημένο 6.3.22

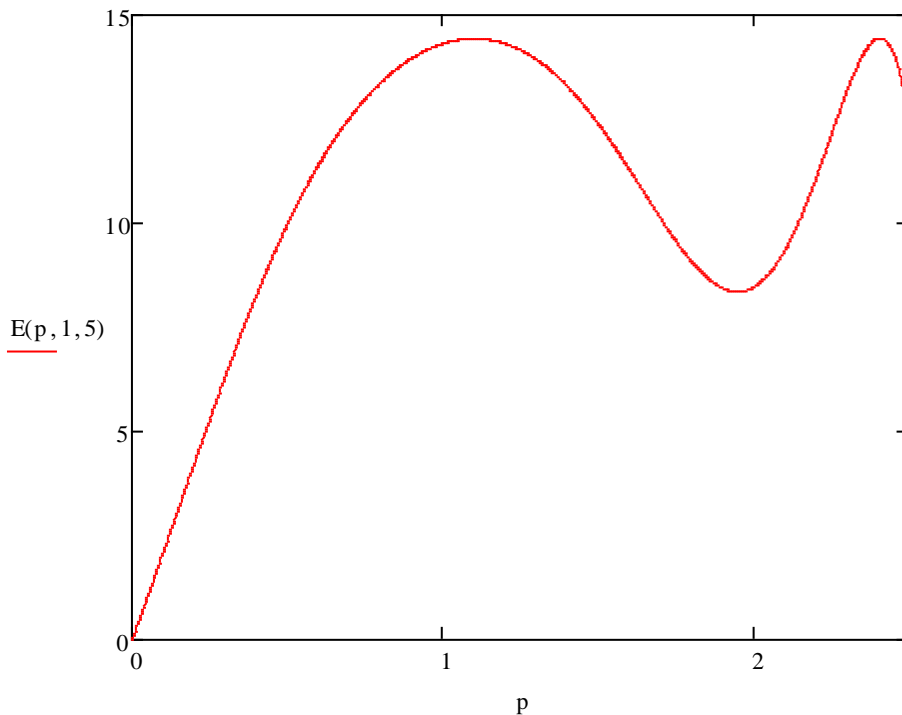
Επιλύουμε άρα το σύστημα έχοντας:

$$\underline{R}(T, P) := \underline{A}(T, P)^{-1} \cdot \underline{B}(T, P) \tag{6.3.23}$$

Για το αρχικό λοιπόν πρόβλημα μέχρι την περιοχή των rotons το φάσμα περιγράφεται από την ακόλουθη εξίσωση (ισοδύναμη της αρχικής εξίσωσης με τους συντελεστές a_i , που τώρα έχουν δοθεί ως R_i) :

$$\underline{E}(p, T, P) := \left[u_1'(T, P) \cdot p + \sum_{i=3}^8 \left(R(T, P)_{i-2} \cdot p^i \right) \right] \tag{6.3.24}$$

Οπότε κάνοντας ένα πρώτο διάγραμμα για να πάρουμε μία τάξη μεγέθους των πραγμάτων έχουμε:



Διάγραμμα 6.3.2: Ενέργειας [K] - Ορμής [A⁻¹] από την αρχική συνάρτηση που προκύπτει από την εξίσωση του παραπάνω συστήματος

Στο παραπάνω διάγραμμα παρατηρούμε αυτό που προαναφέρθηκε δηλαδή την απόκλιση της καμπύλης από τα πειραματικά δεδομένα μετά το πέρας της περιοχής των rotons, οπότε εδώ καλούμαστε να αλλάξουμε τη συνάρτηση ώστε να δώσουμε τη γραμμικότητα με κλίση της ταχύτητας του ήχου όπως προαναφέρθηκε.

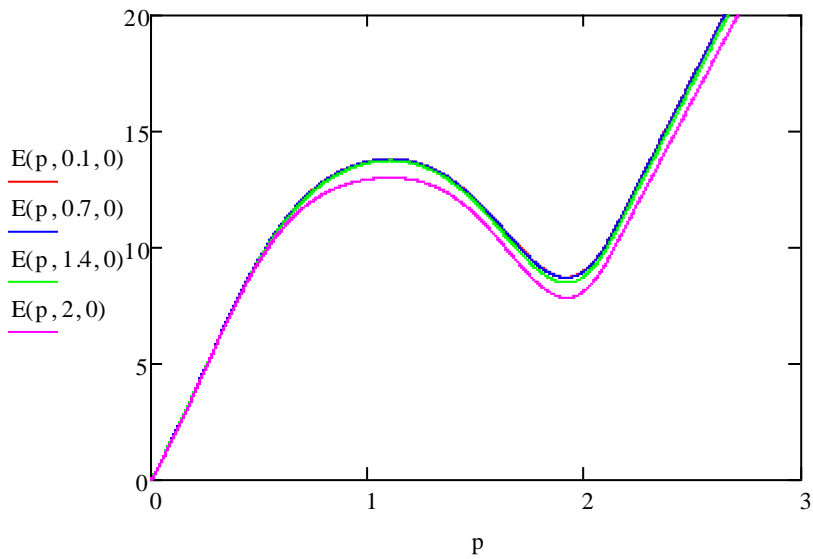
Άρα τελικά η ολική εξίσωση που θα έχουμε θα είναι της μορφής:

$$E(p, T, P) := \begin{cases} \left[u1'(T, P) \cdot p + \sum_{i=3}^8 \left(R(T, P)_{i-2} \cdot p^i \right) \right] & \text{if } p < pc(T, P) \\ u1'(T, P) \cdot (p - pc(T, P)) + \left[u1'(T, P) \cdot pc(T, P) + \sum_{i=3}^8 \left(R(T, P)_{i-2} \cdot pc(T, P)^i \right) \right] & \text{otherwise} \end{cases}$$

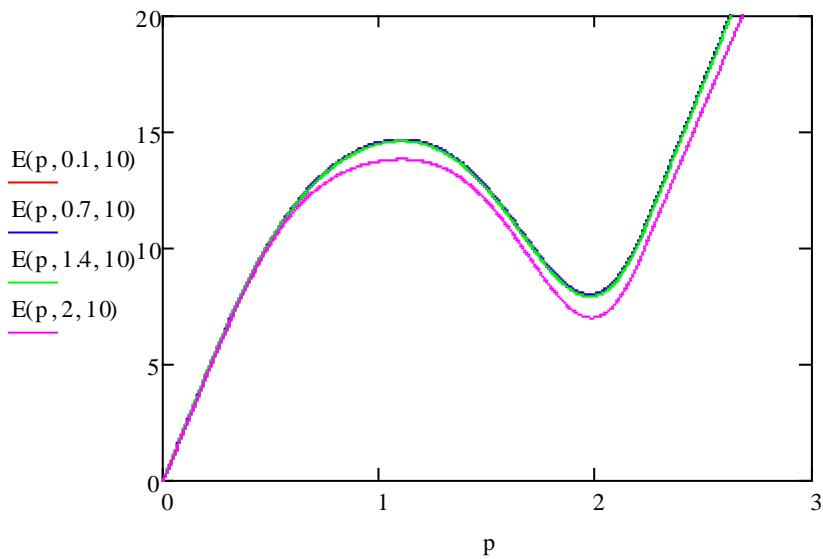
6.3.25

Όπου η παραπάνω εξίσωση παίρνει το p σε A^{-1}

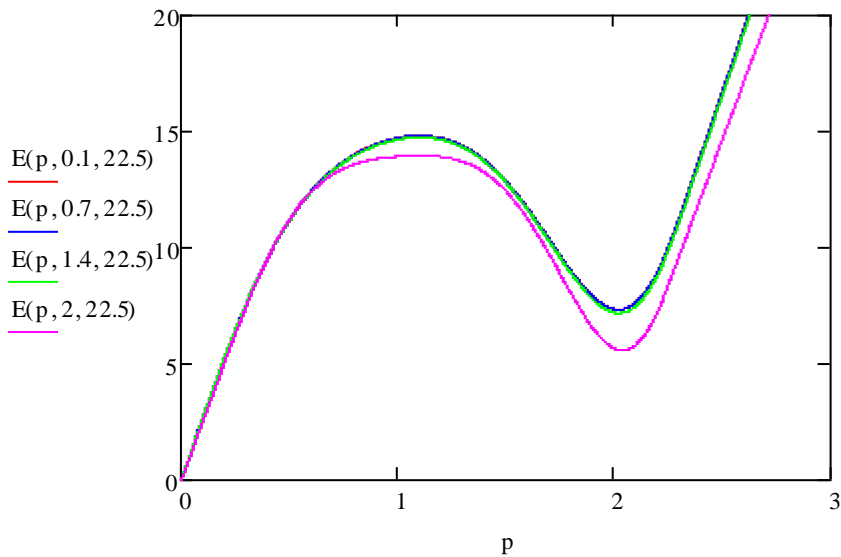
Άρα τα διαγράμματα αντιστοίχως γίνονται της μορφής:



Διάγραμμα 6.3.3: Ενέργειας [K] - Ορμής για μηδενική πίεση



Διάγραμμα 6.3.4: Ενέργειας [K] - Ορμής για μεσαίες πιέσεις



Διάγραμμα 6.3.5: Ενέργειας [K] - Ορμής για υψηλές πιέσεις

Η παραπάνω διαδικασία επίλυσης του προβλήματος αποτελεί τη δική μας λύση στο πρόβλημα που έθεσαν οι συγγραφείς. Ωστόσο και οι ίδιοι έχουν παρουσιάσει στην εργασία λύση του αντιστοίχου προβλήματος την οποία θέλουμε να συγκρίνουμε εν συνεχεία με τη δική μας εκδοχή.

Κατά την επίλυση του προβλήματος αυτού και οι συγγραφείς προέβησαν σε αντίστοιχη υπολογιστική διαδικασία με χρήση ωστόσο διαφορετικού κώδικα ο οποίος δίνει τα ακόλουθα αποτελέσματα.

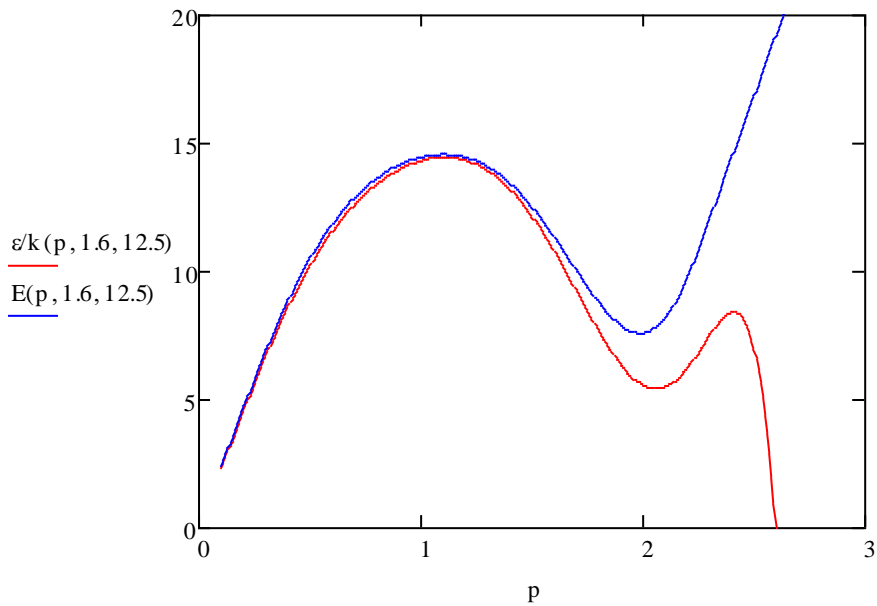
Σημείωση: οι συγγραφείς έχουν δώσει επίλυση του προβλήματος μόνο για πινακοποιημένες τιμές, συνεπώς η σύγκριση των αποτελεσμάτων θα μπορέσει να γίνει με ακρίβεια μόνο πάνω στις τιμές αυτές.

Ο πίνακας με τα αποτελέσματα των συντελεστών των συγγραφέων βρίσκεται στο σχετικό παράρτημα. Για τη χρήση του πίνακα αυτού δημιουργούμε παρακάτω συναρτήσεις οι οποίες να μας δίνουν ακριβώς τις τιμές των συντελεστών για την κάθε θερμοκρασία και πίεση του πίνακα. Τονίζεται επίσης εδώ ότι για να έχουμε μεγάλη ακρίβεια στις πινακοποιημένες τιμές έχουμε κάνει χρήση υψηλόβαθμων πολυωνυμικών συναρτήσεων με αποτέλεσμα να παρουσιάζονται έντονες ταλαντωτικές συμπεριφορές στα ενδιάμεσα σημεία, συνεπώς οι παρούσες συναρτήσεις δεν πρέπει σε καμία περίπτωση να χρησιμοποιηθούν για σημεία που δεν βρίσκονται στον πίνακα.

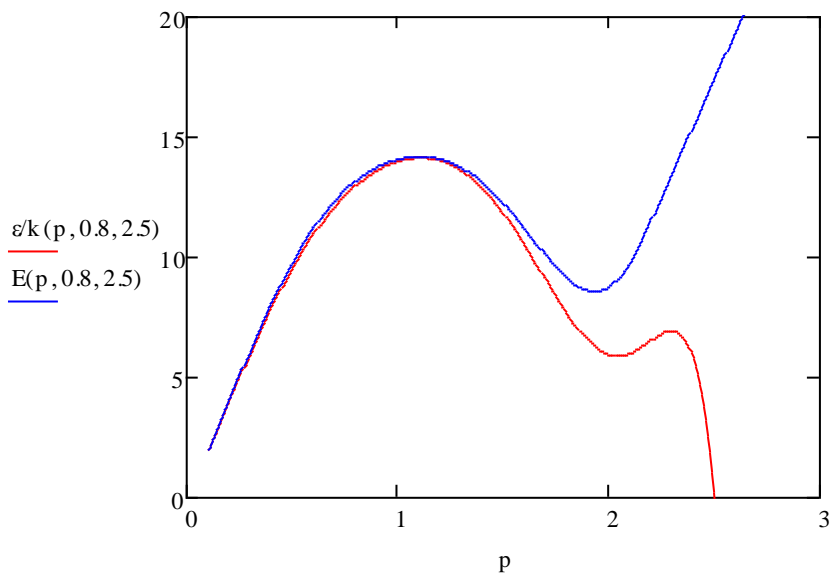
$$\varepsilon/k(p, T, P) := u1(T, P) \cdot p + a3(T, P) \cdot p^3 + a4(T, P) \cdot p^4 + a5(T, P) \cdot p^5 + a6(T, P) \cdot p^6 + a7(T, P) \cdot p^7 + a8(T, P) \cdot p^8 \quad 6.3.26$$

Έχοντας λοιπόν φτιάξει τις δικές μας συναρτήσεις καθώς πλέον έχοντας και των συγγραφέων σε χρηστική μορφή, καταστρώνουμε τα ανάλογα διαγράμματα ώστε να γίνει σύγκρισή τους.

Για τυχαία σημεία τα διαγράμματα είναι τα ακόλουθα:

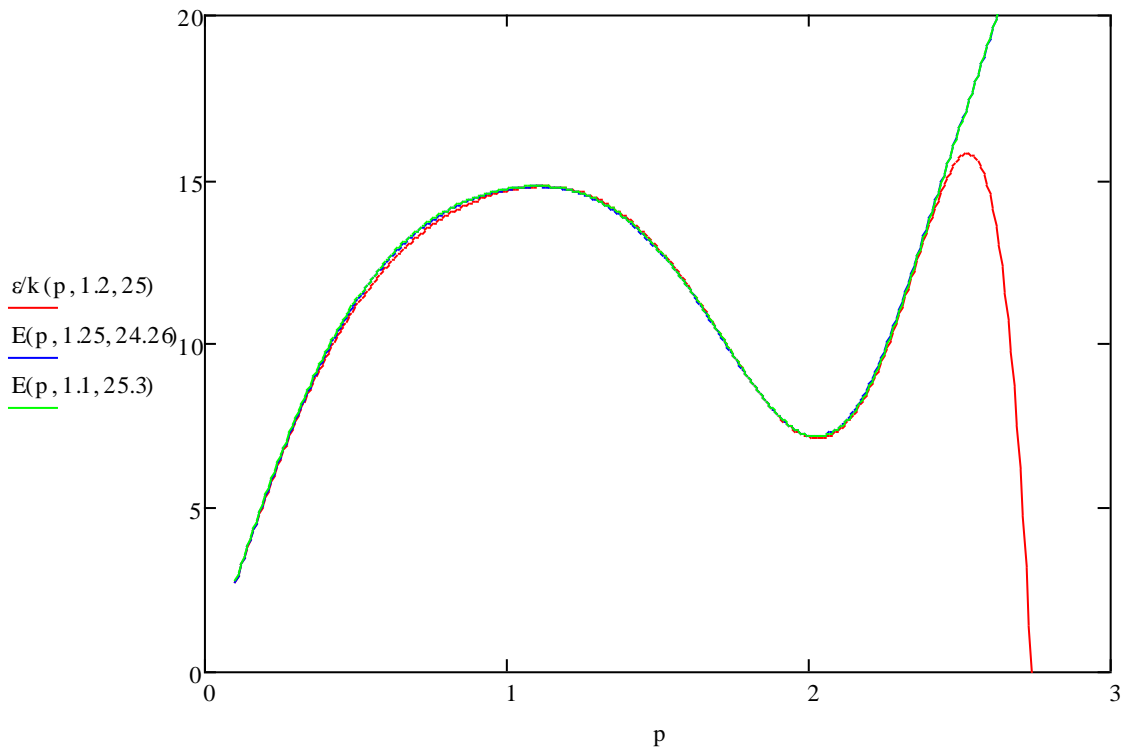


Διάγραμμα 6.3.6: $E[K]-p[A^{-1}]$ για σύγκριση της δικής μας συνάρτησης με τη δοθείσα



Διάγραμμα 6.3.7: $E[K]-p[A^{-1}]$ για σύγκριση της δικής μας συνάρτησης με τη δοθείσα

Όσον αφορά ωστόσο τα πειραματικά σημεία που αναφέρονται στην εργασία τα αποτελέσματα είναι τα ακόλουθα:



Διάγραμμα 6.3.8: $E[K]-p[A^-1]$ για σύγκριση της δικής μας συνάρτησης με τη δοθείσα σε πειραματικά σημεία

Παρατηρούμε λοιπόν από τα παραπάνω ότι στο διάγραμμα των πειραματικών σημείων υπάρχει απόλυτη ταύτιση μεταξύ του δικού μας διαγράμματος και αυτού των συγγραφέων, ενώ σε αυτά των τυχαίων σημείων, υπάρχει έντονη απόκλιση μετά την περιοχή των μ achons, και επίσης βλέπουμε ότι το διάγραμμα που προκύπτει από τους υπολογισμούς με τα αποτελέσματα των συγγραφέων απέχει αρκετά από τη μορφή του διαγράμματος του Landau. Υποπτευόμαστε ότι αυτό συμβαίνει λόγω του γεγονότος ότι τα υπολογιστικά μέσα που είχαν στη διάθεσή τους οι συγγραφείς κατά την εκπόνηση της εργασίας αυτής, ίσως δεν ήταν ικανά να αποτυπώσουν με αρκετή ακρίβεια τη ζητούμενη συνάρτηση, καθώς έχουν απόλυτη ακρίβεια στα πειραματικά σημεία αλλά αποκλίνουν στα υπόλοιπα.

Κατόπιν για περαιτέρω έλεγχο τόσο των δικών μας αποτελεσμάτων όσο και των συγγραφέων θα κάνουμε έλεγχο των συναρτήσεων που έχουν προκύψει με βάση τις συνοριακές συνθήκες.

Ο έλεγχος γίνεται κατ' αρχή σε ένα τυχαίο σημείο:

$$P := 2.5$$

$$T := 0.2$$

Για τη δική μας συνάρτηση έχουμε:

Αρχικά ορίζουμε τις βοηθητικές συναρτήσεις:

$$dE(p, T, P) := \frac{d}{dp} E(p, T, P) \quad 6.3.27$$

$$ddE(p, T, P) := \frac{d}{dp} dE(p, T, P) \quad 6.3.28$$

οπότε

$$dE(0, T, P) - u_l(T, P) = -1.952970770 \times 10^{-3}$$

$$E(1.1, T, P) - E_{\max}(T, P) = 1.692868067 \times 10^{-12}$$

$$dE(1.1, T, P) = 3.35050495 \times 10^{-12}$$

$$E(p_0(T, P), T, P) - \Delta(T, P) = 1.101163604 \times 10^{-11}$$

$$dE(p_0(T, P), T, P) = 9.243008040 \times 10^{-11}$$

$$ddE(p_0(T, P), T, P) - \frac{\frac{\hbar^2}{k_B \cdot m_{\text{He}}} \cdot 10^{20}}{\mu(T, P)} = 3.944080617 \times 10^{-9}$$

$$dE(p_c(T, P), T, P) - u_l(T, P) = -1.956524133 \times 10^{-3}$$

Έλεγχος τιμών 6.3.29

Αντίστοιχα για τη συνάρτηση των συγγραφέων στο ίδιο σημείο έχουμε:

Και πάλι ορίζουμε:

$$d\varepsilon/k(p, T, P) := \frac{d}{dp} \varepsilon/k(p, T, P) \quad 6.3.30$$

$$dd\varepsilon/k(p, T, P) := \frac{d}{dp} d\varepsilon/k(p, T, P) \quad 6.3.31$$

Οπότε

$$d\varepsilon/k(0, T, P) - u_1(T, P) = 2.842170943 \cdot 10^{-14}$$

$$\varepsilon/k(1.1, T, P) - E_{\max}(T, P) = 0.0277789795$$

$$d\varepsilon/k(1.1, T, P) = 0.705242409$$

$$\varepsilon/k(p_0(T, P), T, P) - \Delta(T, P) = 0.7195285812$$

$$d\varepsilon/k(p_0(T, P), T, P) = 2.0876982663$$

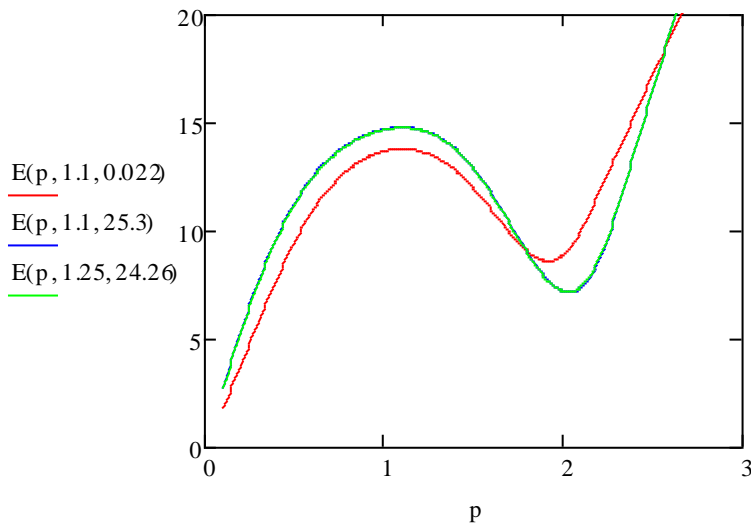
$$dd\varepsilon/k(p_0(T, P), T, P) - \frac{\frac{\hbar^2}{k_B \cdot m_{\text{He}}} \cdot 10^{20}}{\mu(T, P)} = 5.0974092838$$

$$d\varepsilon/k(p_c(T, P), T, P) - u_1(T, P) = 3.8005865013$$

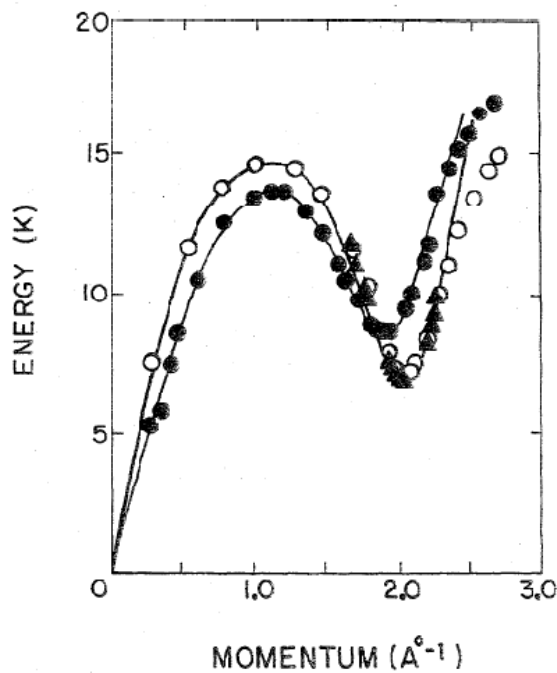
Έλεγχος τιμών από [1] 6.3.32

Με βάση τις παραπάνω συγκρίσεις με τις συνοριακές τιμές, όπως περιγράφονται και πάλι παρατηρούμε ότι οι δικές μας συναρτήσεις έχουν αρκετά μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με τις συναρτήσεις των συγγραφέων.

Ανακατασκευάζουμε λοιπόν και το δοθέν διάγραμμα των συγγραφέων με χρήση των δικών μας ακριβέστερων συναρτήσεων:



Διάγραμμα 6.3.8: Ενέργειας - Ορμής στις συγκεκριμένες τιμές των πειραματικών των συγγραφέων.



Διάγραμμα 6.3.9: Ενέργειας-Ορμής στις πειραματικές τιμές – πηγή [1]

Από τα παραπάνω λοιπόν διαγράμματα βλέπουμε ότι στις πειραματικές τιμές τα διαγράμματα που παράγει η συνάρτηση που έχουμε δημιουργήσει είναι εντελώς ανάλογα με τα διαγράμματα των συγγραφέων στις τιμές αυτές, τα οποία όπως αναφέρεται επιβεβαιώνουν τις πειραματικές τιμές, όπως φαίνεται και στην παραπάνω εικόνα.

6.4 Υπολογισμός θερμοδυναμικών στοιχείων

Κατόπιν θέλουμε έχοντας πλέον το φάσμα των ενεργειών συσχετισμένων με την ορμή, την πίεση και την ταχύτητα να μπορέσουμε να υπολογίσουμε τα υπόλοιπα θερμοδυναμικά στοιχεία.

Για τα θερμοδυναμικά αυτά στοιχεία θα χρησιμοποιήσουμε ένα συνδυασμό γνωστών θερμοδυναμικών εξισώσεων, εξισώσεων που δίνουν οι συγγραφείς σ αυτή τους τη δημοσίευση καθώς και εξειδικευμένες εξισώσεις από δημοσίευση του Donnelly και Barenghi 1997 που μας δίνει τις ιδιότητες σε πίεση κορεσμού.

Στη δημοσίευσή τους οι Donnelly και Barenghi αναφέρουν ότι κάνουν χρήση πειραματικών τιμών για την πυκνότητα όπως αυτές έχουν μετρηθεί και δημοσιευτεί σε εργασία του Donnelly, όπου είναι πρακτικά οι τιμές που πραγματευόμαστε κι εμείς στην παρούσα μελέτη.

Αναφερόμενη δημοσίευση:[2] [Text references\jpcrd551.pdf](#)

Πίνακες 6.4.1 - πηγή [2]: Σταθερές εξισώσεων 6.4.1, 6.4.2, 6.4.3

$$\underline{a}' := \begin{pmatrix} -7.57537 \\ 6.87483 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

$$\underline{b}' := \begin{pmatrix} 3.79937 \\ 1.86557 \\ 4.88345 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

$$\underline{m} := \begin{pmatrix} -1.26935 \\ 7.12413 \\ -16.7461 \\ 8.75342 \end{pmatrix} \cdot 10^{-5}$$

$$\underline{a}'' := \begin{pmatrix} -7.94605 \\ 5.07051 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

$$\underline{b}'' := \begin{pmatrix} -30.3511 \\ -10.2326 \\ -3.00636 \\ 0.240720 \\ -2.45749 \\ 1.53454 \\ -0.308182 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

$$\rho_o := 0.145139$$

$$\rho_\lambda := 0.146108$$

$$T_\lambda := 2.176$$

$$\rho_o(T) := \rho_o + \left[\sum_{i=1}^4 \left(m_i \cdot T^{i+1} \right) \right]$$

6.4.1 – πηγή [2]

$$\rho'(T) := \rho_\lambda + \rho_\lambda \cdot \left[\sum_{i=1}^2 \left[a'_i \cdot (T - T_\lambda)^i \cdot \ln(|T - T_\lambda|) \right] + \sum_{i=1}^7 \left[b'_i \cdot (T - T_\lambda)^i \right] \right]$$

6.4.2 – πηγή [2]

$$\rho''(T) := \rho_\lambda + \rho_\lambda \cdot \left[\sum_{i=1}^2 \left[a''_i \cdot (T - T_\lambda)^i \cdot \ln(|T - T_\lambda|) \right] + \left[\sum_{i=1}^7 \left[b''_i \cdot (T - T_\lambda)^i \right] \right] \right]$$

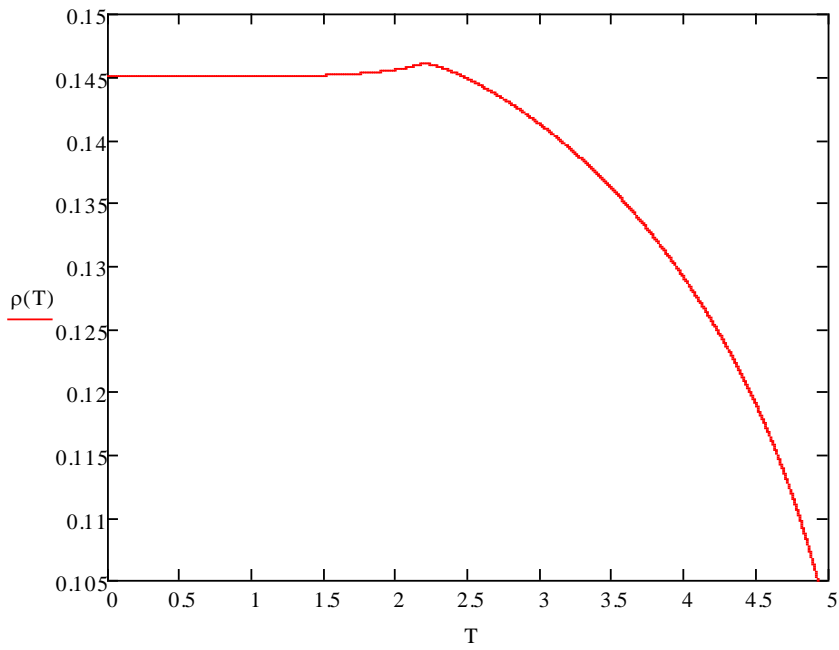
6.4.3 – πηγή [2]

Οπότε τελικά συνθέτοντας τις παραπάνω συναρτήσεις για την πυκνότητα στις διάφορες περιοχές έχουμε:

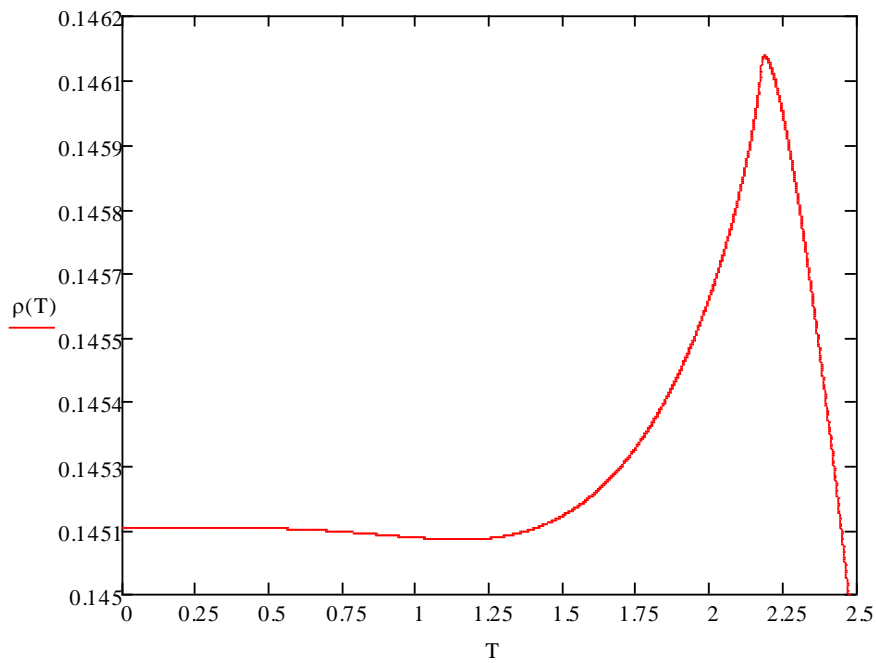
$$\rho(T) := \begin{cases} \rho_o(T) & \text{if } T \leq 1.344 \\ \rho'(T) & \text{if } 1.344 < T \leq T_\lambda \\ \rho''(T) & \text{if } T_\lambda < T \leq 5 \end{cases}$$

6.4.4

Οπότε με βάση την πυκνότητα υπό μηδενική πίεση μπορούμε να κατασκευάσουμε τα ακόλουθα διαγράμματα.



Διάγραμμα 6.4.1: πυκνότητας [g/cm^3] - θερμοκρασίας [K] σε μεγάλο εύρος θερμοκρασιών



Διάγραμμα 6.4.2: πυκνότητας [g/cm^3] - θερμοκρασίας [K] σε μικρότερες θερμοκρασίες

Αντίστοιχα υπολογίζουμε τις τιμές για την ισόθλιπτη διαστολικότητα υπό μηδενική πίεση ως:

Πίνακας 6.4.2 – πηγή [2]: Σταθερές εξίσωσης 6.4.5

$$s_{\lambda\lambda} := \begin{pmatrix} -0.117818 \\ 1.64045 \\ -6.18750 \\ 13.4293 \\ -11.3971 \\ 2.94176 \end{pmatrix} \cdot 10^{-3}$$

$$a_0(T) := \sum_{i=1}^6 (s_i \cdot T^i)$$

6.4.5 – πηγή [2]

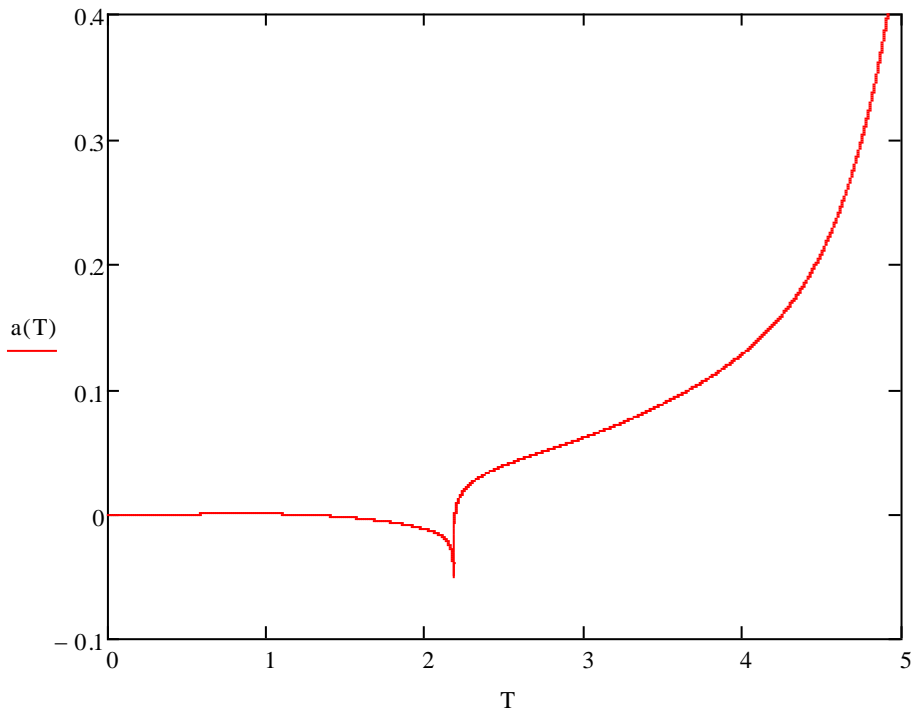
$$a'(T) := \frac{-\rho_\lambda}{\rho'(T)} \left[a'_1 + b'_1 + a'_1 \cdot \ln(|T - T_\lambda|) + (a'_2 + 2 \cdot b'_2) \cdot (T - T_\lambda) + 2 \cdot a'_2 \cdot (T - T_\lambda) \cdot \ln(|T - T_\lambda|) + \sum_{i=3}^7 [i \cdot b'_i \cdot (T - T_\lambda)^{i-1}] \right] \quad 6.4.6 - \text{πηγή [2]}$$

$$a''(T) := \frac{-\rho_\lambda}{\rho'(T)} \left[a''_1 + b''_1 + a''_1 \cdot \ln(|T - T_\lambda|) + (a''_2 + 2 \cdot b''_2) \cdot (T - T_\lambda) + 2 \cdot a''_2 \cdot (T - T_\lambda) \cdot \ln(|T - T_\lambda|) + \sum_{i=3}^7 [i \cdot b''_i \cdot (T - T_\lambda)^{i-1}] \right] \quad 6.4.7 - \text{πηγή [2]}$$

Οπότε συνδυαστικά πάλι έχουμε:

$$a(T) := \begin{cases} a_0(T) & \text{if } T \leq 1.344 \\ a'(T) & \text{if } 1.344 < T \leq T_\lambda \\ a''(T) & \text{if } T_\lambda < T \leq 5 \end{cases} \quad 6.4.8$$

Άρα το συνολικό διάγραμμα για την ισόθλιπτη διαστολικότητα υπό μηδενική πίεση θα είναι :



Διάγραμμα 6.4.3: Ισόθλιπτης διαστολικότητας - θερμοκρασίας

Με βάση τα παραπάνω βλέπουμε ότι πλέον έχουμε λειτουργικές συναρτήσεις που αφορούν τις συνθήκες μηδενικής πίεσης, οπότε μπορούμε χρησιμοποιώντας αυτές ως αρχικές τιμές να κάνουμε υπολογισμούς με βάση και το φάσμα ενέργειας και ορμής που είχαμε υπολογίσει και για τις υπόλοιπες θερμοκρασίες.

Στη συνέχεια για να βρούμε ωστόσο τα θερμοδυναμικά μεγέθη, χρειαζόμαστε άλλο ένα μέγεθος μετρημένο σε όλο το εύρος. Καθώς οι συγγραφείς αναφέρουν ότι παίρνουν ως στοιχεία για τις συναρτήσεις τα κT και αP, και καθώς έχουμε τις αρχικές τιμές για το αP, επιλέγουμε να χρησιμοποιήσουμε τις μετρηθείσες τιμές για να κατασκευάσουμε μία συνάρτηση για το κT ως ακολούθως:

C	1	2	3	4
1	1.22070790454088E-08	-1.04345666251543E-09	8.86556300532251E-11	-5.08661970608804E-12
2	-9.01654744159338E-10	7.57226574388214E-10	-9.43345382174654E-11	-4.80469353239798E-12
3	4.08753345019139E-09	-2.94580339736772E-09	2.36015319549499E-10	4.96892149129997E-11
4	-8.19790003700306E-09	4.96242677066419E-09	-1.09775388672056E-10	-1.51658314652470E-10
5	7.98790558603078E-09	-4.03594952774011E-09	-1.90848230908274E-10	1.89481525984617E-10
6	-3.61247060395603E-09	1.52770269576882E-09	2.04047496029487E-10	-1.03282430302026E-10
7	6.18654172061945E-10	-2.12696734750196E-10	-5.26679284264420E-11	2.02504350148860E-11
C	5	6	7	
1	1.56982325461151E-13	-2.01129811134831E-15	2.87052305093488E-18	
2	1.14541082237844E-12	-5.44692484431429E-14	8.14459949775276E-16	
3	-7.10802563894654E-12	3.09417460910152E-13	-4.46942783756872E-15	
4	1.77806244376494E-11	-7.34545748978893E-13	1.03698935910780E-14	
5	-2.01026921851603E-11	8.04068210647633E-13	-1.11728095696322E-14	
6	1.03121319044622E-11	-4.03300025534129E-13	5.53431454249143E-15	
7	-1.93879947661011E-12	7.44910849479629E-14	-1.01034716454957E-15	

Πίνακας 6.4.3: Σταθερές εξίσωσης 6.4.9

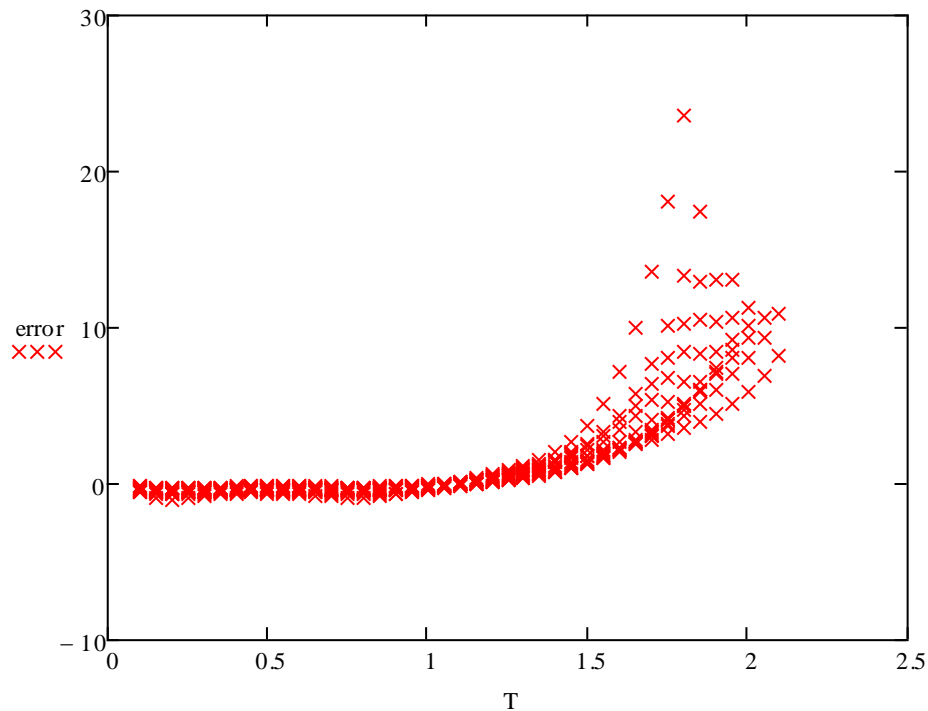
$$kt(T,P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(c_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right)$$

6.4.9

Όπου

$$kt(T,P) \quad \text{σε} \quad \frac{\text{cm}^2}{\text{dyn}^{-1}} = 10 \frac{\text{m}^2}{\text{N}}$$

Ελέγχουμε το σφάλμα της συνάρτησης:



Διάγραμμα 6.4.4 % απόκλισης της συνάρτησης ισόθλιπτης διαστολικότητας από τις πειραματικές τιμές.

Βλέπουμε ότι η συνάρτηση αυτή μας δίνει ικανοποιητικές τιμές για θερμοκρασίες μέχρι 1.5K, ωστόσο εν συνεχεία οι τιμές αποκλίνουν, πράγμα που ωστόσο δεν μας αποθαρρύνει ιδιαίτερα καθώς όπως αναφέρει και ο ίδιος ο Donnelly, οι δοθείσες τιμές καλό είναι να μην εμπιστεύονται πλησιάζοντας το Tλ.

Κατόπιν πριν πάμε στα υπόλοιπα θερμοδυναμικά μεγέθη κρίνουμε σημαντικό έχοντας προηγουμένα καταστρώσει τη συνάρτηση της πυκνότητας μόνον από τα πειραματικά δεδομένα, να κατασκευάσουμε μία συνάρτηση του όγκου συναρτήσει της θερμοκρασίας και της πίεσης θερμοδυναμικά με βάση την ισόθλιπτη διαστολικότητα και τα στοιχεία που έχουμε για μηδενική πίεση, που να περιγράφει με μεγάλη ακρίβεια όλο το φάσμα των πιέσεων και των θερμοκρασιών καθώς επίσης και να περιέχει και τις τιμές στη μηδενική θερμοκρασία.

Γενικά ισχύει ο θερμοδυναμικός νόμος:

$$dV(T,P) = V(T,P) \cdot a(T) \cdot dT - P \cdot kt(P) \cdot dP \quad 6.4.10$$

Για μηδενική πίεση λοιπόν θα έχουμε:

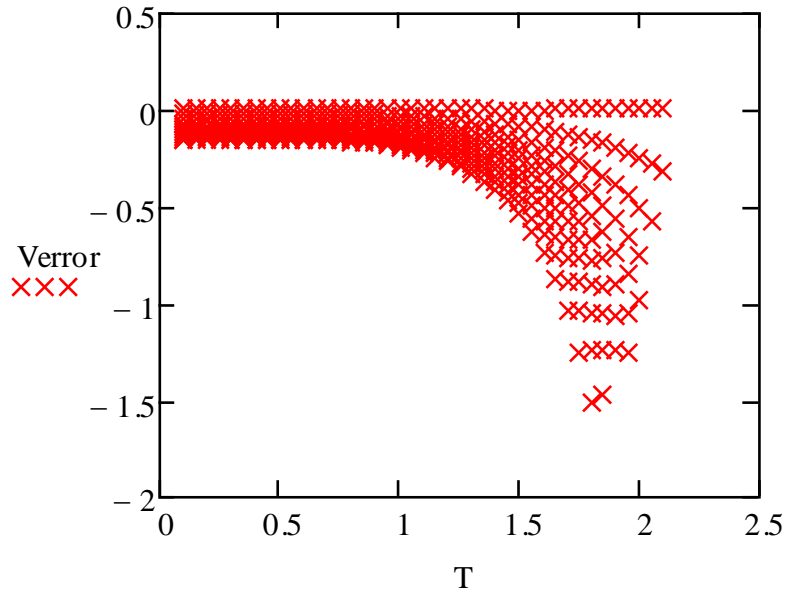
$$V_{ps}(T) := \frac{1}{\rho(0.1)} \cdot e^{\int_0^T a(T) \cdot dT} \quad 6.4.11$$

Κατόπιν δουλεύοντας για σταθερή θερμοκρασία πάνω σε μεταβλητή πίεση με βάση το παραπάνω θα έχουμε:

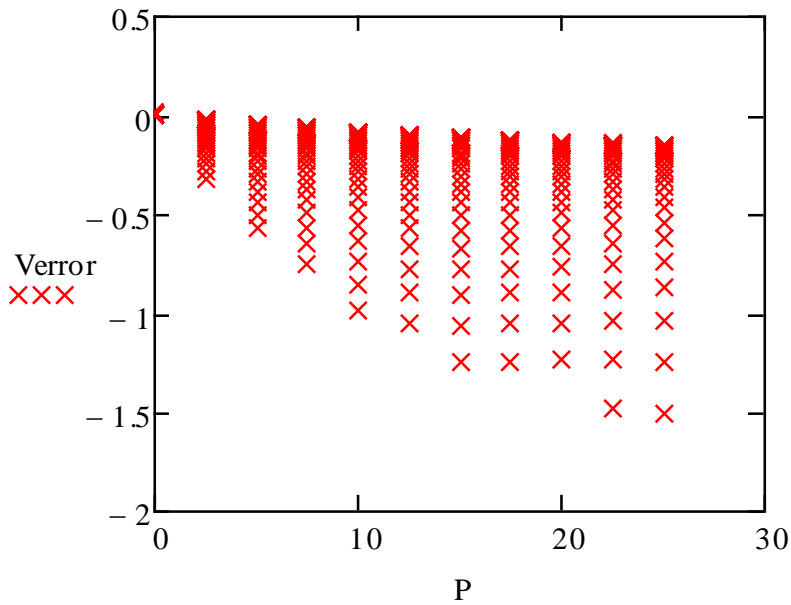
$$V_{tconst}(T,P) := V_{ps}(T) \cdot e^{\int_{0.00022}^P -k(P) \cdot 10^6 \cdot dP} \quad 6.4.12$$

Αναζητούμε τώρα να δούμε τα σφάλματα της συνάρτησής μας αυτής με βάση την υπολογισμένη προηγούμενα από τους πειραματικούς πίνακες πυκνότητα

$$\text{Verror} := \begin{array}{l} \text{for } i \in 1..rows(T) \\ \quad \text{tmp}_i \leftarrow \frac{V_{tconst}(T_i, P_i)^{-1} - \rho_i(T_i, P_i)}{\rho_i(T_i, P_i)} \cdot 100 \\ \text{tmp} \end{array} \quad 6.4.13$$



Διάγραμμα 6.4.5: % απόκλισης της συνάρτησης όγκου από τις πειραματικές τιμές συναρτήσεως θερμοκρασίας



Διάγραμμα 6.4.6: % απόκλισης της συνάρτησης όγκου από τις πειραματικές τιμές συναρτήσεως πίεσης

Βλέπουμε λοιπόν ότι τα επί τοις εκατό σφάλματα της συνάρτησης που θερμοδυναμικά καταστρώσαμε είναι πολύ μικρά οπότε μπορούμε να συνεχίσουμε να χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση αυτή.

Θέλοντας τώρα να ενσωματώσουμε και τον όγκο σε μηδενική θερμοκρασία, ανατρέχουμε στον δοσμένο από τους Donnelly και Brooks τύπο της καταστατικής για τη θερμοκρασία του απολύτου 0.

$$\begin{aligned} A0 &= 560 \\ A1 &= 1.057 \cdot 10^4 \\ A2 &= 7.33 \cdot 10^4 \\ \rho_0 &= 0.145119 \end{aligned}$$

Πίνακας 6.4.4 – πηγή [1]
Σταθερές εξίσωσης 6.4.5

$$P_{\text{zero}}(\rho) := A0 \cdot (\rho - \rho_0) + A1 \cdot (\rho - \rho_0)^2 + A2 \cdot (\rho - \rho_0)^3 \quad 6.4.5 - \text{πηγή [1]}$$

$$\begin{aligned} \rho_x &:= 0.14 \\ \rho_{\text{zero}}(P) &:= \text{root}(P - P_{\text{zero}}(\rho_x), \rho_x) \end{aligned} \quad 6.4.6$$

Οπότε για όλο το φάσμα των θερμοκρασιών τελικά θα έχουμε:

$$V(T, P) := \begin{cases} \frac{1}{\rho_{\text{zero}}(P)} & \text{if } T = 0 \\ V_{\text{tconst}}(T, P) & \text{otherwise} \end{cases} \quad 6.4.7$$

Η παραπάνω λοιπόν αποτελεί μία πλήρως λειτουργική συνάρτηση για τον όγκο του Hell συναρτήσει της θερμοκρασίας και της πίεσης για εύρος θερμοκρασιών από 0-Tλ και πιέσεων από 0-25atm.

Υπολογισμός θερμοδυναμικών μεγεθών

Στη συνέχεια με βάση το φάσμα και τη συνάρτηση που καταστρώσαμε παραπάνω για την ενέργεια των quasiparticles, συναρτήσει της ορμής, της πίεσης και της θερμοκρασίας, σε συνδυασμό με την ακριβή θερμοδυναμική συνάρτηση του όγκου που κατασκευάσαμε, θα προχωρήσουμε στον υπολογισμό υπολοίπων θερμοδυναμικών μεγεθών.

Ο τρόπος υπολογισμού των θερμοδυναμικών μεγεθών θα γίνει μέσω των αρχών της στατιστικής φυσικής, όπου ουσιαστικά για τα διάφορα μεγέθη θα ολοκληρώσουμε τις ορμές των quasiparticles από το 0 μέχρι το άπειρο, περνώντας έτσι τις αθροιστικές ιδιότητες του μακροσκοπικού συστήματος με βάση όλες τις πιθανές καταστάσεις των σωματιδίων αυτών ανάλογα με την πιθανότητά τους, που δίνεται ουσιαστικά από το προαναφερθέν φάσμα των ενεργειών τους.

Οι τύποι των οποίων έγινε χρήση είναι βασισμένοι σ' αυτούς των Donnelly και Brooks της αντίστοιχης εργασίας.

Αρχικά κάνουμε χρήση του number density που ορίσαμε παραπάνω σε μία τροποποιημένη μορφή, έχοντας αφαιρέσει τη σταθερά του Planck, η οποία απλοποιείται στη συνέχεια στους τελικούς τύπους, οπότε το τελικό στάδιο δεν επηρεάζεται αλλά στο παρόν στάδιο αποφεύγουμε τη φόρτωση του υπολογιστικού προγράμματος με δυσχαιρείς αριθμούς.

$$n(p, T, P) := \left[e^{\left(\frac{E(p, T, P)}{T} - 1 \right)} \right]^{-1} \quad 6.4.8$$

Αρχικά θα προβούμε σε υπολογισμό του C_V

Ορίζουμε πρώτα βοηθητική συνάρτηση:

$$dn_T(p, T, P) := \frac{d}{dT} n(p, T, P) \quad 6.4.9$$

Και κατόπιν ο τύπος της ειδικής θερμότητας υπό σταθερό όγκο θα είναι:

$$C_V(T, P) := \frac{V(T, P)}{2 \cdot \pi^2} \cdot \frac{6.6256}{1.38054} \int_0^3 E(p, T, P) \cdot (dn_T(p, T, P)) \cdot p^2 dp \quad 6.4.10$$

Εδώ πρέπει να τονιστεί ότι ο τύπος διαφέρει σε δύο βασικά σημεία από αυτόν που δίνεται από τους Donnelly και Brooks. Αρχικά για να έχουμε ομοιομορφία στις μονάδες, χρειάστηκε να πολλαπλασιάσουμε με τις αντίστοιχες σταθερές, και στην ολοκλήρωση, ολοκληρώνουμε από το

0 έως το 3 κι όχι έως το άπειρο, καθώς για τις ανάγκες του υπολογιστικού προγράμματος έπρεπε να επιλέξουμε ένα πεπερασμένο όριο για το ολοκλήρωμα, οπότε κρίνοντας από το διάγραμμα που ουσιαστικά τελειώνει στο 2.5 το 3 φαντάζει κοντύτερα στο άπειρο. Επίσης, πάνω στο κομμάτι αυτό έγιναν έλεγχοι και παρατηρήθηκε ότι με οποιοδήποτε άκρο ολοκληρώματος πρακτικά μεγαλύτερο από 2.8 τα αποτελέσματα της συνάρτησης είναι πρακτικά τα ίδια.

Στη συνέχεια προβαίνουμε στον υπολογισμό της ελεύθερης ενθαλπίας κατά Gibbs και κατά Helmholtz. Με τον υπολογισμό της συνάρτησης Gibbs συναρτήσεως του T,P τελικά θα έχουμε δημιουργήσει μία θεμελιώδη εξίσωση για το Hell, από την οποία έπειτα κατά τα γνωστά θα μπορούν θερμοδυναμικά να υπολογιστούν όλα τα λοιπά μεγέθη.

Helmholtz free energy

$$F(T, P) := \frac{V(T, P)}{2 \cdot \pi^2} \cdot \int_{0.001}^T \frac{1}{T} dT \cdot \int_0^3 \frac{E(p, T, P)}{3} \cdot \left(\frac{d}{dp} n(p, T, P) \right) \cdot p^3 dp \cdot 1.38056 + -0.874410^{-6} \quad 6.4.11$$

Ο παραπάνω τύπος διαφέρει με τον δοσμένο και πάλι όσον αφορά τον συντελεστή για τις μονάδες καθώς και στην πρόσθεση μιας αρχικής τιμής όπως και ο αρχικός τύπος επιζητά.

Ομοίως θα υπολογίσουμε και την ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs.

$$\Phi(T, P) := \frac{1}{2 \cdot \pi^2} \cdot \int_{0.001}^T \frac{1}{T} dT \cdot \int_0^3 \frac{E(p, T, P)}{3} \cdot \left(\frac{d}{dp} n(p, T, P) \right) \cdot p^3 dp \cdot 1.38056 + -0.874410^{-6} \quad 6.4.12$$

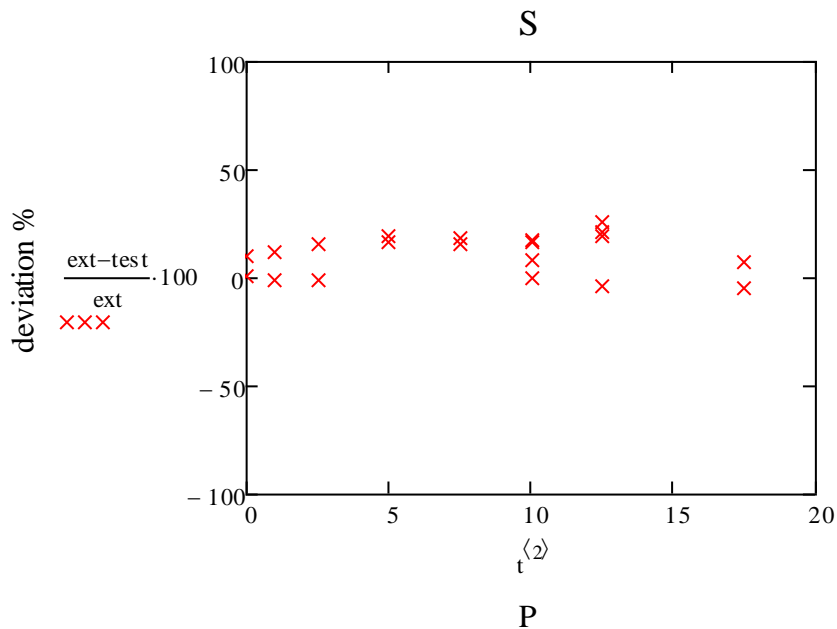
Τέλος θα υπολογίσουμε κατ' ανάλογο τρόπο και την εντροπία του υπερρευστού.

$$S(T,P) := \frac{V(T,P)}{2 \cdot \pi^2} \cdot \frac{10}{1.38054} \int_0^3 \left(\frac{n(p,T,P) \cdot E(p,T,P)}{T} + k \ln(1 + n(p,T,P)) \right) \cdot p^2 dp \quad 6.4.13$$

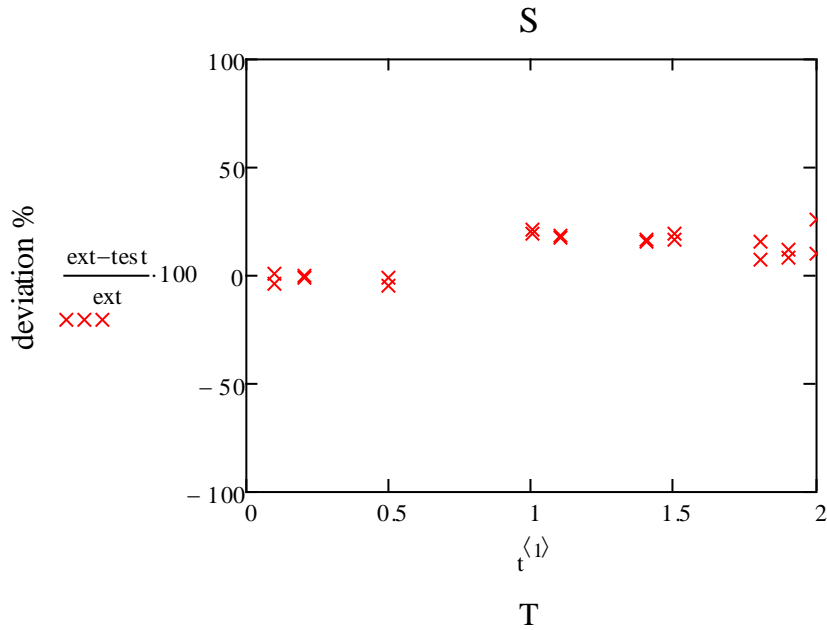
Θέλουμε στη συνέχεια να ελέγξουμε τις παραπάνω θερμοδυναμικές συναρτήσεις με τις δοσμένες από τους συγγραφείς πειραματικές τιμές.

(Λόγω μεγάλης χρονικής διάρκειας ο έλεγχος δεν έγινε σε όλα τα πειραματικά σημεία, καθώς αυτό δεν μπορούσε να υποστηριχθεί από το υπολογιστικό πρόγραμμα που χρησιμοποιήσαμε, συνεπώς επιλέξαμε κάποια ενδεικτικά σημεία από όλο το φάσμα των πιέσεων και των θερμοκρασιών, ώστε να μπορέσουμε να κρίνουμε συνολικά τα αποτελέσματά μας.)

Όσον αφορά την εντροπία έχουμε:

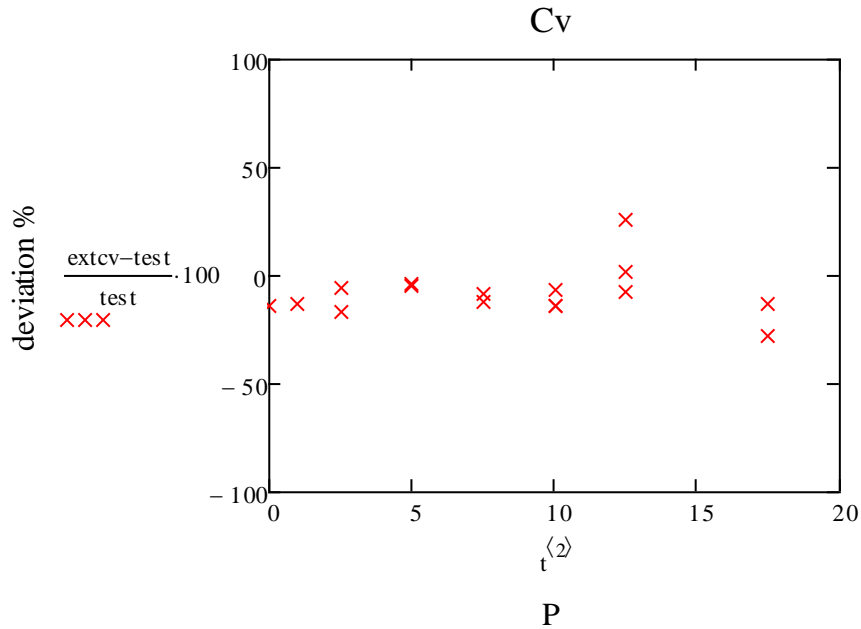


Διάγραμμα 6.4.7: % απόκλισης συνάρτησης εντροπίας από τις πειραματικές τιμές συναρτήσει πίεσης

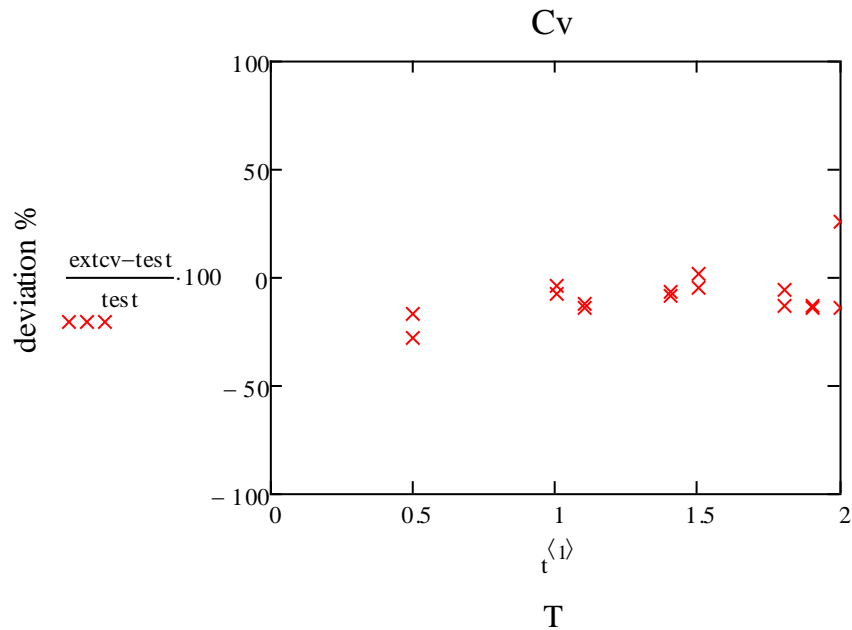


Διάγραμμα 6.4.8: % απόκλισης συνάρτησης εντροπίας από τις πειραματικές τιμές συναρτήσει θερμοκρασίας

Στην συνέχεια παρουσιάζονται οι αποκλίσεις που αφορούν το C_v στις ανάλογες τιμές:



Διάγραμμα 6.4.9: % απόκλισης συνάρτησης C_v από τις πειραματικές τιμές συναρτήσει πίεσης



Διάγραμμα 6.4.10: % απόκλισης συνάρτησης C_v από τις πειραματικές τιμές συναρτήσει θερμοκρασίας

Από τα παραπάνω διαγράμματα καθώς και από επιμέρους συγκεκριμένους ελέγχους τιμών βλέπουμε ότι οι παραπάνω εξισώσεις που έχουμε κατασκευάσει, μας δίνουν μια ικανοποιητικά καλή αναπαράσταση των πειραματικών τιμών δεδομένου ότι αποτελούν καθαρά θεωρητικές εξισώσεις που έχουν προέλθει με χρήση θερμοδυναμικής και μοντέλων στατιστικής φυσικής.

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών: [MathCad references\brooks report 4.0.xmcd](#)

7 Vapor

Έχοντας προσδιορίσει πλέον τις ιδιότητες του υπερρευστού, προχωρούμε στη μελέτη του Ηλίου 4 στην αέρια φάση του.

7.1 Θεωρητική Μελέτη

Αρχικά θα προσπαθήσουμε ανατρέχοντας σε υπάρχουσες δημοσιεύσεις να αναπαράγουμε, να ελέγξουμε και, κατά το δυνατόν, να βελτιώσουμε τα αποτελέσματα που έχουν δοθεί.

Το Ήλιο 4 γενικά όπως γνωρίζουμε μπορεί προσεγγιστικά να θεωρηθεί και να μελετηθεί ως τέλειο αέριο. Αυτό ωστόσο είναι κάτι που ισχύει στις υψηλές θερμοκρασίες. Στις χαμηλότερες θερμοκρασίες κάτι τέτοιο δεν ισχύει.

Για το λόγο αυτό αρχικά θα ανατρέξουμε στην εργασία του McCarty 1990 σύμφωνα με την οποία, με βάση πειραματικά δεδομένα, μελέτησε τη συμπεριφορά του αερίου Ηλίου 4 σε θερμοκρασίες μεγαλύτερες από την Τλ.

Αναφερόμενη δημοσίευση:[3] [Text references\McCarty 1990 Adv Cryog Democritus.pdf](#)

Ο McCarty στην εξίσωσή του αυτή επιλέγει να κάνει χρήση αδιάστατων μεγεθών, ανηγμένα ως προς την κρίσιμη θερμοκρασία* ανάλογα.

$$R = 0.00831431$$

$$T_c = 5.19\text{K}$$

$$\tau(T) = \frac{T}{T_c}$$

*Η κρίσιμη θερμοκρασία είναι $T_c=5.193\text{K}$ και αποτελεί τη θερμοκρασία υγροποίησης του Ηλίου 4 σε ατμοσφαιρική πίεση. Είναι σημαντικό η θερμοκρασία αυτή να μην μπερδεύεται με την Τλ, που αποτελεί τη θερμοκρασία εμφάνισης του superfluid.

Η εξίσωση που καταστρώνει ο συγγραφέας συνδέει την πίεση του αερίου με την πυκνότητα και τη θερμοκρασία. Και η μορφή της είναι η ακόλουθη:

$$\begin{aligned}
 P(\rho, T) = & \rho \cdot R \cdot T + \rho^2 \cdot \left(N_1 \cdot T + N_2 \cdot T^{\frac{1}{2}} + N_3 + \frac{N_4}{T} + \frac{N_5}{T^2} \right) + \rho^3 \cdot \left(N_6 \cdot T + N_7 + \frac{N_8}{T} + \frac{N_9}{T^2} \right) + \dots \\
 & + \rho^4 \cdot (N_{10} \cdot T + N_{11} + N_{12}) + \rho^5 \cdot N_{13} + \rho^6 \cdot \left(\frac{N_{14}}{T} + \frac{N_{15}}{T^2} \right) + \rho^7 \cdot \frac{N_{16}}{T} + \rho^8 \cdot \left(\frac{N_{17}}{T} + \frac{N_{18}}{T^2} \right) + \dots \\
 & + \rho^9 \cdot \left(\frac{N_{19}}{T^2} \right) + \rho^3 \cdot \left(\frac{N_{20}}{T^2} + \frac{N_{21}}{T^3} \right) \cdot e^{(-\tau(T) \cdot \rho^2)} + \rho^5 \cdot \left(\frac{N_{22}}{T^2} + \frac{N_{23}}{T^4} \right) \cdot e^{(-\tau(T) \cdot \rho^2)} + \dots \\
 & + \rho^7 \cdot \left(\frac{N_{24}}{T^2} + \frac{N_{25}}{T^3} \right) \cdot e^{(-\tau(T) \cdot \rho^2)} + \rho^9 \cdot \left(\frac{N_{26}}{T^2} + \frac{N_{27}}{T^4} \right) \cdot e^{(-\tau(T) \cdot \rho^2)} + \dots \\
 & + \rho^{11} \cdot \left(\frac{N_{28}}{T^2} + \frac{N_{29}}{T^3} \right) \cdot e^{(-\tau(T) \cdot \rho^2)} + \rho^{13} \cdot \left(\frac{N_{30}}{T^2} + \frac{N_{31}}{T^3} + \frac{N_{32}}{T^4} \right) \cdot e^{(-\tau(T) \cdot \rho^2)}
 \end{aligned}$$

7.1.1

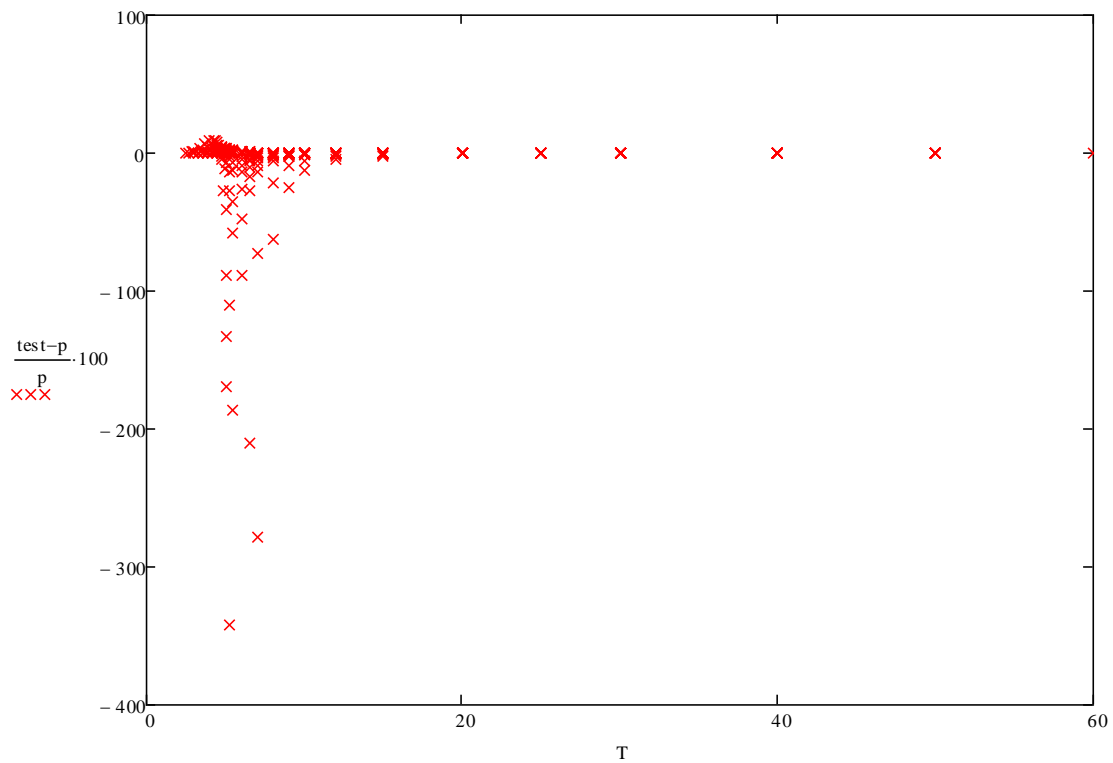
Όπως βλέπουμε η παραπάνω εξίσωση για να λειτουργήσει κάνει αναφορά σε συντελεστές οι οποίοι δίνονται ακολούθως:

N		N	
1	4.559000E-05	16	-1.038000E-10
2	1.261000E-03	17	6.447000E-13
3	-7.140000E-03	18	3.299000E-11
4	9.729000E-03	19	-3.556000E-13
5	-1.600000E-02	20	-6.885000E-03
6	1.454000E-06	21	9.166000E-03
7	-4.708000E-05	22	-6.544000E-06
8	1.133000E-03	23	-3.315000E-05
9	2.411000E-03	24	-2.068000E-08
10	-5.094000E-09	25	3.850000E-08
11	2.700000E-06	26	-1.399000E-11
12	-3.954000E-05	27	-1.888000E-12
13	1.552000E-09	28	-4.595000E-15
14	1.051000E-08	29	6.873000E-15
15	-5.501000E-08	30	0.000000E+00
		31	0.000000E+00
		32	0.000000E+00

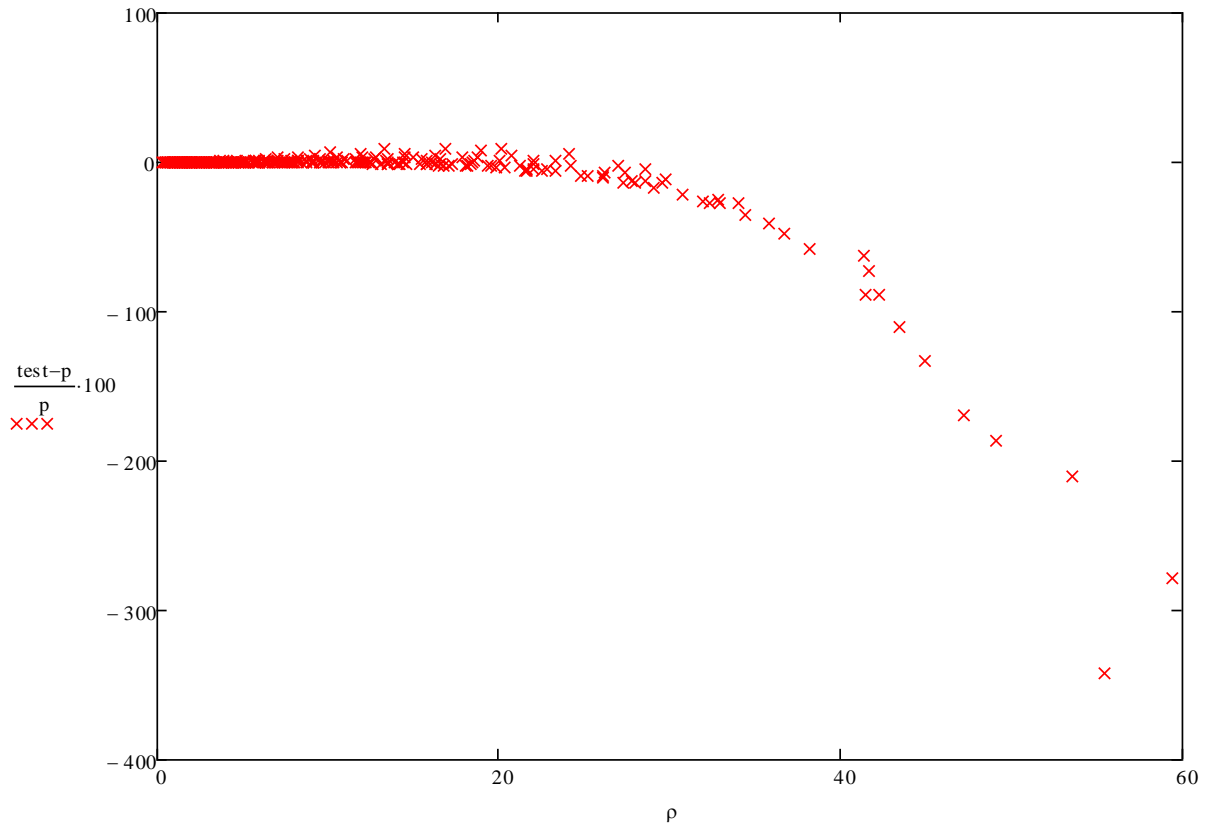
Πίνακας 7.1.1: Σταθερές εξίσωσης 7.1.1

Με βάση την παραπάνω εξίσωση θέλουμε τώρα να αναπαράγουμε τις τιμές στις οποίες γίνεται αναφορά. Οι τιμές που κάνει αναφορά αρχικά ο συγγραφέας είναι οι τιμές δοθείσες στην εργασία του ίδιου το 1980, ωστόσο εμείς κρίνουμε ως σωστότερη τη σύγκριση με τις τιμές των οποίων γίνεται σήμερα χρήση, δηλαδή τις πειραματικές τιμές που έδωσε πάλι ο McCarty μεταγενέστερα σε εργασία του το 1998.

Οπότε οι αποκλίσεις της συνάρτησης από τις τιμές αυτές δίνονται στα ακόλουθα διαγράμματα συναρτήσει με την πίεση και τη θερμοκρασία αντίστοιχα:



Διάγραμμα 7.1.1: % απόκλισης τιμών συνάρτησης πίεσης σε σχέση με τις πειραματικές συναρτήσεις της θερμοκρασίας



Διάγραμμα 7.1.2: % απόκλισης τιμών συνάρτησης πίεσης σε σχέση με τις πειραματικές συναρτήσεις της πυκνότητας

Σε πρώτη φάση τα αποτελέσματα των διαγραμμάτων αυτών μπορεί να φαίνονται να μας ξενίζουν καθώς βλέπουμε υψηλά σφάλματα για αρκετά σημεία.

Εν συνεχεία όμως ανατρέχοντας στις επακριβείς τιμές που μας δίνει η εξίσωση, σύντομα συνειδητοποιούμε ότι εμφανίζει μεγάλα σφάλματα στις τιμές που η πυκνότητα είναι σε πολύ μεγάλες τιμές και η θερμοκρασία σε πολύ χαμηλές. Αυτό συμβαίνει καθώς στα χωρία αυτά το Ήλιο 4 πλησιάζει προς το υγρό και μπορεί να βρίσκεται στη διφασική περιοχή. Αυτό είναι κάτι που επιβεβαιώνεται μελετώντας τις δοσμένες πειραματικές τιμές καθώς εκεί διαφαίνεται πως για τις πυκνότητες αυτές, σε αυτές τις θερμοκρασίες, εκτός από την τιμή που δίνεται για το αέριο, δίνεται και τιμή για υγρό, συνεπώς μπορούμε να πούμε ότι πιθανότατα στις τιμές δεν βρίσκουμε αμιγώς αέριο, ή τουλάχιστον οι πειραματικές τιμές δεν αφορούν αμιγώς αέριο, οπότε γ' αυτό δεν περιγράφονται με τόση σαφήνεια από την εξίσωση.

Μπορούμε ωστόσο να δούμε ότι οι αποκλίσεις της εξίσωσης αυτής είναι μηδαμινές, όταν αναφερόμαστε καθαρά σε αέριο οπότε είναι μια εξίσωση της οποίας μπορεί να γίνει χρήση.

Τέλος λειτουργώντας αντίστροφα από την παραπάνω εξίσωση παρουσιάζουμε εν συντομία και μία συνάρτηση που να μας δίνει την πυκνότητα συναρτήσει της θερμοκρασίας και της πίεσης:

$$\text{dens0}(\rho, p, T) := \text{root}(P(\rho, T) - p, \rho) \quad 7.1.2$$

$$\text{dens}(p, T) := \text{dens0}(2, p, T) \quad 7.1.3$$

Ο λόγος που επιλέξαμε το 2 ως αρχική τιμή σύγκλισης είναι καθώς γενικά ανήκει κοντά στην τάξη μεγέθους που περιμένουμε το αποτέλεσμα.

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών: [MathCad references\McCarty 1990 2.1+ diag .xmcd](#)

7.2 Πειραματική Μελέτη

Παραπάνω μας δόθηκε η δυνατότητα με τη χρήση της εξίσωσης του McCarty να δώσουμε μία καταστατική εξίσωση για το αέριο Ήλιο 4 στις χαμηλές θερμοκρασίες.

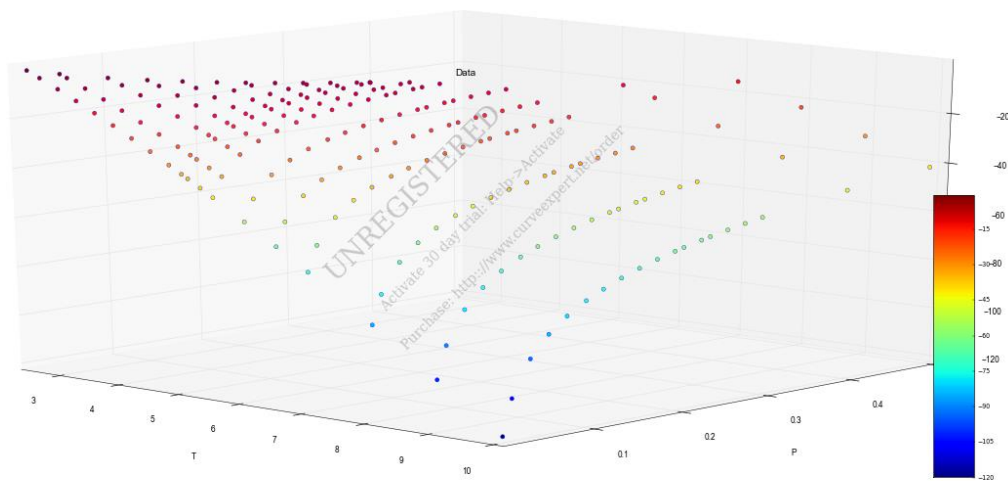
Ωστόσο η εξίσωση αυτή όπως είδαμε, παρότι περιγράφει πολύ ικανοποιητικά το αμιγές αέριο Ήλιο, αποτυγχάνει ως ένα βαθμό να μας περιγράψει τις περιοχές που μπορεί να υπάρχει και υγρό. Επίσης η εξίσωση αυτή αποτελεί όπως είπαμε σύνδεση της πίεσης με την πυκνότητα και τη θερμοκρασία, οπότε δεν αποτελεί μία θεμελιώδη θερμοδυναμική εξίσωση ώστε να μπορεί να αναπαράγει όλα τα υπόλοιπα θερμοδυναμικά στοιχεία.

Για το λόγο αυτό κρίναμε σκόπιμο, να χρησιμοποιήσουμε τα πειραματικά δεδομένα του ιδίου που δημοσίευσε το 1998, ώστε να μπορέσουμε να καταστρώσουμε μία εξίσωση που να μπορεί να ικανοποιεί τα παραπάνω.

Η εξίσωση που επιλέγουμε να κατασκευάσουμε είναι αυτή της ελεύθερης ενέργειας Gibbs συναρτήσει με την πίεση και τη θερμοκρασία, που αποτελεί θεμελιώδη συνάρτηση.

Η λογική που έχουμε ακολουθήσει είναι να περάσουμε μία συνάρτηση μέσα από τα πειραματικά δεδομένα της ελεύθερης ενέργειας Gibbs, τέτοια ώστε να μπορεί να διέρχεται από αυτά με μεγάλη ακρίβεια και επίσης να είναι αρκετά ομαλή, ώστε να έχει κατάλληλους παραγώγους. Εν συνεχεία, θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση αυτή, ώστε να αναπαράγουμε λοιπά θερμοδυναμικά στοιχεία με τα οποία και πάλι θα γίνει έλεγχος έναντι των πειραματικών.

Τα πειραματικά λοιπόν στοιχεία, όπως μας δίνονται στους πίνακες, μας δίνουν το ακόλουθο διάγραμμα:



7.2.1: 3D διάγραμμα πειραματικών δεδομένων $G[\text{kJ/kgK}]-P[\text{bar}]-T[\text{K}]$

Κατά τις πρώτες μας δοκιμές γίνεται αντιληπτό ότι για να περάσουμε σε σφάλματα που να είναι κάποιες τάξεις μεγέθους μικρότερα από αυτά της εξίσωσης του McCarty, ένα απλό πολυώνυμο δεν θα είναι αρκετό.

Για το λόγο αυτό, καθώς γνωρίζουμε ότι στο σημείο που το μελετάμε το Ήλιο είναι αέριο, επιλέξαμε να «εμπλουτίσουμε» ουσιαστικά το πολυώνυμό μας με όρους ανάλογους με αυτούς που χρησιμοποιούνται σε καταστατικές εξισώσεις άλλων στοιχείων. Συγκεκριμένα, η αναφορά μας ήταν η μορφή της αρχικής εξίσωσης του 1980 McCarty όσον αφορά την αδιαστατητοποίηση των μεγεθών και η συνάρτηση IAPWS για τον ατμό, όπου είδαμε ότι εμπεριέχει και αντίστροφους όρους θερμοκρασίας και πίεσης καθώς και υψηλές δυνάμεις. Για το λόγο αυτό στην τελική μας εξίσωση επιλέξαμε να χρησιμοποιήσουμε ένα πλήρως εκτεταμένο πολυώνυμο 5^{ου} βαθμού ως προς τις δύο μεταβλητές, ακολουθούμενο από 5 εκθετικούς ως προς την αδιάστατη θερμοκρασία και αντίστροφους ως προς την πίεση καθώς και άλλους 25 ανάλογους δυνάμεων της θερμοκρασίας και αντιστρόφως ανάλογους της πίεσης.

Συνεπώς η εξίσωση που προέκυψε έχει την ακόλουθη μορφή:

$$G(T,P) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \left(C_{i,j} \cdot T^i \cdot P^j \right) + e^{5.193} \cdot \sum_{i=1}^M \left(b_i \cdot P^{-i} \right) + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \left(k_j \cdot P^{-j} \cdot T^i \right) \quad 7.2.1\alpha$$

Ωστόσο καθώς έχει και πάλι γίνει χρήση ενδιάμεσου κώδικα για τη μεταφορά των συντελεστών από το CurveExpert στο Mathcad και αυτή τη φορά η συνάρτηση είναι αρκετά πολυπλοκότερη, προτείνουμε στον αναγνώστη για μεγαλύτερη λεπτομέρεια όσον αφορά την παραπάνω συνάρτηση καθώς και τον ακριβή προσδιορισμό και ονομασία των συντελεστών της, να ανατρέξει στο επισυναπτόμενο αντίστοιχα στο τέλος αρχείο Mathcad.

Ανοιγμένη σε μορφή text η παραπάνω εξίσωση γράφεται ως ακολούθως:

$$G(T,P) = c_1 \cdot T^0 \cdot P^0 + c_2 \cdot T^0 \cdot P^1 + c_3 \cdot T^0 \cdot P^2 + c_4 \cdot T^0 \cdot P^3 + c_5 \cdot T^0 \cdot P^4 + c_6 \cdot T^0 \cdot P^5 + c_7 \cdot T^1 \cdot P^0 + c_8 \cdot T^1 \cdot P^1 + c_9 \cdot T^1 \cdot P^2 + c_{10} \cdot T^1 \cdot P^3 + c_{11} \cdot T^1 \cdot P^4 + c_{12} \cdot T^1 \cdot P^5 + c_{13} \cdot T^2 \cdot P^0 + c_{14} \cdot T^2 \cdot P^1 + c_{15} \cdot T^2 \cdot P^2 + c_{16} \cdot T^2 \cdot P^3 + c_{17} \cdot T^2 \cdot P^4 + c_{18} \cdot T^2 \cdot P^5 + c_{19} \cdot T^3 \cdot P^0 + c_{20} \cdot T^3 \cdot P^1 + c_{21} \cdot T^3 \cdot P^2 + c_{22} \cdot T^3 \cdot P^3 + c_{23} \cdot T^3 \cdot P^4 + c_{24} \cdot T^3 \cdot P^5 + c_{25} \cdot T^4 \cdot P^0 + c_{26} \cdot T^4 \cdot P^1 + c_{27} \cdot T^4 \cdot P^2 + c_{28} \cdot T^4 \cdot P^3 + c_{29} \cdot T^4 \cdot P^4 + c_{30} \cdot T^4 \cdot P^5 + c_{31} \cdot T^5 \cdot P^0 + c_{32} \cdot T^5 \cdot P^1 + c_{33} \cdot T^5 \cdot P^2 + c_{34} \cdot T^5 \cdot P^3 + c_{35} \cdot T^5 \cdot P^4 + c_{36} \cdot T^5 \cdot P^5 + \exp(a_0 \cdot T/5.193) \cdot b_1 \cdot P^{-1} + \exp(a_0 \cdot T/5.193) \cdot b_2 \cdot P^{-2} + \exp(a_0 \cdot T/5.193) \cdot b_3 \cdot P^{-3} + \exp(a_0 \cdot T/5.193) \cdot b_4 \cdot P^{-4} + \exp(a_0 \cdot T/5.193) \cdot b_5 \cdot P^{-5} + T^1 \cdot k_1 \cdot P^{-1} + T^1 \cdot k_2 \cdot P^{-2} + T^1 \cdot k_3 \cdot P^{-3} + T^1 \cdot k_4 \cdot P^{-4} + T^1 \cdot k_5 \cdot P^{-5} + T^2 \cdot k_6 \cdot P^{-1} + T^2 \cdot k_7 \cdot P^{-2} + T^2 \cdot k_8 \cdot P^{-3} + T^2 \cdot k_9 \cdot P^{-4} + T^2 \cdot k_{10} \cdot P^{-5} + T^3 \cdot k_{11} \cdot P^{-1} + T^3 \cdot k_{12} \cdot P^{-2} + T^3 \cdot k_{13} \cdot P^{-3} + T^3 \cdot k_{14} \cdot P^{-4} + T^3 \cdot k_{15} \cdot P^{-5} + T^4 \cdot k_{16} \cdot P^{-1} + T^4 \cdot k_{17} \cdot P^{-2} + T^4 \cdot k_{18} \cdot P^{-3} + T^4 \cdot k_{19} \cdot P^{-4} + T^4 \cdot k_{20} \cdot P^{-5} + T^5 \cdot k_{21} \cdot P^{-1} + T^5 \cdot k_{22} \cdot P^{-2} + T^5 \cdot k_{23} \cdot P^{-3} + T^5 \cdot k_{24} \cdot P^{-4} + T^5 \cdot k_{25} \cdot P^{-5}$$

7.2.1β

Με τους συντελεστές της αντίστοιχα να είναι:

	c		c
1	4.264700E+02	19	-1.686100E+01
2	-9.720860E+02	20	-5.900000E-02
3	-6.041400E+01	21	2.775540E+02
4	1.832350E+02	22	-5.936000E+00
5	-1.606000E+05	23	-5.228010E+02
6	4.652000E+05	24	-3.074000E+03
7	-2.493450E+02	25	2.276000E+00
8	6.381300E+01	26	-6.247000E+00
9	2.039000E+03	27	-6.890000E-01
10	1.028000E+04	28	-3.198000E+01
11	3.406000E+04	29	1.088990E+02
12	-2.035000E+05	30	9.511500E+01
13	7.060500E+01	31	-1.120000E-01
14	1.536080E+02	32	4.920000E-01
15	-1.817000E+03	33	-1.168000E+00
16	-9.926940E+02	34	3.416000E+00
17	-1.016000E+03	35	-6.718000E+00
18	3.615000E+04	36	9.350000E-01

Πίνακας 7.2.1: Σταθερές εξίσωσης 7.2.1β

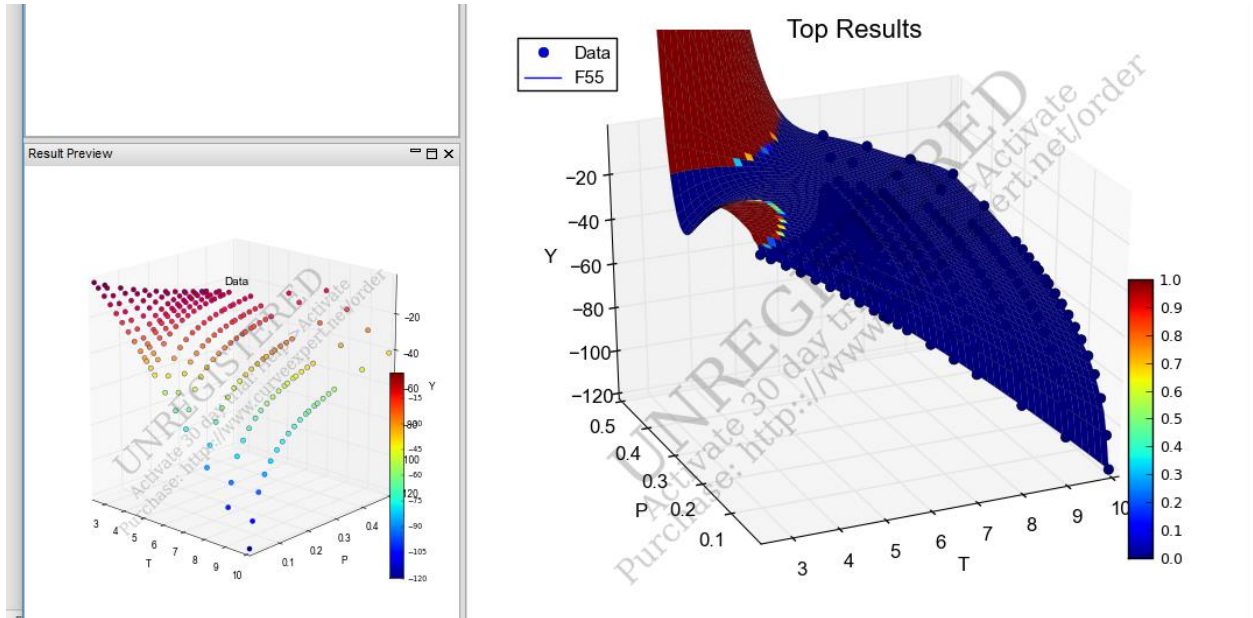
	k
1	56.764
2	-3.891
3	0.124
4	-1.74E-03
5	8.41E-06
6	-13.578
7	0.966
8	-0.031
9	4.41E-04
10	-2.13E-06
11	2.986
12	-0.2
13	6.29E-03
14	-8.77E-05
15	4.20E-07
16	-0.305
17	0.019
18	-5.69E-04
19	7.78E-06
20	-3.69E-08
21	0.013
22	-7.57E-04
23	2.20E-05
24	-2.95E-07
25	1.39E-09

Πίνακας 7.2.2: Σταθερές εξίσωσης 7.2.1β

	b
1	-6.077800E+01
2	3.983000E+00
3	-1.240000E-01
4	1.736000E-03
5	-8.324000E-06

Πίνακας 7.2.3: Σταθερές εξίσωσης 7.2.1β

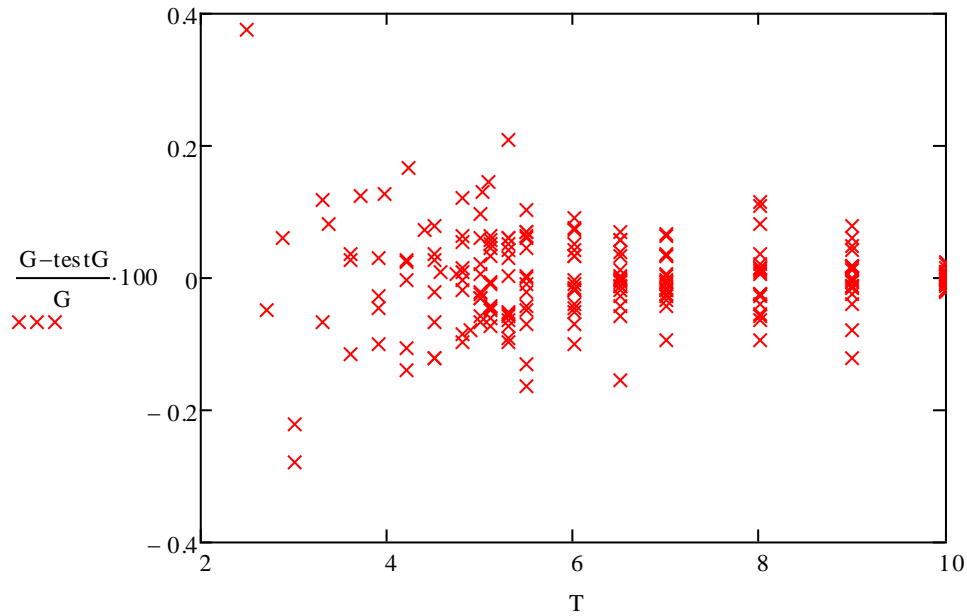
Δημιουργώντας αυτή λοιπόν την εξίσωση θέλουμε να διαπιστώσουμε ότι είναι ομαλή στο χωρίο των πειραματικών σημείων και ανάμεσα από αυτά.



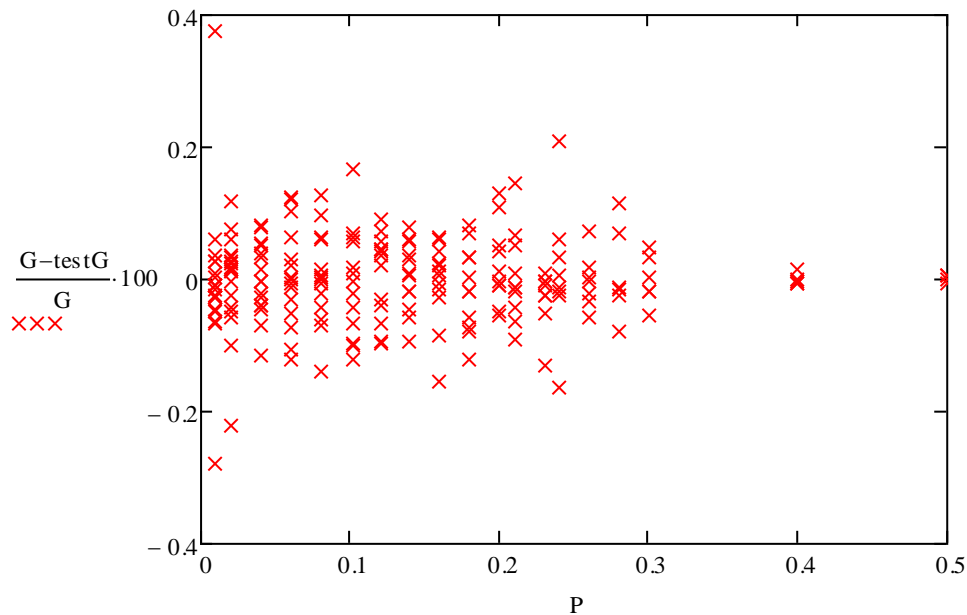
7.2.2: 3D Διαγράμματα τιμών συνάρτησης Gibbs[kJ/kgK]. Αριστερά πειραματικές τιμές, δεξιά πειραματικές τιμές και γράφημα συνάρτησης

Μπορούμε λοιπόν από το παραπάνω διάγραμμα να καταλάβουμε ότι όντως η συνάρτησή μας, παρά την πολυπλοκότητά της είναι κατάλληλη να περιγράψει ομαλά τη τα ζητούμενα σημεία.

Θέλουμε τώρα να διαπιστώσουμε κατά πόσον η συνάρτησή μας αυτή έχει καλύτερη ακρίβεια από την υπάρχουσα, αναζητούμε λοιπόν τις αποκλίσεις από τα πειραματικά δεδομένα οι οποίες φαίνονται στα ακόλουθα διαγράμματα:



Διάγραμμα 7.2.3 % απόκλισης τιμών συνάρτησης Gibbs [kJ/kgK] σε σχέση με τις πειραματικές συναρτήσεις θερμοκρασίας



Διάγραμμα 7.2.4: % απόκλισης τιμών συνάρτησης Gibbs [kJ/kgK] σε σχέση με τις πειραματικές συναρτήσεις πιέσεων [bar]

Στα παραπάνω διαγράμματα βλέπουμε ξεκάθαρα ότι η συνάρτησή μας είναι εξαιρετική στην περιγραφή των πειραματικών στοιχείων καθώς μας προσφέρει ακρίβεια δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη από αυτή του McCarty.

Εν συνεχεία θέλουμε να διαπιστώσουμε κατά πόσον με χρήση της συνάρτησης αυτής έχουμε τη δυνατότητα να αναπαράγουμε και λοιπά θερμοδυναμικά μεγέθη, όπως άλλωστε ήταν και αρχικά ο σκοπός της και γι' αυτό επιλέχθηκε θεμελιώδης.

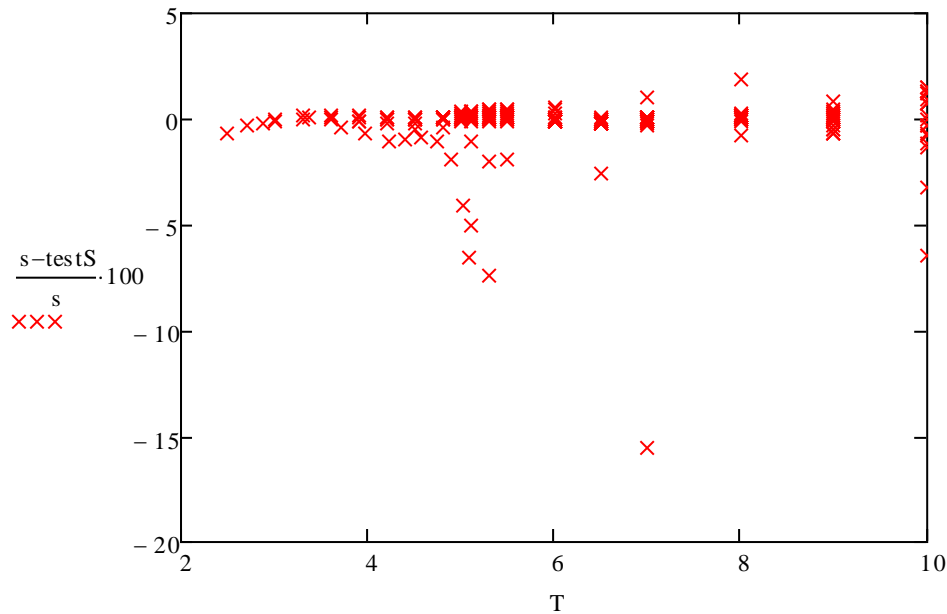
Αναζητούμε αρχικά την εντροπία ως ακολούθως:

$$dG = -S \cdot dT + v \cdot dp \quad 7.2.2$$

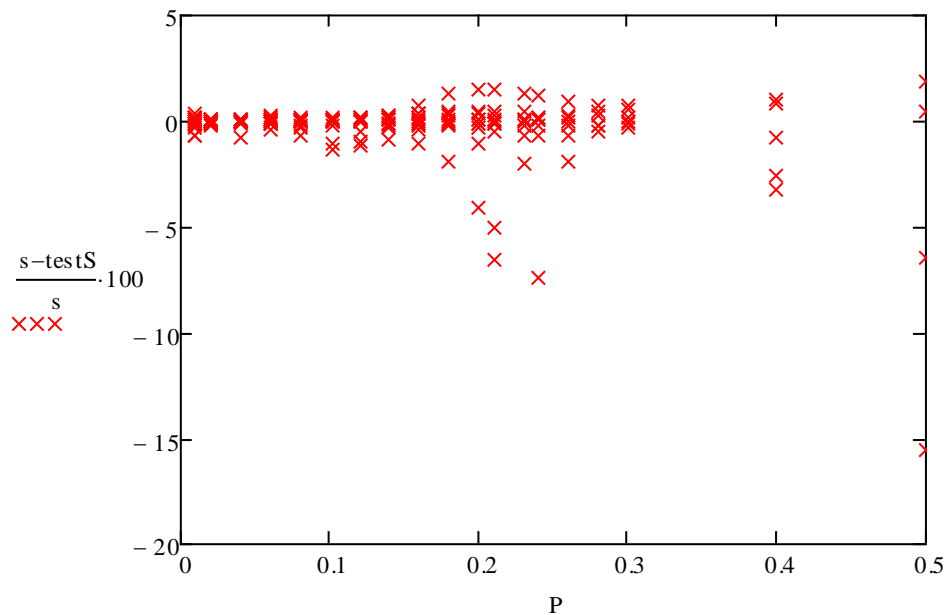
$$dG = \left(\frac{d}{dT} G \right)_P \cdot dT + \left(\frac{d}{dp} G \right)_T \cdot dp \quad 7.2.3$$

$$S(T, P) := - \frac{d}{dT} \text{Gibbs}(T, P) \quad 7.2.4$$

Και τα σφάλματα που μας βγάζει βγαίνουν ως:



Διάγραμμα 7.2.5: % απόκλιση τιμών συνάρτησης εντροπία από πειραματικές συναρτήσεις θερμοκρασίας



Διάγραμμα 7.2.6: % απόκλιση τιμών συνάρτησης εντροπία από πειραματικές συναρτήσεις πίεσης [bar]

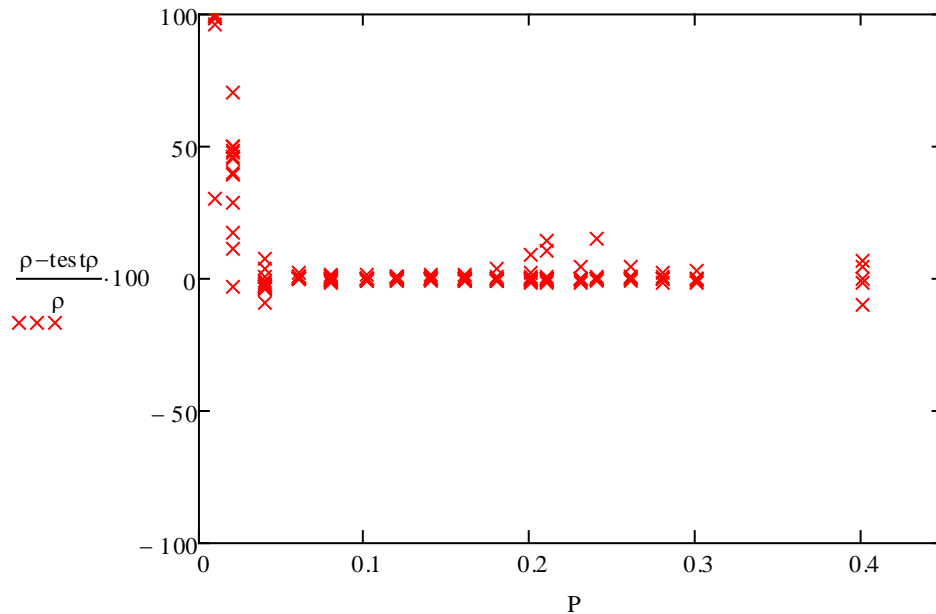
Με βάση τα παραπάνω διαγράμματα βλέπουμε ότι λόγω της παραγωγής αυξήθηκε κατά μία τάξη μεγέθους το σφάλμα όπως περιμέναμε, ωστόσο και πάλι το αποτέλεσμα είναι πολύ ικανοποιητικό και μπορεί να περιγράψει με ακρίβεια την εντροπία του συστήματος.

Κατόπιν θα υπολογίσουμε και την πυκνότητα μέσα από τις παραπάνω σχέσεις οπότε θα μας προκύψει ως:

$$v(T, P) := \left(\frac{d}{dP} \text{Gibbs}(T, P) \right) \quad 7.2.5$$

$$\text{dens}(T, P) := \left(\frac{1}{v(T, P)} \right) \quad 7.2.6$$

Άρα οι αποκλίσεις της θα είναι:



Διάγραμμα 7.2.7: % απόκλιση τιμών συνάρτησης πυκνότητας από πειραματικές συναρτήσεις πίεσης [bar]

Όσον αφορά την πυκνότητα, τα αποτελέσματα θα μπορούσε να πει κανείς ότι δεν είναι αντίστοιχα ενθαρρυντικά με την εντροπία, ωστόσο και πάλι ερχόμαστε στο γεγονός ότι βλέπουμε ότι η συνάρτησή μας χάνει σε ακρίβεια στις περιοχές συνύπαρξης ρευστού και υγρού. Επίσης αξίζει να σημειωθεί ότι ακόμη και στις περιοχές αυτές το σφάλμα μας είναι κατά μία τάξη μεγέθους μικρότερο από αυτό της δοθείσας συνάρτησης.

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών: [MathCad references\Properties \(T,P\) Vapor up to 10K F55.xmcd](#)

8 Liquid

Θα μελετήσουμε τώρα την περιοχή του HeI, δηλαδή την περιοχή του το Ήλιο είναι σε υγρή κατάσταση αλλά δεν είναι υπερρευστό.

Κάνοντας ενδελεχή έρευνα στη βιβλιογραφία, καταβάλλαμε αρχικά προσπάθεια να γίνει αναπαράσταση εξισώσεων που έχουν δημοσιευθεί κατά καιρούς και περιγράφουν τις ιδιότητες του Ηλίου στην περιοχή αυτή.

Αυτό ωστόσο που παρατηρήσαμε ήταν ότι γενικά οι εξισώσεις για την περιοχή αυτή στις οποίες είχαμε πρόσβαση, δεν είχαν τη δυνατότητα να παράγουν αυτά τα οποία ισχυρίζονταν. Αυτό πιθανότατα οφείλεται στο γεγονός ότι οι δημοσιεύσεις που είχαμε πρόσβαση και αφορούσαν το κομμάτι αυτό, ήταν ιδιαίτερα παλαιές, οπότε ακόμη και η διαφορά στον τρόπο των υπολογισμών καθώς και στην πληθώρα των συντελεστών που δεν υπήρχαν σε ψηφιακή μορφή πιθανώς να οδήγησαν στην αδυναμία αυτή. Επίσης, παρατηρήσαμε ότι σε σχέση με τις υπόλοιπες περιοχές αυτή η περιοχή αποτελεί περιοχή ιδιαίτερα χαμηλού ενδιαφέροντος με αποτέλεσμα να μην υπάρχει μεγάλη βιβλιογραφία ώστε να ανατρέξουμε.

Για τους παραπάνω λόγους αποφασίσαμε να καταστρώσουμε μία δική μας συνάρτηση κατ' αναλογία με το πώς δουλέψαμε στο αέριο ώστε να περιγράψουμε το HeI.

Η συνάρτηση που είχαμε κατασκευάσει στην περιγραφή του αερίου ήταν μία αρκετά περίπλοκη συνάρτηση που είχε ωστόσο τη δυνατότητα να περιγράψει ομαλώς χωρία σημείων. Επίσης όπως είχε προαναφερθεί και τότε μεγάλο κομμάτι της συνάρτησης αυτής είναι βασισμένο στην εξίσωση του McCarty του 1980 που ουσιαστικά αποτελεί μία εξίσωση εν μέρη κατασκευασμένη ώστε να περιγράφει το HeI, οπότε αναμένουμε να έχει θετικά αποτελέσματα.

Αναφερόμενη δημοσίευση: [Text references\McCarty1980.pdf](#)

Αυτή τη φορά κατά την προσπάθεια κατάλληλης εφαρμογής της εξίσωσης στα πειραματικά δεδομένα συνειδητοποιήσαμε ότι παίρνουμε καλύτερα αποτελέσματα αυξάνοντας το βαθμό του πολυωνύμου αρκετά και μειώνοντας τον αριθμό των ακόλουθων όρων. Συνεπώς καταλήξαμε σε μία εξίσωση η οποία αποτελούνταν αρχικά από πλήρως ανηγμένο ως προς τις δύο μεταβλητές πολυώνυμο 9^{ου} βαθμού, 2 εκθετικούς ως προς τη θερμοκρασία και αντίστροφους ως προς την πίεση όρους, καθώς και 4 αντίστροφους ως προς την πίεση και ανάλογους προς τη θερμοκρασία όρους.

Η εξίσωση λοιπόν είναι και πάλι της μορφής:

$$G(T,P) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \left(C_{i,j} \cdot T^i \cdot P^j \right) + e^{\frac{T}{5.193}} \cdot \sum_{i=1}^M \left(b_i \cdot P^{-i} \right) + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \left(k_j \cdot P^{-j} \cdot T^i \right) \quad 8.1\alpha$$

Και πλήρως ανοιγμένη θα γράφεται ως:

$$G(T,P) = c_1 \cdot T^0 \cdot P^0 + c_2 \cdot T^0 \cdot P^1 + c_3 \cdot T^0 \cdot P^2 + c_4 \cdot T^0 \cdot P^3 + c_5 \cdot T^0 \cdot P^4 + c_6 \cdot T^0 \cdot P^5 + c_7 \cdot T^0 \cdot P^6 + c_8 \cdot T^0 \cdot P^7 + c_9 \cdot T^0 \cdot P^8 + c_{10} \cdot T^0 \cdot P^9 + c_{11} \cdot T^1 \cdot P^0 + c_{12} \cdot T^1 \cdot P^1 + c_{13} \cdot T^1 \cdot P^2 + c_{14} \cdot T^1 \cdot P^3 + c_{15} \cdot T^1 \cdot P^4 + c_{16} \cdot T^1 \cdot P^5 + c_{17} \cdot T^1 \cdot P^6 + c_{18} \cdot T^1 \cdot P^7 + c_{19} \cdot T^1 \cdot P^8 + c_{20} \cdot T^1 \cdot P^9 + c_{21} \cdot T^2 \cdot P^0 + c_{22} \cdot T^2 \cdot P^1 + c_{23} \cdot T^2 \cdot P^2 + c_{24} \cdot T^2 \cdot P^3 + c_{25} \cdot T^2 \cdot P^4 + c_{26} \cdot T^2 \cdot P^5 + c_{27} \cdot T^2 \cdot P^6 + c_{28} \cdot T^2 \cdot P^7 + c_{29} \cdot T^2 \cdot P^8 + c_{30} \cdot T^2 \cdot P^9 + c_{31} \cdot T^3 \cdot P^0 + c_{32} \cdot T^3 \cdot P^1 + c_{33} \cdot T^3 \cdot P^2 + c_{34} \cdot T^3 \cdot P^3 + c_{35} \cdot T^3 \cdot P^4 + c_{36} \cdot T^3 \cdot P^5 + c_{37} \cdot T^3 \cdot P^6 + c_{38} \cdot T^3 \cdot P^7 + c_{39} \cdot T^3 \cdot P^8 + c_{40} \cdot T^3 \cdot P^9 + c_{41} \cdot T^4 \cdot P^0 + c_{42} \cdot T^4 \cdot P^1 + c_{43} \cdot T^4 \cdot P^2 + c_{44} \cdot T^4 \cdot P^3 + c_{45} \cdot T^4 \cdot P^4 + c_{46} \cdot T^4 \cdot P^5 + c_{47} \cdot T^4 \cdot P^6 + c_{48} \cdot T^4 \cdot P^7 + c_{49} \cdot T^4 \cdot P^8 + c_{50} \cdot T^4 \cdot P^9 + c_{51} \cdot T^5 \cdot P^0 + c_{52} \cdot T^5 \cdot P^1 + c_{53} \cdot T^5 \cdot P^2 + c_{54} \cdot T^5 \cdot P^3 + c_{55} \cdot T^5 \cdot P^4 + c_{56} \cdot T^5 \cdot P^5 + c_{57} \cdot T^5 \cdot P^6 + c_{58} \cdot T^5 \cdot P^7 + c_{59} \cdot T^5 \cdot P^8 + c_{60} \cdot T^5 \cdot P^9 + c_{61} \cdot T^6 \cdot P^0 + c_{62} \cdot T^6 \cdot P^1 + c_{63} \cdot T^6 \cdot P^2 + c_{64} \cdot T^6 \cdot P^3 + c_{65} \cdot T^6 \cdot P^4 + c_{66} \cdot T^6 \cdot P^5 + c_{67} \cdot T^6 \cdot P^6 + c_{68} \cdot T^6 \cdot P^7 + c_{69} \cdot T^6 \cdot P^8 + c_{70} \cdot T^6 \cdot P^9 + c_{71} \cdot T^7 \cdot P^0 + c_{72} \cdot T^7 \cdot P^1 + c_{73} \cdot T^7 \cdot P^2 + c_{74} \cdot T^7 \cdot P^3 + c_{75} \cdot T^7 \cdot P^4 + c_{76} \cdot T^7 \cdot P^5 + c_{77} \cdot T^7 \cdot P^6 + c_{78} \cdot T^7 \cdot P^7 + c_{79} \cdot T^7 \cdot P^8 + c_{80} \cdot T^7 \cdot P^9 + c_{81} \cdot T^8 \cdot P^0 + c_{82} \cdot T^8 \cdot P^1 + c_{83} \cdot T^8 \cdot P^2 + c_{84} \cdot T^8 \cdot P^3 + c_{85} \cdot T^8 \cdot P^4 + c_{86} \cdot T^8 \cdot P^5 + c_{87} \cdot T^8 \cdot P^6 + c_{88} \cdot T^8 \cdot P^7 + c_{89} \cdot T^8 \cdot P^8 + c_{90} \cdot T^8 \cdot P^9 + c_{91} \cdot T^9 \cdot P^0 + c_{92} \cdot T^9 \cdot P^1 + c_{93} \cdot T^9 \cdot P^2 + c_{94} \cdot T^9 \cdot P^3 + c_{95} \cdot T^9 \cdot P^4 + c_{96} \cdot T^9 \cdot P^5 + c_{97} \cdot T^9 \cdot P^6 + c_{98} \cdot T^9 \cdot P^7 + c_{99} \cdot T^9 \cdot P^8 + c_{100} \cdot T^9 \cdot P^9 + \exp(a_0 \cdot T / 5.193) \cdot b_1 \cdot P^{-1} + \exp(a_0 \cdot T / 5.193) \cdot b_2 \cdot P^{-2} + T^1 \cdot k_1 \cdot P^{-1} + T^1 \cdot k_2 \cdot P^{-2} + T^2 \cdot k_3 \cdot P^{-1} + T^2 \cdot k_4 \cdot P^{-2}$$

8.1β

Με αντίστοιχα συντελεστές:

i	C	i	C	i	C	i	C	i	C
1	-1.1754E+01	21	-6.9338E+01	41	-3.4178E+01	61	-1.8640E+00	81	5.7660E-03
2	9.0513E+01	22	1.1170E+00	42	-2.7215E+01	62	-3.6970E+00	82	-1.9800E-01
3	-1.3610E+03	23	1.2045E+02	43	1.8117E+02	63	-3.5630E+00	83	4.7700E-01
4	1.3740E+04	24	8.6966E+02	44	2.9181E+02	64	-5.5552E+01	84	-5.8620E+00
5	-7.8510E+04	25	-1.0210E+03	45	-7.4320E+03	65	-1.8583E+02	85	1.5534E+01
6	2.2220E+05	26	1.6070E+03	46	3.3570E+03	66	-4.8774E+01	86	1.4560E+00
7	-6.8120E+03	27	-2.0030E+05	47	2.2400E+04	67	2.2810E+03	87	4.8019E+01
8	-1.7340E+06	28	1.6870E+05	48	-1.1030E+05	68	-5.6056E+02	88	-4.1993E+02
9	3.5630E+06	29	2.0640E+05	49	3.5200E+04	69	-2.8670E+04	89	3.6843E+02
10	-1.5570E+06	30	6.9310E+05	50	2.4320E+05	70	3.3890E+04	90	1.5642E+02
11	3.8970E+01	31	6.4223E+01	51	1.0669E+01	71	1.3800E-01	91	-1.3250E-03
12	2.6592E+01	32	1.6311E+01	52	1.3978E+01	72	8.2400E-01	92	2.6000E-02
13	-9.3038E+02	33	-2.9770E+01	53	-6.7893E+01	73	3.4050E+00	93	-2.2300E-01
14	9.9960E+03	34	-3.7200E+03	54	3.2318E+02	74	5.2880E+00	94	1.6610E+00
15	-5.9230E+04	35	2.7890E+04	55	6.9323E+02	75	1.6909E+01	95	-5.8130E+00
16	1.3010E+05	36	-7.4270E+04	56	3.7220E+03	76	-9.8424E+01	96	6.7000E+00
17	6.2310E+04	37	1.9480E+05	57	-1.5770E+04	77	-1.7010E+02	97	7.1730E+00
18	2.8400E+05	38	-5.6190E+04	58	2.2350E+03	78	3.9324E+02	98	-2.0525E+01
19	-2.3710E+06	39	-2.2630E+05	59	1.3510E+05	79	4.2840E+03	99	3.1271E+01
20	2.2810E+06	40	-3.3430E+05	60	-1.9310E+05	80	-5.4860E+03	100	-3.8304E+01

Πίνακας 8.1: Σταθερές εξίσωσης 8.1β

$$k = \begin{pmatrix} -5.398 \times 10^{-4} \\ 3.309 \times 10^{-5} \\ -9.219 \times 10^{-4} \\ -5.13 \times 10^{-6} \end{pmatrix}$$

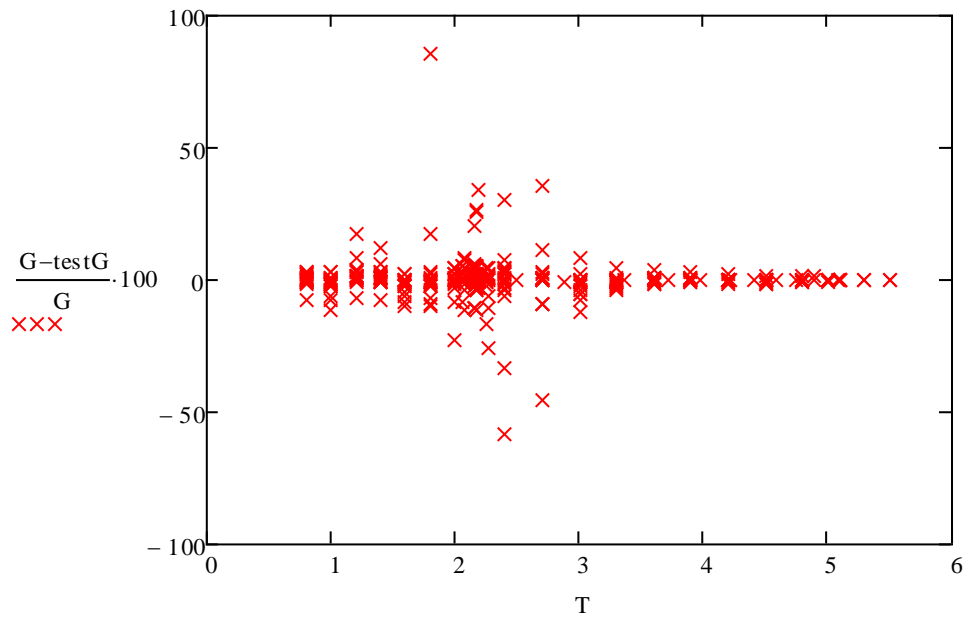
Πίνακας 8.2: Σταθερές εξίσωσης 8.1β

$$b = \begin{pmatrix} 0.037 \\ -1.914 \times 10^{-4} \end{pmatrix}$$

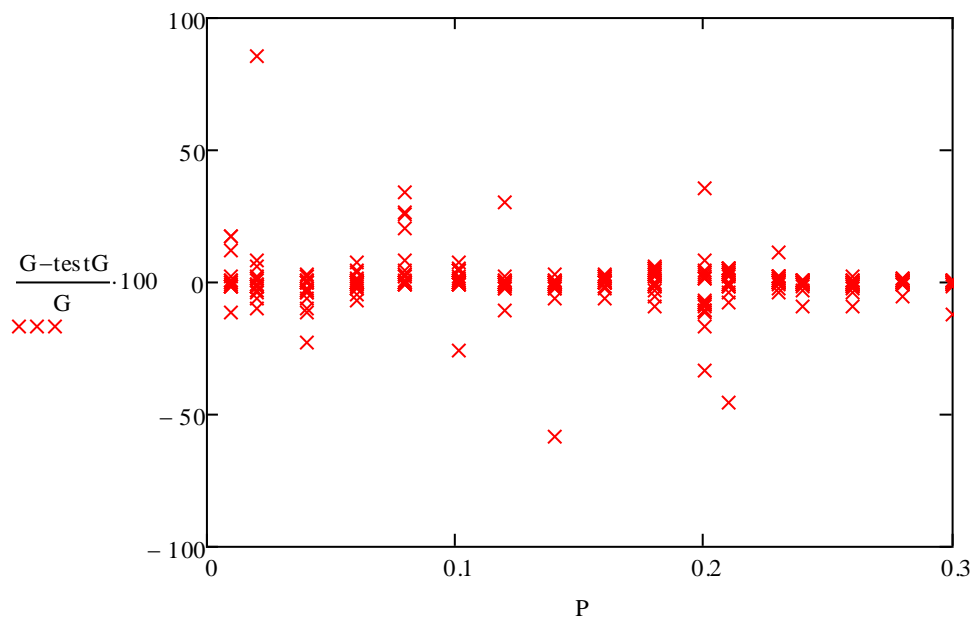
Πίνακας 8.3: Σταθερές εξίσωσης 8.1β

Και πάλι αναφέρουμε ότι για παραπάνω κατανόηση της συνάρτησης αυτής προτείνουμε την αναφορά στο αντίστοιχο συνημμένο αρχείο του Mathcad.

Θα δούμε τώρα κατά πόσον η εξίσωση που κατασκευάσαμε έχει τη δυνατότητα να περιγράψει επαρκώς τη συμπεριφορά του υγρού, βλέποντας πρώτα απ' όλα τις απευθείας αποκλίσεις της από τις πειραματικές τιμές:



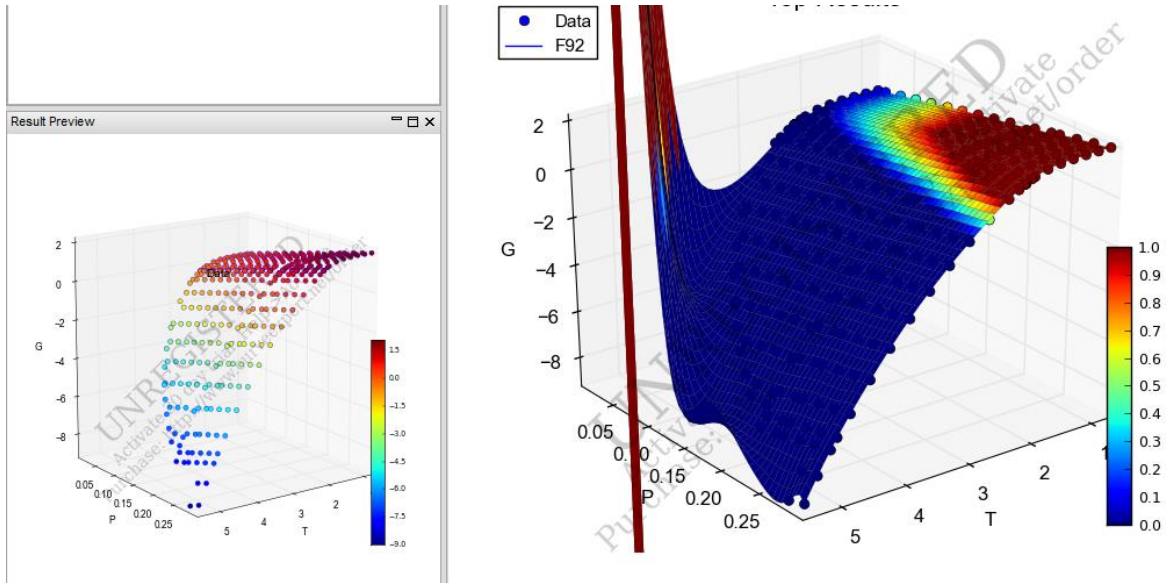
Διάγραμμα 8.1: % απόκλισης τιμών συνάρτησης Gibbs [kJ/kgK] σε σχέση με πειραματικές συναρτήσεις θερμοκρασίας



Διάγραμμα 8.2: % απόκλισης τιμών συνάρτησης Gibbs [kJ/kgK] σε σχέση με πειραματικές συναρτήσεις πίεσης [bar]

Βλέπουμε από τα παραπάνω διαγράμματα, ότι η ακρίβεια της συνάρτησης δεν είναι τόσο μεγάλη όσο θα θέλαμε. Αποτελεί ωστόσο μία σαφή βελτίωση σε σχέση με τις μη λειτουργικές εξισώσεις που είχαμε προηγουμένα αναφερθεί.

Διαγράμματα ελεύθερης ενέργειας Gibbs υγρού καθώς και της συνάρτησής μας σε σχέση με τα δεδομένα:



8.3: 3D διάγραμμα τιμών συνάρτησης Gibbs[kJ/kgK] συναρτήσει θερμοκρασίας [K] και πίεσης [bar]. Αριστερά πειραματικές τιμές, δεξιά πειραματικές τιμές και γράφημα συνάρτησης

Από το παραπάνω διάγραμμα σίγουρα διαφαίνεται ότι μπορούμε να πάρουμε κάποιες αρκούντως ικανοποιητικές τιμές από τη συνάρτηση, καθώς και το γεγονός ότι η κλίση της συνάρτησης είναι ομαλή.

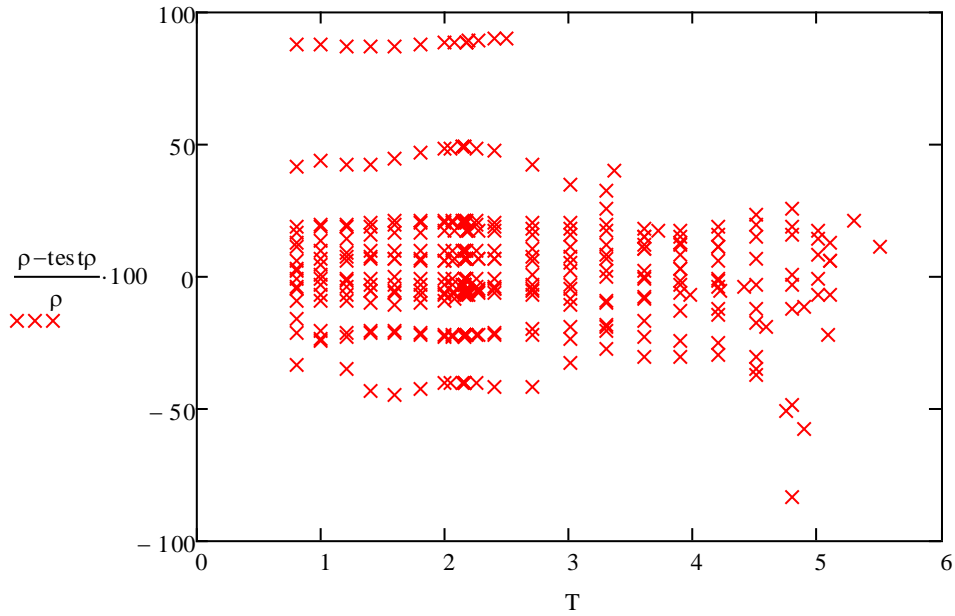
Βλέποντας ότι η κλίση της συνάρτησης είναι ομαλή, θέλουμε να διαπιστώσουμε αν και εφόσον αυτή είναι ικανή να μας δώσει ως θελειώδης εξίσωση και λοιπά θερμοδυναμικά μεγέθη.

Επιλέγουμε λοιπόν ως έλεγχο να παράγουμε και να συγκρίνουμε και πάλι με τις τιμές της πυκνότητας.

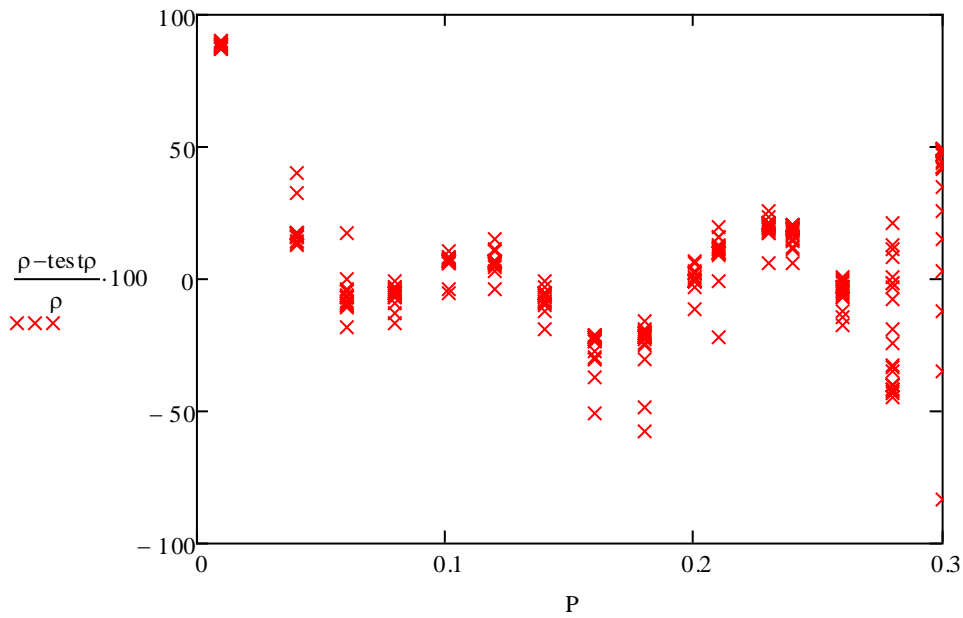
$$v(T, P) := \left(\frac{d}{dP} \text{Gibbs}(T, P) \right) \quad 8.2$$

$$\text{dens}(T, P) := \frac{1}{v(T, P)} \quad 8.3$$

Οπότε τα διαγράμματα με τις αποκλίσεις είναι τα ακόλουθα:



Διάγραμμα 8.4: % απόκλισης πειραματικών τιμών από τιμές συνάρτησης πυκνότητας συναρτήσει θερμοκρασίας



Διάγραμμα 8.5: % απόκλισης πειραματικών τιμών από τιμές συνάρτησης πυκνότητας συναρτήσει πίεσης

Από τα παραπάνω παρατηρούμε ότι η συνάρτησή μας δεν είναι ικανή να μας δώσει αποδεκτές τιμές για την πυκνότητα στην περιοχή αυτή. Συνεπώς η χρήση της πρέπει να περιοριστεί μονάχα ως αυτούσια συνάρτηση, με τα παράγωγα μεγέθη που δίνει να αποτελούν ίσως μόνο ένα σημείο αναφοράς για την τάξη μεγέθους, χωρίς κάποια αξία σε υπολογισμούς.

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών: [MathCad references\Properties \(T,P\) Liquid F92.xmcd](#)

9 Vapor Pressure

Για κάθε θερμοδυναμική μελέτη είναι ιδιαίτερα σημαντικό να γνωρίζουμε την τάση ατμών, συνάρτηση της θερμοκρασίας, καθώς με τον τρόπο αυτό μπορούμε να προσδιορίσουμε το χωρίο μεταξύ του υγρού και του αερίου.

Για τον προσδιορισμό της τάσης ατμών στο Ήλιο 4 θα κάνουμε χρήση αρχικά της εξίσωσης που έχει δώσει σε δημοσίευσή του ο Wagner ως ακολούθως:

Η εξίσωση είναι της μορφής:

$$F(\text{Tr}) = a_1 \cdot (1 - \text{Tr}) + a_2 \cdot (1 - \text{Tr})^{1.5} + a_3 \cdot (1 - \text{Tr})^{1.25} + a_4 \cdot (1 - \text{Tr})^{2.8} \quad 9.1 - \text{πηγή [4]}$$

Με συντελεστές:

$$a = \begin{pmatrix} -3.836 \\ 1.706 \\ -0.712 \\ 1.086 \end{pmatrix}$$

Πίνακας 8.1 – Πηγή [4]: Σταθερές εξίσωσης 9.1

Όπου Tr αποτελεί την ανηγμένη ως προς την κρίσιμη θερμοκρασία, και Pr ως προς την κρίσιμη πίεση αντίστοιχα:

$$P_c := 0.2274 \text{ GPa}$$

$$T_c := 5.195 \text{ K}$$

Παραγωγίζοντας την παραπάνω εξίσωση θα έχουμε:

$$dF(\text{Tr}) = \left[a_1 + 1.5a_2 \cdot (1 - \text{Tr})^{-0.5} + 1.25a_3 \cdot (1 - \text{Tr})^{-0.25} + 2.8a_4 \cdot (1 - \text{Tr})^{-1.8} \right] \quad 9.2$$

Οπότε θερμοδυναμικά θα ισχύει:

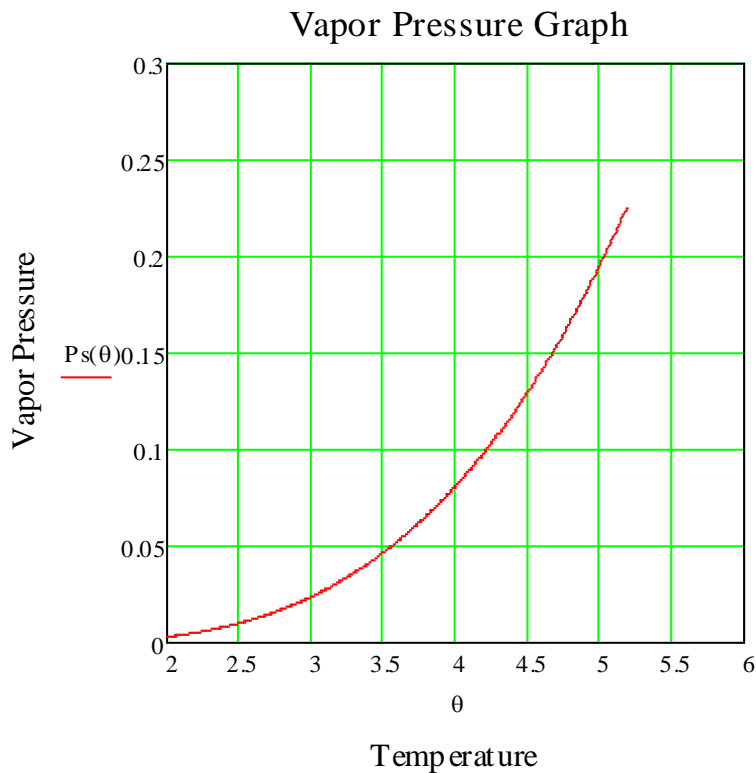
$$d \ln \text{Pr}(\text{Tr}) := \frac{dF(\text{Tr}) \cdot \text{Tr} - F(\text{Tr})}{\text{Tr}^2} \quad 9.3$$

Λύνοντας:

$$P_{sr}(T_r) := \exp\left(\frac{1}{T_r} \cdot F(T_r)\right) \quad 9.4$$

Και τέλος αντικαθιστώντας τις ανηγμένες τιμές θα έχουμε την επιζητούμενη εξίσωση ως:

$$P_s(T) = P_{sr}\left(\frac{T}{T_c}\right) \cdot P_c \quad 9.5$$

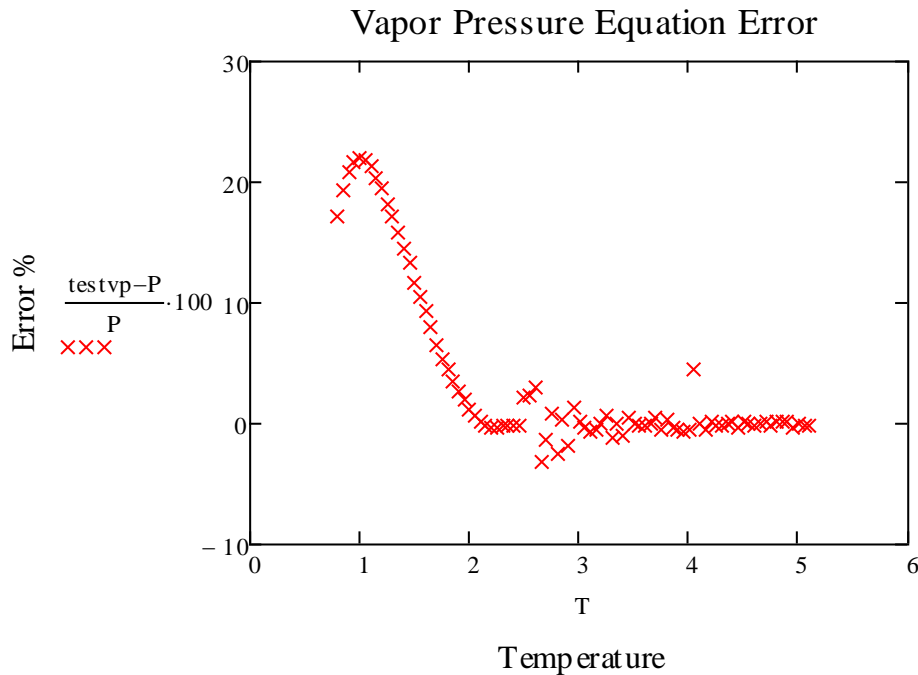


Διάγραμμα 9.1: πίεσης ατμών συναρτήσει θερμοκρασίας

Έχοντας πλέον κατασκευάσει την παραπάνω εξίσωση θέλουμε να ελέγξουμε την ικανότητά της ή όχι να περιγράψει με ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα. Τα πειραματικά δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την επαλήθευση της εξίσωσης αυτής είναι αυτά που έχουν δοθεί από το McCarty στη δημοσίευσή του το 1998.

Αναφερόμενη δημοσίευση: [4] [Text references\McCarty1998.pdf](#)

Με βάση αυτά και την εξίσωση που κατασκευάσαμε, φτιάχνουμε το ακόλουθο διάγραμμα με τα σφάλματα σε σχέση με τις πειραματικές τιμές:



Διάγραμμα 9.2: % απόκλιση τιμών τάσης ατμών από πειραματικές συναρτήσεις θερμοκρασίας

Με βάση το παραπάνω διάγραμμα βλέπουμε ότι μπορούμε να πούμε ότι η ακρίβεια της εξίσωσης αυτής διαφοροποιείται με βάση τη θερμοκρασία, αναλόγως με το αν αυτή είναι μεγαλύτερη ή μικρότερη από το T_L αντίστοιχα. Συγκεκριμένα βλέπουμε ότι για θερμοκρασίες μικρότερες από το T_L η ακρίβεια της συνάρτησης δεν είναι ιδανική, ωστόσο είναι ικανή ειδικά για άνω του ενός Kelvin να μας περιγράψει την πίεση ατμών. Κατόπιν ωστόσο βλέπουμε ότι εφόσον η θερμοκρασία περάσει την T_L , η συνάρτησή μας περιγράφει με απόλυτη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα της τάσης ατμών και μπορεί με σιγουριά να χρησιμοποιηθεί για υπολογισμούς.

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών: [MathCad references\Vapor pressure checked with mccarty 1998.xmcd](#)

10 Θερμοκρασία Τλ

Ιδιαίτερα σημαντικό στοιχείο για τη μελέτη του κρυογονικού Ηλίου 4 αποτελεί η θερμοκρασία Τλ. Η θερμοκρασία αυτή, όπως έχει προαναφερθεί, αποτελεί τη θερμοκρασία που καθορίζει το πότε θα αρχίσει να εμφανίζεται superfluid μέσα στο ρευστό Ήλιο.

Για αυτό το λόγο λοιπόν θέλουμε να προσδιορίσουμε πότε γίνεται η εναλλαγή αυτή, οπότε και να έχουμε κάποιες σχέσεις που να μας προσδίδουν την Τλ.

Αναφερόμενη δημοσίευση:[5] [Text references\State equation of liquid helium-4 from 0.8 to 2.5 K Arp.pdf](#)

Αρχικά για τον προσδιορισμό της θερμοκρασίας αυτής μπορούμε να ανατρέξουμε στο έργο του Arp, ο οποίος μας έχει πειραματικά προσδώσει μία εξίσωση που συνδέει άμεσα την θερμοκρασία Τλ με την πυκνότητα ως ακολούθως:

Η εξίσωση είναι της μορφής:

$$T_{\lambda}(v) := 2.1768 + \sum_{i=1}^5 (C_i \cdot v^i) \quad 10.1 - \text{πηγή [5]}$$

Με τους συντελεστές να είναι:

$$C := \begin{pmatrix} 0.091672438 \\ -0.082840336 \\ 0.071832749 \\ 0.048395170 \\ 0.039159012 \end{pmatrix}$$

Πίνακας 10.1 – πηγή [5]: Σταθερές εξίσωσης 10.1

Οπότε για να την μεταφέρουμε στις μονάδες και τις τιμές που χρησιμοποιούμε:

$$T_{\lambda}(v) = T_{\lambda} \left(v - \frac{1}{0.14615} \right) \quad 10.2 - \text{πηγή [5]}$$

$$T_{\lambda}(\rho) = T_{\lambda} \left(\frac{1}{\rho} \right) \quad 10.3$$

$$T_{\lambda}(\rho) = T_{\lambda} \left(\frac{\rho}{1000} \right) \quad 10.4$$

Ωστε τελικά να δέχεται τιμές σε kg/m³

Πρωθύστερα από τον Agr, εξίσωση προσδιορισμού της Τλ είχε δοθεί από τον McCarty, ο οποίος συσχέτισε την Τλ με την πίεση.

Η εξίσωσή του έχει τη μορφή:

$$T_{\text{lambda}}(p) := \sum_{i=1}^8 \left[A_i \cdot p^{(i-1)} \right] \quad 10.5$$

Με συντελεστές:

$$A := \begin{pmatrix} 2.172 \\ -8.944 \times 10^{-3} \\ -3.376 \times 10^{-4} \\ 2.042 \times 10^{-5} \\ -1.1 \times 10^{-6} \\ 3.397 \times 10^{-8} \\ -5.516 \times 10^{-10} \\ 3.422 \times 10^{-12} \end{pmatrix}$$

Πίνακας 10.2 – πηγή [5]: Σταθερές εξίσωσης 10.5

Τέλος θέλουμε να ελέγξουμε τις εξισώσεις αυτές και κατά πόσον μας δίνουν σωστά αποτελέσματα.

Από πειραματικές τιμές δοσμένες από το McCarty έχουμε ότι πειραματικά η Τλ είναι:

$$T\lambda := \begin{pmatrix} 2.176 \\ 2.172 \\ 2.168 \\ 2.164 \\ 2.158 \\ 2.152 \\ 2.143 \\ 2.1265 \\ 2.068 \end{pmatrix}$$

Πίνακας 10.3 – πηγή [5]

Για τα αντίστοιχα σημεία θερμοκρασίας και πίεσης:

$$\rho := \begin{pmatrix} 146.25 \\ 147.3 \\ 148.1 \\ 148.8 \\ 149.9 \\ 150.95 \\ 152.4 \\ 154.75 \\ 161.4 \end{pmatrix}$$

Πίνακας 10.4α

$$p := \begin{pmatrix} 0.01 \\ 0.06 \\ 0.0101325 \\ 0.14 \\ 0.2 \\ 0.26 \\ 0.35 \\ 0.5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

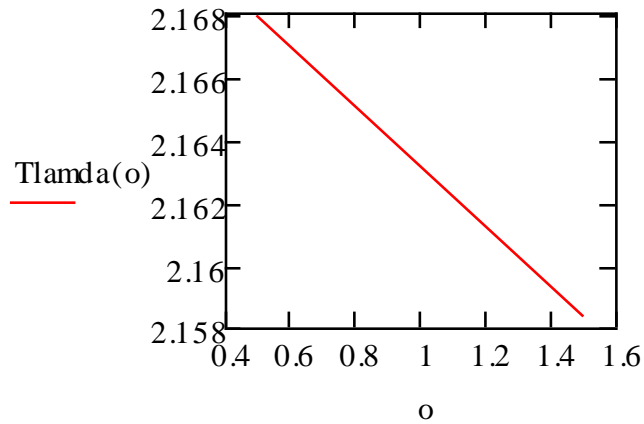
Πίνακας 10.4β

Οπότε με βάση τις παραπάνω συναρτήσεις παράγουμε τις τιμές στα σημεία αυτά και προκύπτει:

$$\text{test}T\lambda,\rho = \begin{pmatrix} 2.176 \\ 2.172 \\ 2.168 \\ 2.164 \\ 2.158 \\ 2.152 \\ 2.143 \\ 2.127 \\ 2.068 \end{pmatrix}$$

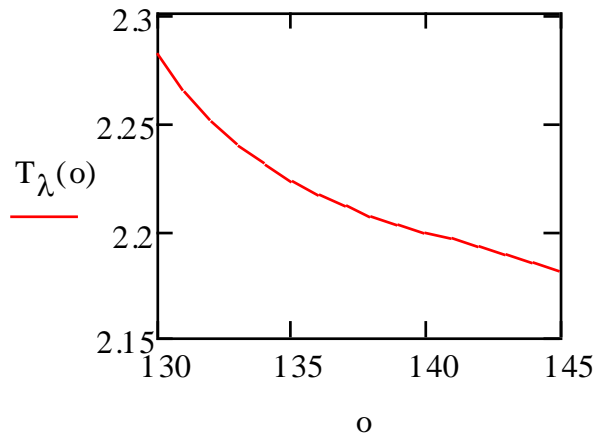
$$\text{test}T\lambda p = \begin{pmatrix} 2.172 \\ 2.171 \\ 2.172 \\ 2.171 \\ 2.17 \\ 2.17 \\ 2.169 \\ 2.167 \\ 2.163 \end{pmatrix}$$

Με βάση αυτό βλέπουμε ότι και οι δύο μας δίνουν εν δυνάμει σωστά αποτελέσματα, ωστόσο η εξίσωση του Arr μας δίνει επακριβώς κάθε φορά την τιμή, οπότε είναι αυτή που προτείνουμε για χρήση.



Διάγραμμα 10.1: T_{λ} συναρτήσει πίεσης

Στο παραπάνω διάγραμμα βλέπουμε την πτωτική τάση της κρίσιμης θερμοκρασίας συναρτήσει της πίεσης, πράγμα που περιμένουμε.



Διάγραμμα 10.2: T_{λ} συναρτήσει πυκνότητας

Αντίστοιχα παρατηρούμε και πάλι πτωτική τάση στην κρίσιμη θερμοκρασία με της αύξηση της πυκνότητας.

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών: [MathCad references\Tλ.xmcd](#)

11 Συναρτήσεις πινάκων

Από τις πινακοποιημένες τιμές για μεγαλύτερη ευκολία στον έλεγχο των τιμών των δικών μας συναρτήσεων, κρίναμε την ανάγκη αριθμητικής δημιουργίας κάποιων συναρτήσεων που να περιγράφουν τα βασικά θερμοδυναμικά μεγέθη των δοσμένων τιμών,.

Για την δημιουργία των συναρτήσεων αυτών κάναμε χρήση του υπολογιστικού προγράμματος Curve Expert μέσω του οποίου καταστρώσαμε διαφορετικές πολυωνυμικές εξισώσεις που να περιγράφουν κάθε φορά με κατάλληλη ακρίβεια τα αποτελέσματα.

Επίσης έχει δημιουργηθεί και ένας σύντομος κώδικας, όπως αυτός παρατίθεται στο παράρτημα, όπου δίνεται η δυνατότητα στον αναγνώστη να κατασκευάσει δικές του πολυωνυμικής μορφής και με κάποιους περαιτέρω μη γραμμικούς συντελεστές συναρτήσεις και να τις εισάγει απευθείας στο Mathcad.

11.1 Υπερρευστό

11.1.1 Εύρεση μορφής συνάρτησης θεωρητικά

Στην αρχή της εκπόνησης της διαδικασίας αυτής συνειδητοποιήσαμε την ιδιαίτερη δυσκολία περιγραφής των θερμοδυναμικών μεγεθών κάτω από τη θερμοκρασία του Τλ, στην περιοχή ουσιαστικά που μας απασχολεί περισσότερο. Ο λόγος που συνέβαινε αυτό ήταν διότι πλησιάζοντας στο απόλυτο μηδέν, οι τιμές των μεγεθών γίνονταν τόσο μικρές και οι τιμές μεταξύ τους είχαν πολλές τάξεις μεγέθους διαφορά, συνεπώς δεν μπορούσαμε να καταστρώσουμε μία οποιαδήποτε συνάρτηση πολυωνυμική ή όχι που να μας επιλύει το πρόβλημα αυτό.

Βλέποντας τη μορφή των διαγραμμάτων των τιμών, διαπιστώθηκε ότι θα ήταν καλό να δούμε μία φυσική προσέγγιση των θερμοδυναμικών συναρτήσεων στην περιοχή αυτή, ώστε να μπορέσουμε να έχουμε κάποια στοιχεία για την μορφή της συνάρτησης που περιμένουμε.

Ανατρέξαμε λοιπόν στους ακόλουθους υπολογισμούς στατιστικής φυσικής, ώστε να μπορέσουμε με φυσικό τρόπο να πάρουμε κάποιο στοιχείο για τη ζητούμενη αυτή συνάρτηση.

Για την επίλυση του φυσικού προβλήματος θα μπορούσαμε να κάνουμε χρήση της θεωρίας της ειδικής θερμότητας που διατυπώθηκε από τον Einstein με βάση τη στατιστική του Boltzmann, αλλά καθώς το σύστημά μας διέπεται εντέλει από τη στατιστική Bose-Einstein, θα επιλέξουμε να ακολουθήσουμε τη θεωρία του Debye για τον προσδιορισμό της ειδικής θερμότητας σε στερεά.

Ο λόγος που επιλέγουμε τη μέθοδο αυτή είναι καθώς κάνει χρήση της στατιστικής Bose-Einstein που συνάδει με το σύστημά μας, αλλά κυρίως γιατί έχει διαμορφωθεί για την περιγραφή των

ρηονης σε στερεά, οπότε ουσιαστικά μπορούμε να την εφαρμόσουμε και στο δικό μας σύστημα, το οποίο στις χαμηλές αυτές θερμοκρασίες, όπως έχει προαναφερθεί, περιγράφεται από το μοντέλο με τα ρηονης κατά τον Landau.

Θεωρούμε ένα κλειστό σύστημα σωματιδίων.

Οι κινήσεις των σωματιδίων σε μη μεταβατική κατάσταση του συστήματος μπορούν να μελετηθούν ως ταλαντώσεις, οπότε και ολόκληρο το στατιστικό σύστημα ως ένας ταλαντωτής.

Αναζητούμε τώρα να προσδιορίσουμε γενικά τη σχέση που μας δίνει τη δυναμική ενέργεια ενός κβαντικού ταλαντωτή, ώστε να την εφαρμόσουμε στη θεωρία για την ειδική θερμότητα.

Θεωρούμε N αριθμό διαφορετικών γραμμικών ταλαντωτών, ώστε να κάνουμε χρήση της στατιστικής Maxwell-Boltzmann.

Η εξίσωση της κίνησης του κάθε ταλαντωτή θα είναι κατά τα γνωστά από την κλασσική φυσική:

$$m \cdot \frac{d^2}{dt^2} x + K \cdot x = 0 \quad 11.1.1.1$$

Και αντίστοιχα η συχνότητα του ταλαντωτή θα δίνεται ως:

$$\nu := \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{K}{m}} \quad 11.1.1.2$$

Η ενέργεια του κάθε ταλαντωτή θα είναι αντίστοιχη του πλάτους της ταλάντωσης, δηλαδή:

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot K \cdot x_m^2 \quad 11.1.1.3$$

Το σύστημα ωστόσο που περιγράφουμε είναι κβαντικό, συνεπώς θα διέπεται από την εξίσωση του Schrodinger:

$$\frac{d^2}{dt^2} \Psi + \frac{2 \cdot m}{\hbar^2} (E - V(x)) \cdot \Psi = 0 \quad 11.1.1.4$$

Όπου αντίστοιχα το δυναμικό θα είναι:

$$V(x) = \frac{1}{2} \cdot K \cdot x^2 \quad 11.1.1.5$$

Λύνοντας την παραπάνω εξίσωση θα πάρουμε τις ιδιοτιμές:

$$E_j = \left(n_j + \frac{1}{2} \right) \cdot h \cdot \nu \quad 11.1.1.6$$

$$x_m = \left(2 \cdot \frac{E_j}{K} \right)^{\left(\frac{1}{2} \right)} \quad 11.1.1.7$$

Οπότε αντικαθιστώντας θα έχουμε:

$$x_m \rightarrow \sqrt{\frac{h \cdot \sqrt{\frac{K}{m}} \cdot \left(n_j + \frac{1}{2} \right)}{\pi \cdot K}} \quad 11.1.1.8$$

$$x_m^2 \rightarrow \frac{h \cdot \sqrt{\frac{K}{m}} \cdot \left(n_j + \frac{1}{2} \right)}{\pi \cdot K} \quad 11.1.1.9$$

Χρησιμοποιώντας στη συνέχεια την partition function του συστήματος:

$$Z = \sum_j e^{\left(\frac{-E_j}{k \cdot T} \right)} \quad 11.1.1.10$$

Όπου ουσιαστικά γίνεται άθροιση όλων των ιδιοτιμών του συστήματος.

Για να συνεχίσουμε την επίλυση υποθέτουμε ότι στη λύση επικρατούν οι πρώτες ιδιοτιμές της εξίσωσης (όπως άλλωστε ισχύει σε τέτοια συστήματα) συνεπώς προχωρούμε κάνοντας αναφορά στις 5 πρώτες ιδιοτιμές.

$$Z = \sum_{i=0}^4 e^{-\left(i+\frac{1}{2}\right) \cdot z} \quad 11.1.1.11$$

$$z = \frac{h \cdot v}{k \cdot T} \quad 11.1.1.12$$

$$Z \rightarrow e^{-\frac{z}{2}} + e^{-\frac{3 \cdot z}{2}} + e^{-\frac{5 \cdot z}{2}} + e^{-\frac{7 \cdot z}{2}} + e^{-\frac{9 \cdot z}{2}} \quad 11.1.1.13$$

Από το παραπάνω σημείο διαφαίνεται εύκολα ότι η συνάρτηση Z αποτελεί μία γεωμετρική πρόοδο, οπότε:

$$Z = e^{\left(\frac{-z}{2}\right)} \cdot \frac{1}{1 - e^{-z}} \quad 11.1.1.14$$

Ορίζουμε την χαρακτηριστική θερμοκρασία του συστήματος ως:

$$\theta = \frac{h \cdot v}{k} \quad 11.1.1.15$$

$$\theta \rightarrow \frac{h \cdot \sqrt{\frac{K}{m}}}{2 \cdot \pi \cdot k} \quad 11.1.1.16$$

$$Z = e^{\left(\frac{-\theta}{2 \cdot T}\right)} \cdot \frac{1}{1 - e^{\frac{-\theta}{2 \cdot T}}} \quad 11.1.1.17$$

Άρα το κλάσμα των ταλαντωτών με ενέργεια E θα μπορεί να υπολογιστεί ως:

$$\frac{N_{av_j}}{N} = \frac{1}{Z} \cdot e^{\frac{-E_j}{k \cdot T}} \quad 11.1.1.18$$

Οπότε αντικαθιστώντας:

$$\frac{N_{av_j}}{N} = \left[1 - e^{\left(\frac{-\theta}{T}\right)} \right] \cdot e^{\left(-n_j \cdot \frac{\theta}{T}\right)} \quad 11.1.1.19$$

Θεωρώντας λοιπόν τη μέση ανηγμένη ενέργεια του συστήματος:

$$N_{av'_j} = \frac{N_{av_j}}{N} \quad 11.1.1.20$$

Μπορούμε να υπολογίσουμε τις ενεργειακές καταστάσεις για

$$n_j := 0, 1.. 3$$

Σε θερμοκρασία $\theta=T$

Οπότε προκύπτει:

$$\left(1 - e^{\frac{T}{T}} \right) \cdot e^{-n_j} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 - e \\ -e^{-1} \cdot (e - 1) \\ -e^{-2} \cdot (e - 1) \\ -e^{-3} \cdot (e - 1) \end{bmatrix} \quad 11.1.1.21$$

$$N_{av'} := \begin{bmatrix} 1 - e \\ -e^{-1} \cdot (e - 1) \\ -e^{-2} \cdot (e - 1) \\ -e^{-3} \cdot (e - 1) \end{bmatrix} \quad 11.1.1.22$$

Άρα την ολική ενέργεια του συστήματος θα δίνεται από τον τύπο:

$$U = N \cdot k \cdot T^2 \cdot \left(\frac{d}{dT} \ln(Z) \right) \quad 11.1.1.23$$

Όπου αντικαθιστώντας τελικά θα έχουμε ενέργεια ενός κβαντικού ταλαντωτή ως:

$$U = N \cdot k \cdot \theta \cdot \left[\frac{1}{e^{\left(\frac{\theta}{T}\right)} - 1} + \frac{1}{2} \right] \quad 11.1.1.24$$

Κατά τη θεωρία του ο Debye υπέθεσε ότι σε ένα στερεό που περιγράφεται από ρηοηοηs μπορούμε να το χωρίσουμε σε δύο ενεργειακές καταστάσεις συχνότητας ν και 2ν . Ο ίδιος έκανε την παρατήρηση αυτή χρησιμοποιώντας πειραματικά στοιχεία, ωστόσο κι εμείς μπορούμε εύκολα να έρθουμε σε ανάλογο συμπέρασμα, καθώς γνωρίζουμε ότι μέσα στο συνολικό ρευστό μας θα έχουμε σωματίδια που θα βρίσκονται σε κατάσταση συμπυκνώματος και άλλα όχι. Γνωρίζοντας ότι για να βρισκόμαστε σε κατάσταση συμπυκνώματος θα πρέπει η ενέργεια των σωματιδίων του συστήματος αυτού να είναι το ground state, εύλογα μπορούμε να πούμε γνωρίζοντας τις τιμές για τις διεγερμένες καταστάσεις του ταλαντωτή του Ηλίου, ότι η προσέγγιση ν και 2ν είναι αρκούντως καλή για το σύστημά μας (σημειώνεται εδώ και πάλι ότι στη φάση αυτή δεν αναζητούμε ακριβείς τιμές παρά μόνο τη μορφή της συνολικής συνάρτησης οπότε δεν κρίνεται απαραίτητο να μπούμε σε μεγαλύτερη λεπτομέρεια για τη διαφοροποίηση των συχνοτήτων).

Η ταλάντωση του κάθε σωματιδίου θα πραγματοποιείται γύρω από καθορισμένο σημείο συνεπώς το μήκος κύματος της κυματοσυνάρτησής του θα είναι:

$$\lambda = \frac{2 \cdot L}{n} \quad 11.1.1.25$$

Με n να αποτελούν τους δεσμούς ανάλογα με τη διεγερμένη ή όχι του κατάσταση.

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \quad n = \frac{2 \cdot L}{\lambda} \quad n \rightarrow \frac{2 \cdot L \cdot \nu}{c} \quad 11.1.1.26$$

G: ο αριθμός των πιθανών συχνοτήτων με βάση τη διέγερση, οπότε καθώς βρισκόμαστε σε χώρο τριών διαστάσεων θα έχουμε:

$$G = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{L^3}{c^3} \cdot v^3 \quad 11.1.1.27$$

$$L_{\lambda} := V^{\frac{1}{3}} \quad 11.1.1.28$$

$$\frac{4\pi}{3} \cdot \frac{L^3}{c^3} \cdot v^3 \rightarrow \frac{4\pi \cdot V \cdot v^3}{3 \cdot c^3} \quad 11.1.1.29$$

Επίσης όπως έχει προαναφερθεί έχουμε δύο ειδών φωνόνια, τα οπτικά και τα ακουστικά, οπότε πρέπει να συμπεριληφθεί η ύπαρξη και των δύο στην εξίσωσή μας:

$$G = \frac{4\pi}{3} \cdot V \cdot \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) \cdot v^3 \quad 11.1.1.30$$

Καθώς έχουμε λοιπόν θεωρήσει γραμμικούς ταλαντωτές στο χώρο θα πρέπει:

$$N' = G = 3N \quad 11.1.1.31$$

$$3N = \frac{4\pi}{3} \cdot V \cdot \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) \cdot v^3 \rightarrow 3 \cdot N = \frac{4\pi \cdot V \cdot v^3 \cdot \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right)}{3} \quad 11.1.1.32$$

Οπότε για τη μέγιστη συχνότητα το ελάχιστο μήκος κύματος θα είναι:

$$\lambda_{\min} := \left(\frac{4\pi}{9} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{V}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \quad 11.1.1.33$$

Ωστόσο το μήκος κύματος αυτό έχει κάποιες οριακές συνθήκες, καθώς όπως θυμόμαστε για να βρισκόμαστε σε κατάσταση συμπυκνώματος, θα πρέπει το μήκος κύματος του σωματιδίου να είναι μεγαλύτερο ή ίσο από τη διατομική απόσταση. Οπότε:

$$N' = 3 \cdot \frac{N}{v_m^3} \cdot v^3 \quad 11.1.1.34$$

Άρα για διαφορά των συχνοτήτων θα Δv θα ισχύει

$$\frac{\Delta N}{\Delta v} = 9 \cdot \frac{N}{v_m^3} \cdot v^3 \quad 11.1.1.35$$

Χρησιμοποιώντας τώρα τη σχέση της ενέργειας του κβαντικού ταλαντωτή του αποδείξαμε προηγούμενα θα έχουμε:

$$\Delta U = \Delta N' \cdot k \cdot \theta \cdot \left(\frac{1}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} \right) \quad 11.1.1.36$$

$$\Delta U \rightarrow \frac{9 \cdot N \cdot h \cdot v^3 \cdot \Delta v}{v_m^3 \cdot \left(e^{\frac{h \cdot v}{T \cdot k}} - 1 \right)} \quad 11.1.1.37$$

Μέχρι στιγμής βλέπουμε ατομικά το κάθε σωματίδιο. Αν πάμε όμως συνολικά στο μακροσκοπικό σύστημα τότε για ενέργειες μεταξύ E και $E + \Delta E$ θα έχουμε:

$$E = h \cdot v \quad \Delta N'_v = \frac{\Delta G_v}{\frac{E}{e^{k \cdot T} - 1}} \quad \Delta N'_v \rightarrow \frac{\Delta G_v}{\frac{h \cdot v}{e^{T \cdot k} - 1}} \quad 11.1.1.38$$

$$\Delta U_v = h \cdot v \cdot \Delta N'_v \qquad \Delta U_v \rightarrow \frac{h \cdot v \cdot \Delta G_v}{e^{\frac{h \cdot v}{T \cdot k}} - 1} \qquad 11.1.1.39$$

Για να επιτραπεί στη γλώσσα του προγράμματος που χρησιμοποιήσαμε να γίνει ο παραπάνω υπολογισμός, αντικαθιστούμε το ΔU με U και το ΔG με G , οπότε:

$$U_v - \frac{h \cdot v \cdot G_v}{e^{\frac{h \cdot v}{T \cdot k}} - 1} \text{ solve, } G_v \rightarrow \frac{9 \cdot N \cdot v^2 \cdot \Delta v}{v_m^3} \qquad 11.1.1.40$$

$$G_v = \frac{9 \cdot N \cdot v^2 \cdot \Delta v}{v_m^3} \qquad 11.1.1.41$$

$$\Delta N'_v = \frac{G_v}{\frac{h \cdot v}{e^{\frac{h \cdot v}{T \cdot k}} - 1}} \qquad 11.1.1.42$$

Άρα η ολική ενέργεια για τη μακροκατάσταση του συστήματος θα είναι:

$$U = \int_0^{v_m} h \cdot v \cdot \Delta N'_v \, dv \qquad 11.1.1.43$$

Ορίζουμε τη θερμοκρασία Debye ως:

$$\theta_D = h \cdot \frac{v_m}{k} \qquad 11.1.1.44$$

Και ορίζουμε και τις ακόλουθες αδιάστατες μεταβλητές:

$$x = \frac{h \cdot \nu}{T \cdot k} \quad x_m = \frac{\theta_D}{T} \quad 11.1.1.45$$

Οπότε

$$U = 9 \cdot N \cdot k \cdot T \cdot \frac{1}{x_m^3} \int_0^{x_m} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad 11.1.1.46$$

Άρα:

$$U \rightarrow \begin{cases} \frac{\frac{3}{5} \cdot \pi^4 \cdot N \cdot T^4}{h^3} \cdot k^4 & \text{if } \infty = \frac{1}{T} \cdot \frac{h}{k} \cdot \nu_m \\ \text{undefined} & \text{otherwise} \end{cases} \quad 11.1.1.47$$

$$U = \frac{\frac{3}{5} \cdot \pi^4 \cdot N \cdot T^4}{h^3} \cdot k^4 \quad 11.1.1.48$$

$$c_V = \frac{d}{dT} U \quad 11.1.1.49$$

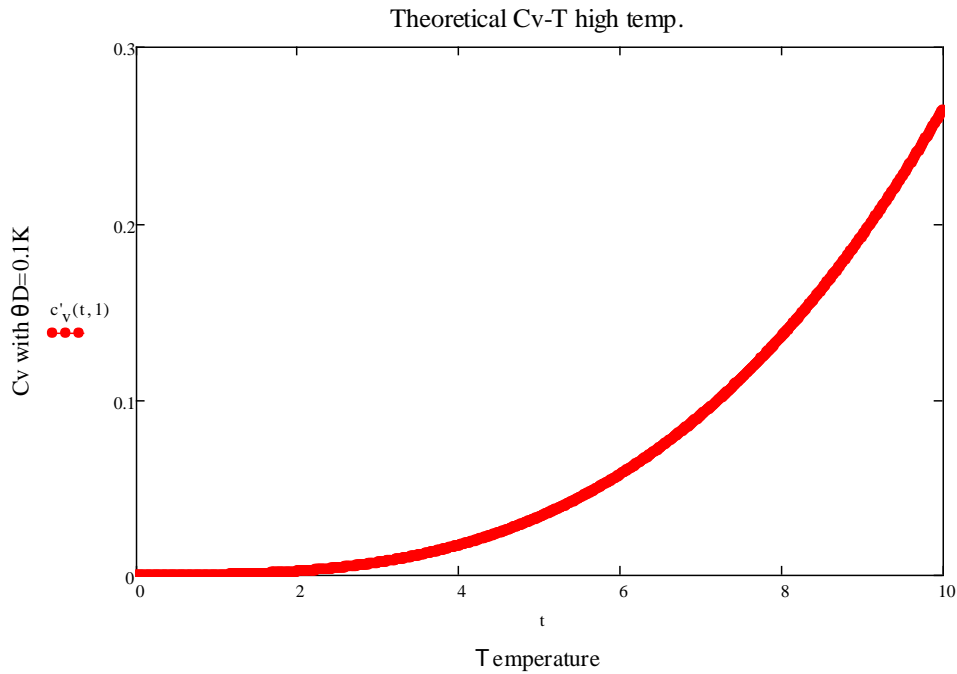
$$c_V \rightarrow \frac{12 \cdot \pi^4 \cdot N \cdot T^3 \cdot k^4}{5 \cdot h^3 \cdot \nu_m^3} \quad 11.1.1.50$$

Θέτοντας λοιπόν ως $R = N \cdot k$

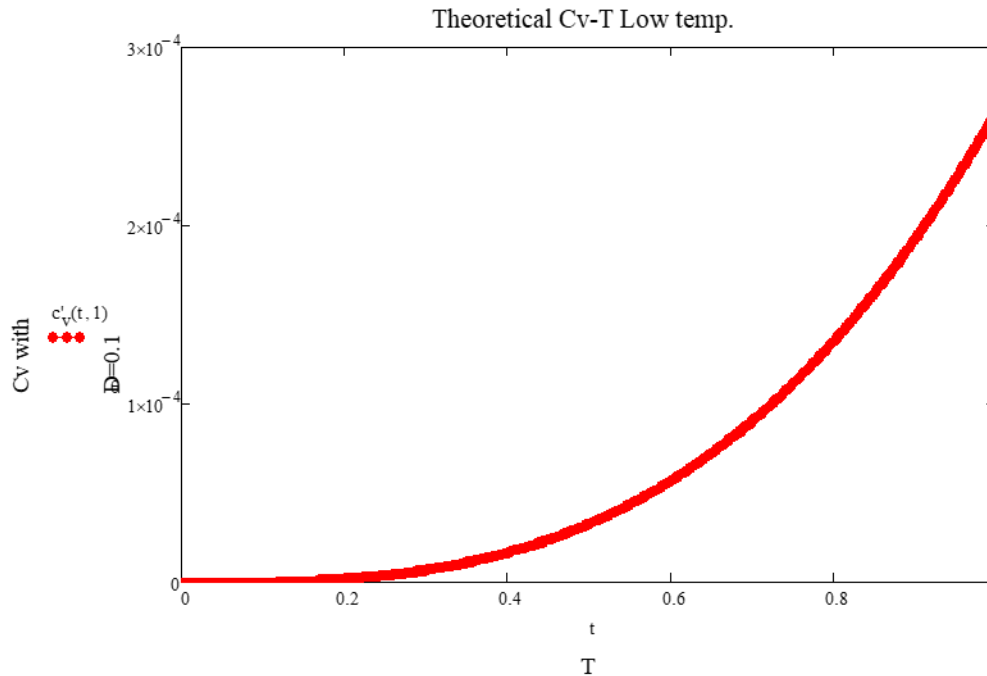
$$c_V = \frac{12 \cdot \pi^4}{5} \cdot R \cdot \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \quad 11.1.1.51$$

Έχουμε λοιπόν από τα παραπάνω μία μορφή της σχέσης της ειδικής θερμότητας για συστήματα σε τέτοιες θερμοκρασίες. Συνεπώς καταλαβαίνουμε ότι θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε μία εξίσωση γραμμική ως προς το T με πολυώνυμο υψηλού βαθμού.

Εν συνεχεία, πριν προχωρήσουμε στις τιμές, θα καταστρώσουμε ένα διάγραμμα της παραπάνω εξίσωσης για μία θερμοκρασία Debye κοντά στο 0, όπως ισχύει στην περιοχή που είμαστε:



Διάγραμμα 11.1.1.1: Συσχέτιση C_v -θερμοκρασίας σε υψηλές θερμοκρασίες



Διάγραμμα 11.1.1.2: : Συσχέτιση Cv-θερμοκρασίας σε χαμηλές θερμοκρασίες

Στα παραπάνω δύο διαγράμματα παρατηρούμε κάτι ιδιαίτερα σημαντικό. Το Cv στα διαγράμματα αυτά φαίνεται να έχει συγκεκριμένη ασυμπτωτική μορφή πλησιάζοντας στο 0, οπότε και η εξηγείται η μεγάλη διαφοροποίηση στις τάξεις μεγέθους των πειραματικών τιμών.

Συνεπώς γνωρίζοντας πλέον αυτό, και βλέποντας την εκθετική μορφή της συνάρτησης κρίνουμε ότι θα ήταν χρήσιμο για εμάς να λογαριθμίσουμε τις πειραματικές μας τιμές, πριν τις εισάγουμε στο αριθμητικό πρόγραμμα.

Αρχείο αναλυτικών υπολογισμών: [MathCad references\fermion gas.xmcd](#)

11.1.2 Παρουσίαση αριθμητικών συναρτήσεων για υπερρευστό

Στο υπολογιστικό πρόγραμμα Curve Expert που χρησιμοποιήσαμε, εισαγάγαμε κάθε φορά τις δοσμένες τιμές του μεγέθους που επιζητούσαμε, συνοδευόμενες από τις τιμές της θερμοκρασίας και της πίεσης, ώστε κάθε φορά να καταλήγουμε σε συναρτήσεις της μορφής $X(T,P)$. Σημαντικό εδώ είναι να τονιστεί ότι τελικά με βάση το παραπάνω, επιλέξαμε να γίνει χρήση μόνο πολυωνύμων καθώς στη θεωρητική μέθοδο δεν προέκυψαν μη πολυωνυμικοί όροι, οπότε θεωρήσαμε ότι θα ήταν άσκοπο και θα μας απομάκρυνε από την πραγματικότητα κάτι τέτοιο. Επίσης κατά τη διαδικασία αυτή δόθηκε ιδιαίτερη βάση στις παραγώγους των συναρτήσεων, εις τρόπον ώστε και αυτές να είναι συνεχείς οπότε τελικά να μπορούν τα θερμοδυναμικά αυτά μεγέθη να επιβεβαιώνονται μεταξύ τους.

C_p

Το C_p παρουσιάζει μόνο θετικές τιμές, οπότε απλώς το λογαριθμίζουμε πριν το εισάγουμε στο πρόγραμμα.

Η πολυωνυμική συνάρτηση του προγράμματος είναι της μορφής:

$$r(T,P) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N (C_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j) \quad 11.1.2.1$$

Οπότε τελικά η συνάρτηση για το C_p θα είναι:

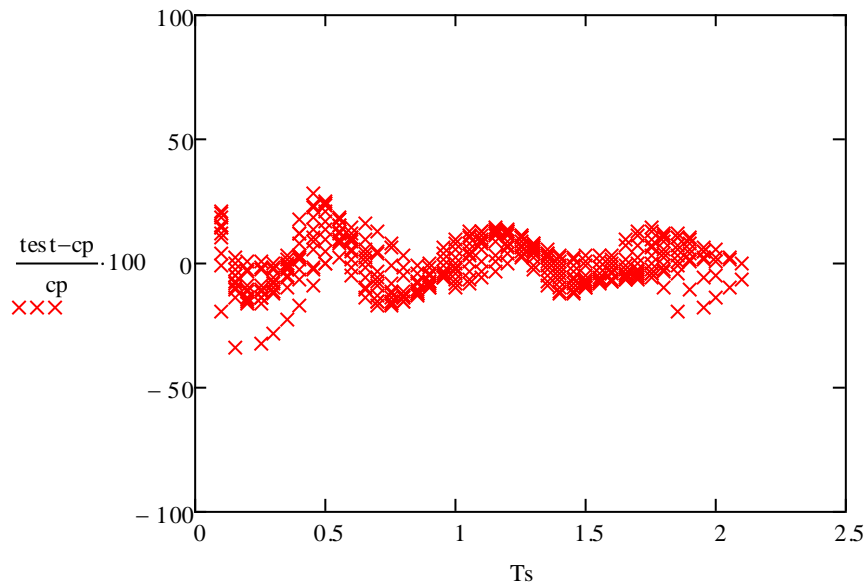
$$\mu_{\text{r}}^{\text{r}}(T,P) := e^{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N (C_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j)} \quad 11.1.2.2$$

Και οι συντελεστές που μας δίνει το πρόγραμμα (το πρόγραμμα μας δίνει τους συντελεστές σε μορφή πίνακα στήλης, ωστόσο εμείς τους μετατρέπουμε σε τετραγωνικό με τον μικρό κώδικα που προαναφέρθηκε, ώστε να μπορεί το Mathcad να τους επεξεργαστεί στη συνάρτηση):

C	1	2	3	4
1	-1.40919420300000E+01	2.15071048000000E-01	-1.14944613000000E-01	1.67428420000000E-02
2	4.26147118500000E+01	-1.04473358410000E+01	4.04185195500000E+00	-5.81304842000000E-01
3	-1.06609474340000E+02	4.45142355190000E+01	-1.74546002940000E+01	2.50709464400000E+00
4	1.54815291490000E+02	-7.41309085100000E+01	2.96365982420000E+01	-4.24329108000000E+00
5	-1.14533627787000E+02	5.90828151580000E+01	-2.39964350990000E+01	3.42102408100000E+00
6	4.12137645730000E+01	-2.25746041620000E+01	9.28104340600000E+00	-1.31655296600000E+00
7	-5.74721638500000E+00	3.32351823200000E+00	-1.37931303500000E+00	1.94586474000000E-01
C	5	6	7	
1	-1.093345597E-03	3.33345388900000E-05	-3.86405636600000E-07	
2	3.883548800E-02	-1.22560181700000E-03	1.47849523600000E-05	
3	-1.674121800E-01	5.28286126500000E-03	-6.37355774000000E-05	
4	2.824569250E-01	-8.88457846600000E-03	1.06854045200000E-04	
5	-2.267574080E-01	7.10042166800000E-03	-8.50159961600000E-05	
6	8.683615100E-02	-2.70446504300000E-03	3.22080224000000E-05	
7	-1.276404500E-02	3.95091136000000E-04	-4.67624438200000E-06	

Πίνακας 11.1.2.1: Σταθερές εξίσωσης 11.1.2.1

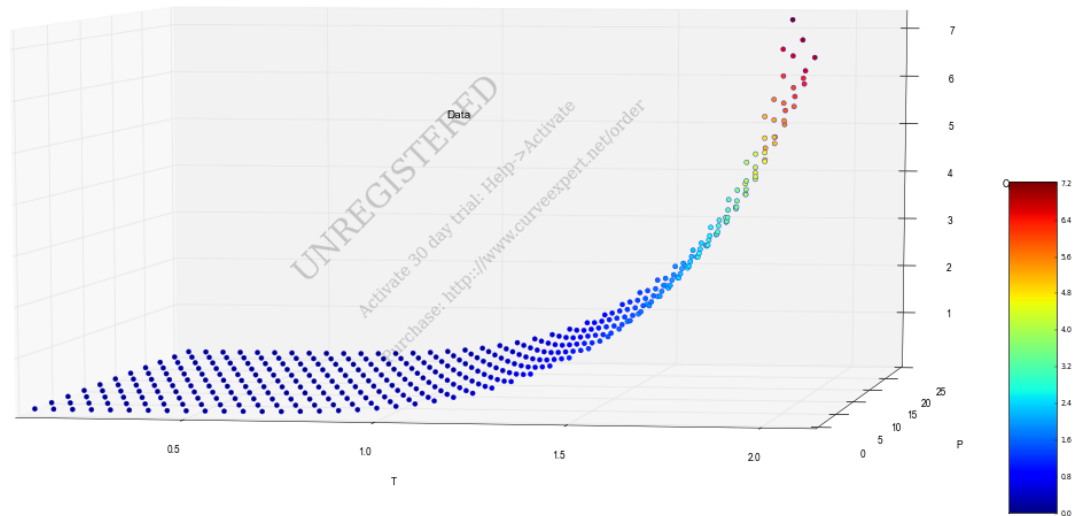
Με βάση την παραπάνω συνάρτηση συγκρίνουμε τα σφάλματα με τις πειραματικές τιμές και έχουμε:



Διάγραμμα 11.1.2.1: % απόκλισης C_p από τις πειραματικές τιμές συναρτήσει θερμοκρασίας

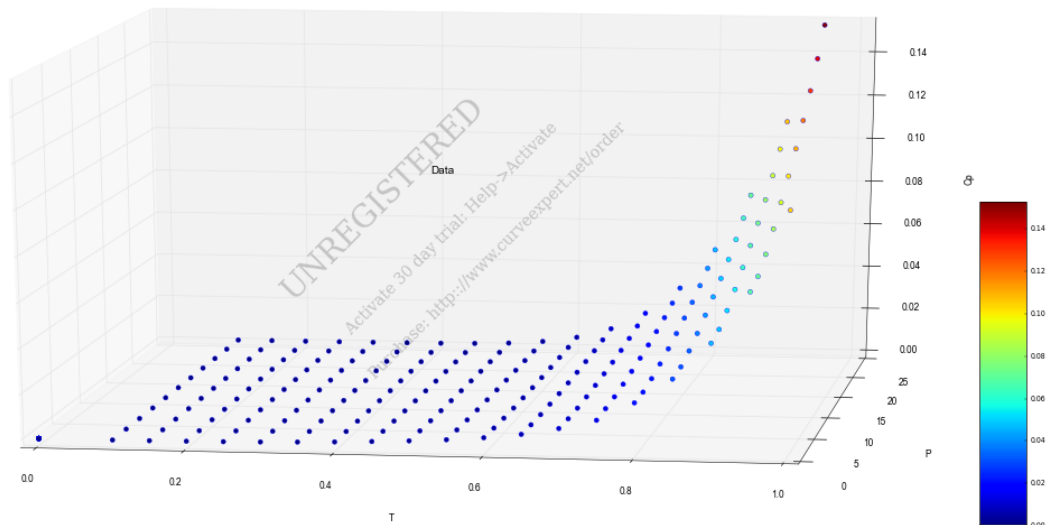
Βλέπουμε ότι έχουμε ικανά σφάλματα, ωστόσο σε γενικές γραμμές η συνάρτηση μπορεί να μας δώσει μία τάξη μεγέθους για τα πειραματικά.

Το διάγραμμα των πειραματικών δεδομένων δίδεται ακόλουθα:



11.1.2.3: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών C_p [J/kgK]- P [atm]- T [K] σε όλο το εύρος θερμοκρασιών

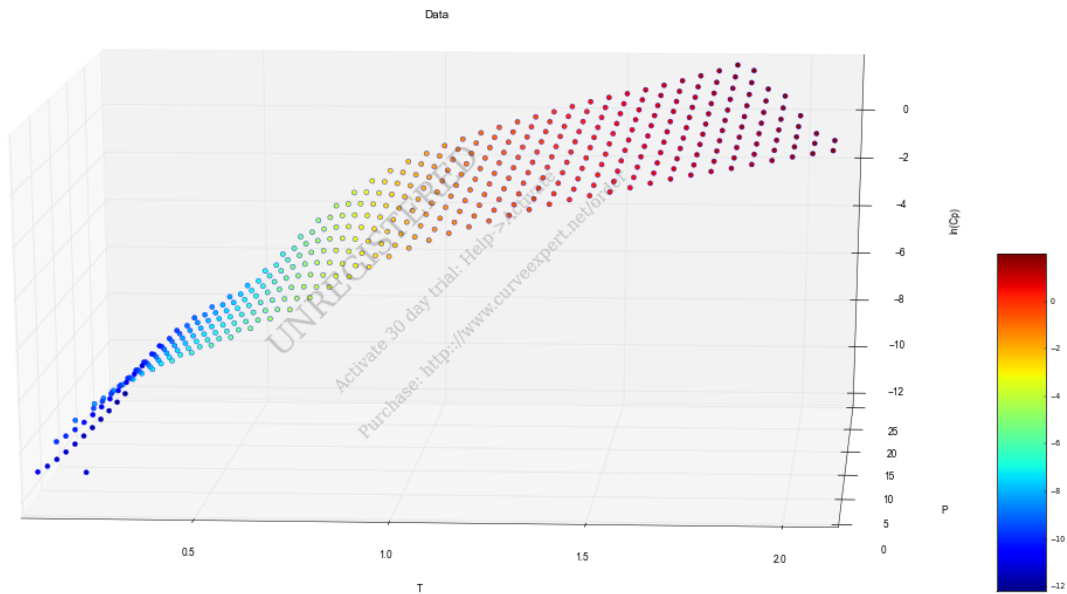
Το παραπάνω αποτελεί το διάγραμμα σε όλο το εύρος, θα παρουσιάσουμε ωστόσο και ένα διάγραμμα σε μικρότερο εύρος για να δειχθεί αυτό που παρατηρήθηκε και στη θεωρητική μελέτη, δηλαδή η ομοιότητα του σχήματος λόγω της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς καθώς και η αλλαγή της τάξης μεγέθους ανεξάρτητα από το εύρος.



11.1.2.4: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών C_p [J/kgK]- P [atm]- T [K] σε μικρότερο εύρος θερμοκρασιών

Βλέποντας κανείς το πρώτο διάγραμμα θα μπορούσε εύκολα να θεωρήσει ότι οι τιμές κάτω από τη θερμοκρασία 1K είναι γραμμικές, βλέποντας ωστόσο το 2^ο φαίνεται ότι ακόμη και παρακάτω υπάρχει αντίστοιχα μεγάλη αλλαγή στην τάξη μεγέθους των τιμών στην πορεία τους προς το απόλυτο μηδέν.

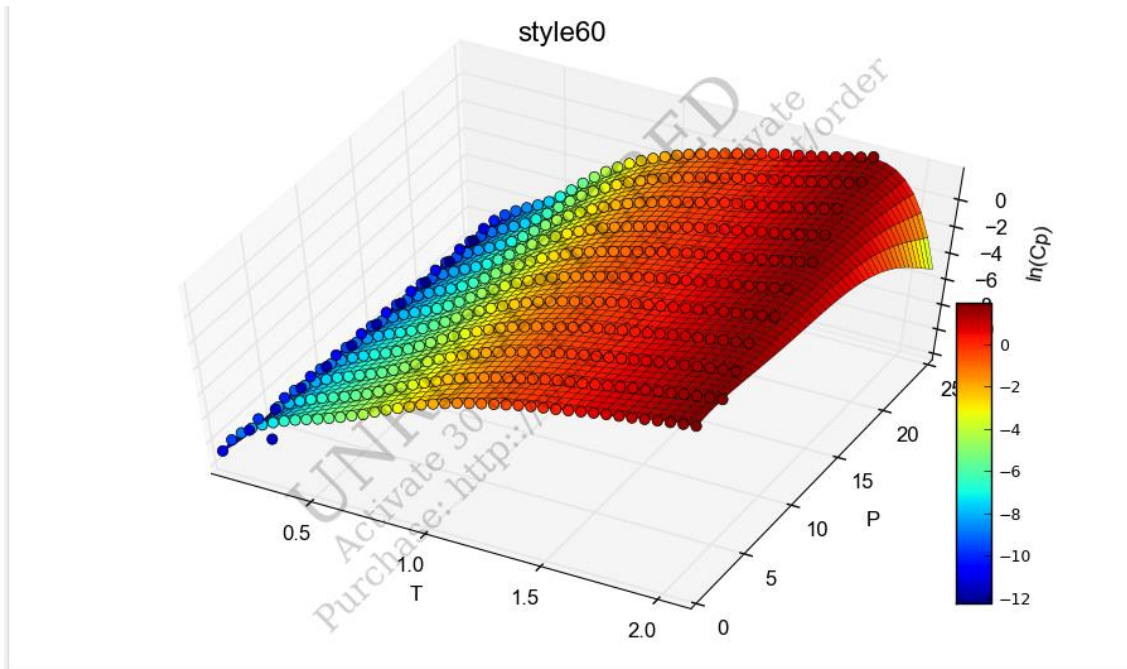
Θα παρουσιάσουμε στη συνέχεια και το διάγραμμα με τις λογαριθμικές τιμές ώστε να δειχθεί η μεγάλη διαφορά τους σε γραμμικότητα:



11.1.2.5: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών $\ln C_p [J/kgK] - P [atm] - T [K]$ σε όλο το εύρος θερμοκρασιών

Βλέπουμε λοιπόν ότι έτσι πηγαίνουμε τα πειραματικά μας δεδομένα σε μία πολύ απλούστερη μορφή.

Παρατίθεται κατόπιν και το διάγραμμα της συνάρτησης που δημιουργήσαμε να διέρχεται μέσα από τα πειραματικά σημεία:



11.1.2.6: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών και συνάρτησης για $\ln C_p [J/kgK] - P [atm] - T [K]$ σε όλο το εύρος θερμοκρασιών

Όπως είχαμε προσέξει λοιπόν η συνάρτησή μας είναι τέτοια ώστε να μην παρουσιάζονται ταλαντωτικές συμπεριφορές μεταξύ των πειραματικών σημείων και οδηγούν σε προβλήματα στις παραγώγους.

Cv

Αντίστοιχα για το Cv οι συντελεστές και η συνάρτηση είναι:

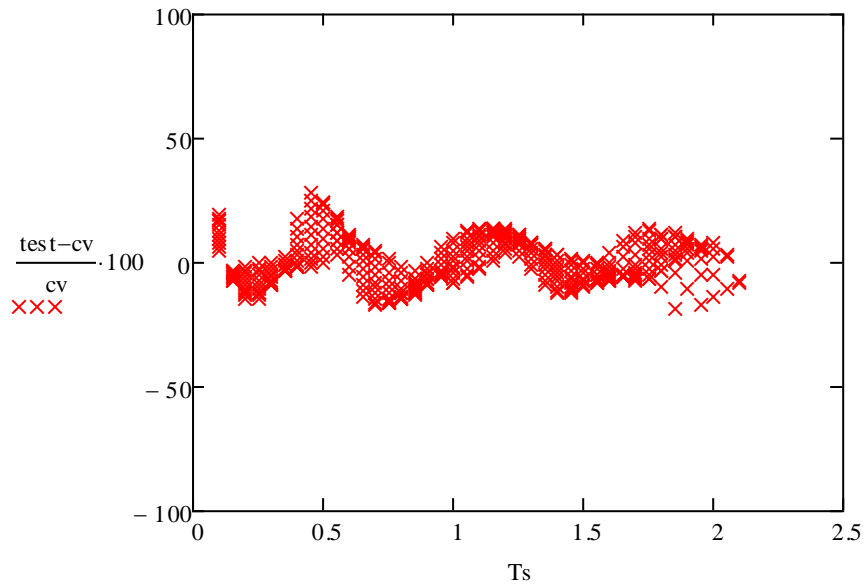
C	1	2	3	4
1	-1.41037811670000E+01	-7.87120230000000E-02	2.57682844500000E-04	7.95697083600000E-05
2	4.29227797860000E+01	-4.93011226000000E-01	1.24677340000000E-01	-1.40039280000000E-02
3	-1.07887717251000E+02	2.02617879800000E+00	-7.37927892000000E-01	8.70671540000000E-02
4	1.57006101138000E+02	-2.98899881300000E+00	1.65427724200000E+00	-1.94655984000000E-01
5	-1.16346707366000E+02	2.32288685600000E+00	-1.68029946200000E+00	1.94609855000000E-01
6	4.19309459070000E+01	-9.44912050000000E-01	7.82056562000000E-01	-8.89676650000000E-02
7	-5.85594082500000E+00	1.56046616000000E-01	-1.35746979000000E-01	1.51835640000000E-02
C	5	6	7	
1	3.776669505E-05	-3.12159640700000E-06	6.36869236600000E-08	
2	3.334485168E-04	1.39094906600000E-05	-4.91929799400000E-07	
3	-3.259016424E-03	1.51902828700000E-06	1.31458893900000E-06	
4	8.029820103E-03	-6.19574093700000E-05	-1.73392152300000E-06	
5	-8.263105869E-03	8.26378482500000E-05	1.27789097600000E-06	
6	3.800031141E-03	-4.06300223600000E-05	-5.08938537800000E-07	
7	-6.465126410E-04	6.93842403300000E-06	8.38516572500000E-08	

Πίνακας 11.1.2.2: Σταθερές εξίσωσης 11.1.2.3

$$r_{\lambda\lambda}(T,P) := e^{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N (C_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j)}$$

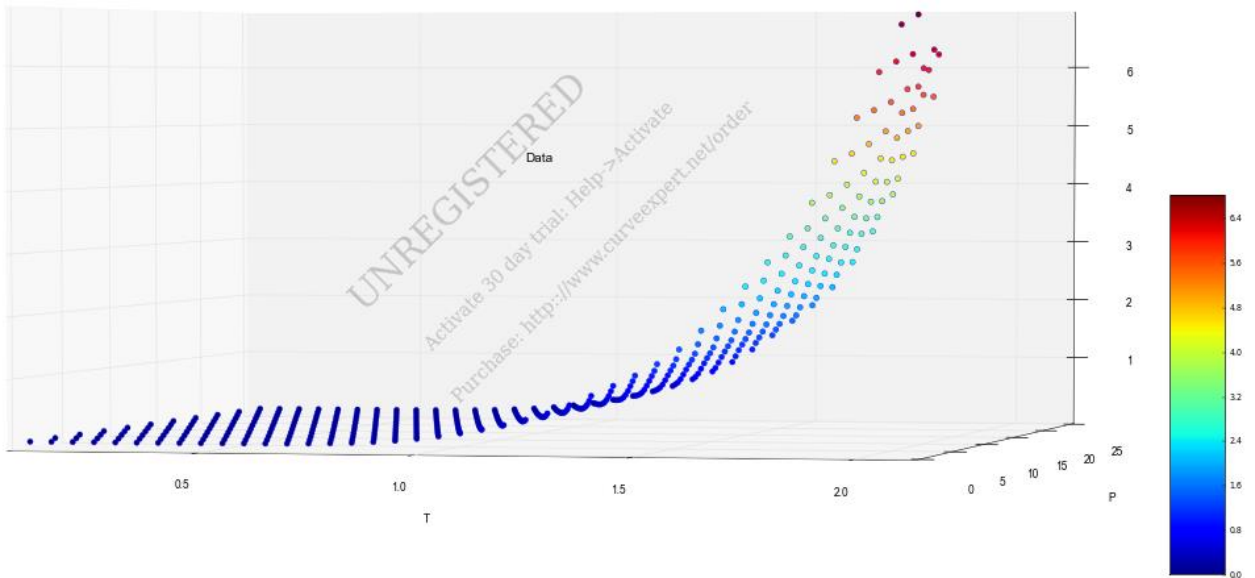
11.1.2.3

Ακόλουθα και το διάγραμμα των σφαλμάτων:



Διάγραμμα 11.1.2.7: % απόκλισης πειραματικών τιμών C_v από τις τιμές που δίνει η παραπάνω συνάρτηση

Καθώς και το διάγραμμα των πειραματικών τιμών:



11.1.2.8: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών C_v [J/kgK]- P [atm]- T [K] σε όλο το εύρος θερμοκρασιών

Gibbs free energy

Όσον αφορά τη συνάρτηση Gibbs πρέπει να σχολιάσουμε ότι καθώς αυτή εμπεριέχει αρνητικές τιμές, δεν μπορούσαμε να λογαριθμίσουμε απευθείας, οπότε πήραμε το -G μέσα στο λογάριθμο.

C	1	2	3	4
1	-1.51623571730000E+01	-1.24478460000000E-01	2.87988869300000E-03	-1.07907358700000E-05
2	1.58002130220000E+01	3.03127003000000E-01	-3.15240560000000E-02	6.74117792600000E-03
3	-5.97714913400000E+00	-2.14086806900000E+00	4.80095507000000E-01	-8.40491530000000E-02
4	-1.00952980810000E+01	5.53060152100000E+00	-1.53127482500000E+00	2.55350348000000E-01
5	1.63362933680000E+01	-5.76108293800000E+00	1.80967263900000E+00	-2.95372938000000E-01
6	-8.33064267300000E+00	2.63765963000000E+00	-9.04582992000000E-01	1.45646834000000E-01
7	1.43999722900000E+00	-4.43575671000000E-01	1.62300922000000E-01	-2.58622870000000E-02
C	5	6	7	
1	-3.642169719E-06	2.24640132600000E-07	-4.29251575300000E-09	
2	-5.309144279E-04	1.74367010900000E-05	-2.06253370500000E-07	
3	6.165163069E-03	-2.03060883100000E-04	2.49154568200000E-06	
4	-1.833952200E-02	6.02300506500000E-04	-7.42632657400000E-06	
5	2.097642100E-02	-6.86259523400000E-04	8.45377850700000E-06	
6	-1.025973300E-02	3.34274106400000E-04	-4.10625811200000E-06	
7	1.809591999E-03	-5.87068689300000E-05	7.18458062400000E-07	

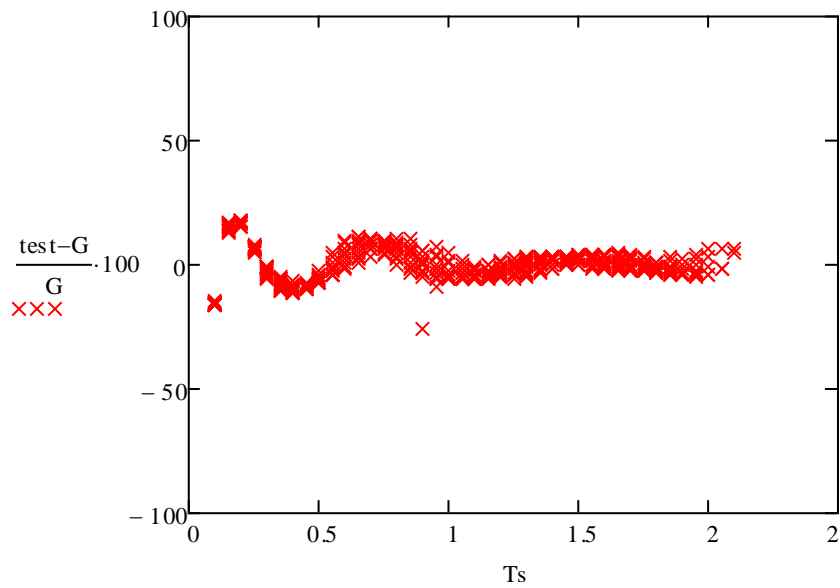
Πίνακας 11.1.2.3: Σταθερές εξίσωσης 11.1.2.4

Άρα η συνάρτηση θα είναι:

$$r_{\lambda\lambda}(T, P) := -e^{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N (C_{i+1, j+1} \cdot T^i \cdot P^j)}$$

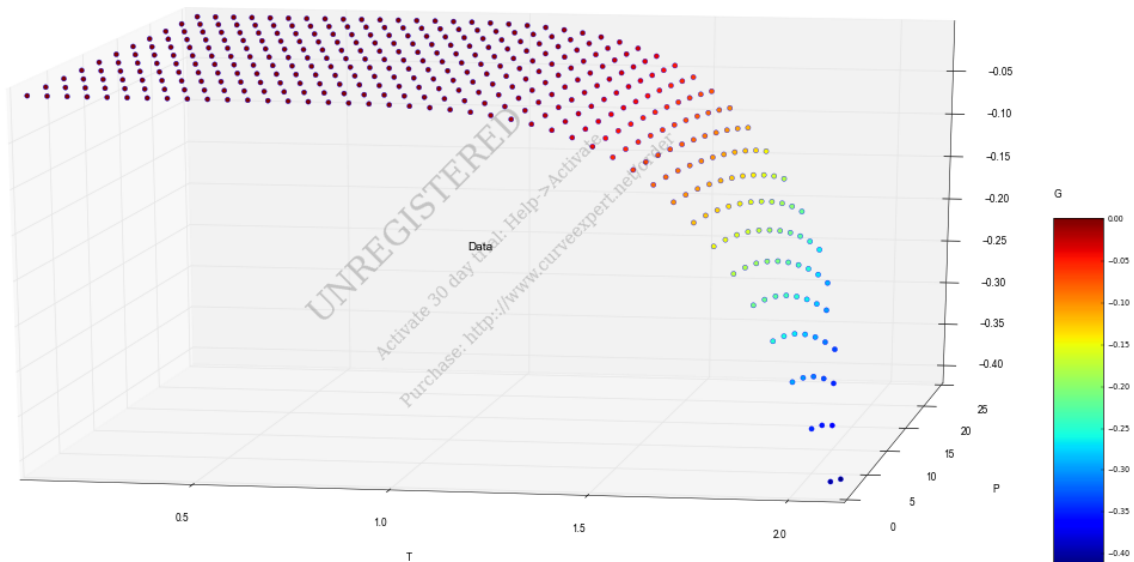
11.1.2.4

Και τα σφάλματα:



Διάγραμμα 11.1.2.9: % απόκλισης τιμών συνάρτησης Gibbs από πειραματικές

Τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα.



11.1.2.10: 3D διάγραμμα τιμών G [J/kgK]- P [atm]- T [K]

Helmholtz free energy

Έχουμε κι εδώ αρνητικές τιμές οπότε αντίστοιχα με τη συνάρτηση Gibbs:

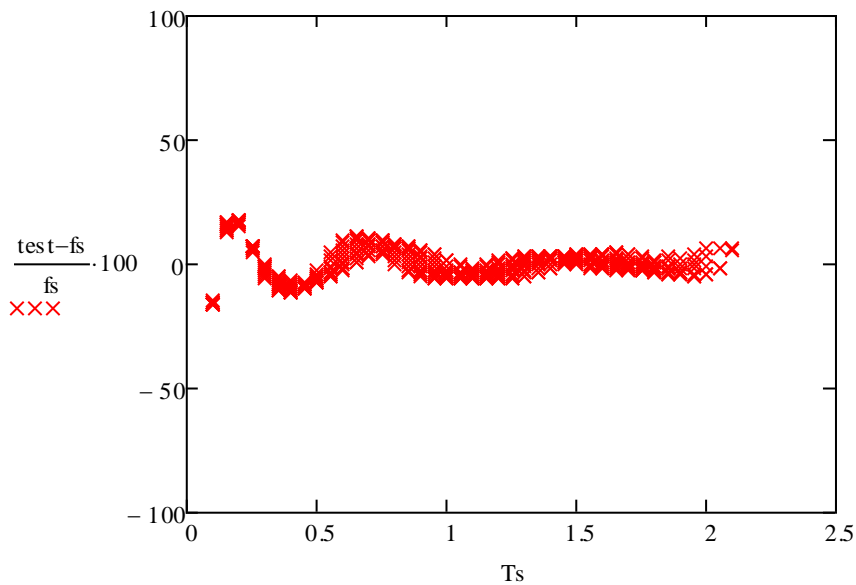
C	1	2	3	4
1	-1.51641681390000E+01	-1.66550361000000E-01	1.95074000000000E-02	-2.40651582800000E-03
2	1.58174072560000E+01	6.82777507000000E-01	-1.81044941000000E-01	2.81388690000000E-02
3	-6.01869505200000E+00	-2.80268515800000E+00	7.34766797000000E-01	-1.19015920000000E-01
4	-1.00674111560000E+01	5.13739268500000E+00	-1.35519789200000E+00	2.24837635000000E-01
5	1.63409438960000E+01	-4.38869656400000E+00	1.24386445000000E+00	-2.08019151000000E-01
6	-8.34062640200000E+00	1.77243488700000E+00	-5.51332511000000E-01	9.19319330000000E-02
7	1.44244906700000E+00	-2.74885331000000E-01	9.36732320000000E-02	-1.54837140000000E-02
C	5	6	7	
1	1.570472720E-04	-4.86135145500000E-06	5.71297196200000E-08	
2	-1.951636943E-03	6.18108432700000E-05	-7.33823543700000E-07	
3	8.349668727E-03	-2.65866392000000E-04	3.16297254700000E-06	
4	-1.582099400E-02	5.04177356800000E-04	-5.98987779000000E-06	
5	1.458434900E-02	-4.63207243400000E-04	5.47725477300000E-06	
6	-6.399369675E-03	2.02068095000000E-04	-2.37297722100000E-06	
7	1.068549090E-03	-3.35013598800000E-05	3.90162805200000E-07	

Πίνακας 11.1.2.4: Σταθερές εξίσωσης 11.1.2.5

$$r_{\lambda\lambda}(T, P) := -e^{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N (C_{i+1, j+1} \cdot T^i \cdot P^j)}$$

11.1.2.5

Οπότε τα σφάλματα που παρουσιάζονται:



Διάγραμμα 11.1.2.11: % απόκλιση συνάρτησης Helmholtz από τις πειραματικές τιμές

Εντροπία

Η εντροπία αποτελεί θετικό μέγεθος, οπότε μπορούμε να τη λογαριθμίσουμε απευθείας:

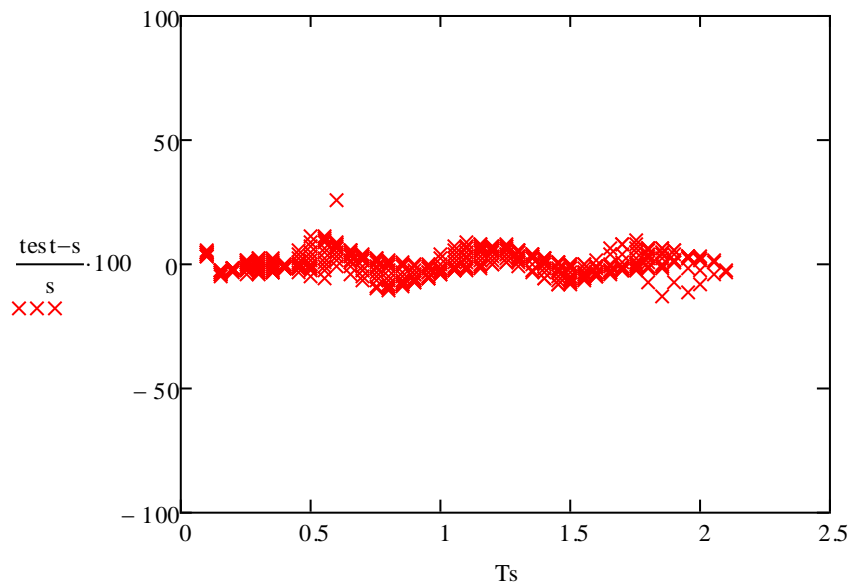
C	1	2	3	4
1	-1.51318394680000E+01	-1.25405235000000E-01	1.00422470000000E-02	-1.78454108100000E-03
2	4.11432607810000E+01	7.86190459900000E-03	3.18591956300000E-03	1.19280570000000E-02
3	-9.52290761360000E+01	3.93612140000000E-01	-2.60151030000000E-01	-2.19211580000000E-02
4	1.25505927427000E+02	-5.62461502000000E-01	6.74838853000000E-01	2.10689210000000E-02
5	-8.52971577750000E+01	3.97406552000000E-01	-6.58674447000000E-01	-1.65441260000000E-02
6	2.85897587380000E+01	-1.51519689000000E-01	2.79975699000000E-01	8.92408989500000E-03
7	-3.75670421100000E+00	2.41036400000000E-02	-4.36947490000000E-02	-1.93575708700000E-03
C	5	6	7	
1	1.664058289E-04	-6.84083378500000E-06	1.01562116400000E-07	
2	-1.559093607E-03	7.20109358000000E-05	-1.13154247100000E-06	
3	4.874944429E-03	-2.53851885400000E-04	4.20194399800000E-06	
4	-7.951431010E-03	4.42412084800000E-04	-7.50939890800000E-06	
5	7.127712289E-03	-4.02476708200000E-04	6.86911977700000E-06	
6	-3.220909554E-03	1.79997263700000E-04	-3.06165263800000E-06	
7	5.643963294E-04	-3.09971383900000E-05	5.24073077900000E-07	

Πίνακας 11.1.2.5: Σταθερές εξίσωσης 11.1.2.6

$$r_{\lambda\lambda}(T, P) := e^{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N (C_{i+1, j+1} \cdot T^i \cdot P^j)}$$

11.1.2.6

Και τα σφάλματα της συνάρτησης θα είναι:



Διάγραμμα 11.1.2.12: % απόκλισης τιμών συνάρτησης εντροπίας από τις πειραματικές

Στο σημείο αυτό, που ολοκληρώθηκε η παρουσίαση των συναρτήσεων για την περιοχή του υπερρευστού, θα θέλαμε και πάλι να τονίσουμε το γεγονός ότι βλέποντας και μόνο τα πειραματικά διαγράμματα βλέπουμε πόσο μας βοήθησε η θεωρητική συνάρτηση και πόσο κοντά ήταν στο πραγματικό αποτέλεσμα οπότε βοηθώντας κι εμάς να αντιμετωπίσουμε την ασυμπτωτική συμπεριφορά των μεγεθών.

Επίσης πρέπει να αναφερθεί ότι όπως φαίνεται από τα διαγράμματα των σφαλμάτων, οι παραπάνω συναρτήσεις δεν είναι ιδανικές για ακριβείς υπολογισμούς, οπότε θα παρατρύναμε τον αναγνώστη που επιθυμεί τη διενέργεια τέτοιων υπολογισμών, να ανατρέξει στις εξισώσεις του κεφαλαίου Donnelly & Brooks, όπου με βάση την προσέγγιση των συγγραφέων αυτών έχουμε δημιουργήσει συναρτήσεις με πολύ μικρότερη απόκλιση από τις πραγματικές τιμές.

11.2 Περιοχή Υγρού (Hel)

Στην περιοχή αυτή κρίνοντας από τις πειραματικές τιμές, δεν φάνηκε κάποια ασυμπτωτική συμπεριφορά ή κάποια δυσκολία που να μας οδηγήσει στο να σκεφτούμε πάλι κάποια τροποποίηση των τιμών προτού τις τοποθετήσουμε στο υπολογιστικό πρόγραμμα. Ωστόσο για τη διατήρηση της συνοχής των εξισώσεων καθώς και για να υπάρχει η δυνατότητα ενοποίησής τους, επιλέξαμε και εδώ να χρησιμοποιήσουμε γραμμικά πολυώνυμα ιδίου βαθμού.

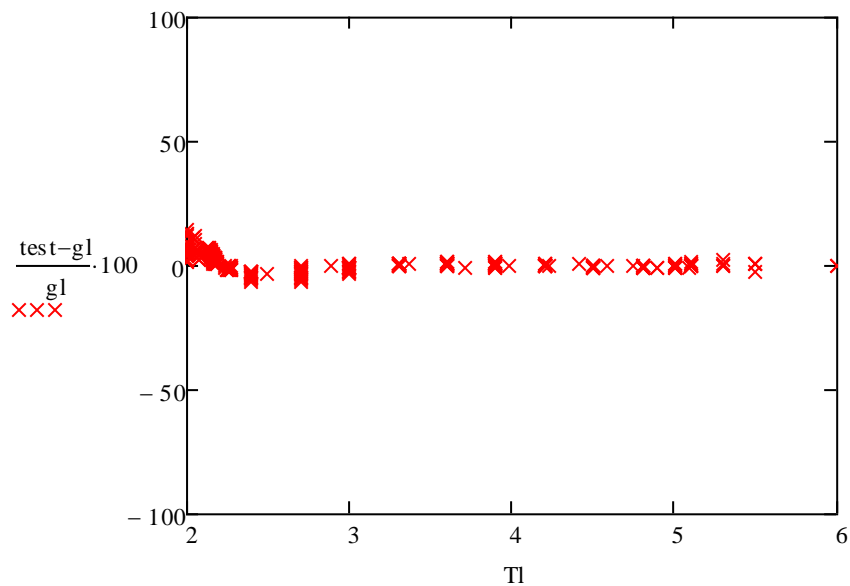
Gibbs free energy

$$r(T,P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(C_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right) \quad 11.2.1$$

C	1	2	3	4
1	-2.77535416300000E+00	1.10061220800000E+03	-5.33979670400000E+04	9.96962135000000E+03
2	1.07946313670000E+01	-3.85604166700000E+03	2.12015103900000E+05	-3.07549661300000E+06
3	-1.64712379390000E+01	5.06511006200000E+03	-2.76530842100000E+05	4.14379313400000E+06
4	1.27348949720000E+01	-3.29159926200000E+03	1.66726228700000E+05	-1.37776958800000E+06
5	-5.23433695900000E+00	1.15075149400000E+03	-5.32966303700000E+04	-6.95231970500000E+04
6	1.06406661100000E+00	-2.10290148105000E+02	9.32305892200000E+03	6.71721682700000E+04
7	-8.49807660000000E-02	1.59155052990000E+01	-7.34323549709000E+02	-3.11253703300000E+03
C	5	6	7	
1	3.495166700000E+07	-4.39122448600000E+08	3.32041308200000E+05	
2	6.179044231000E+06	-7.97664430400000E+08	1.55678779500000E+10	
3	-9.362086624000E+06	9.30784194300000E+08	-1.86441975800000E+10	
4	-5.574612212000E+07	7.14977644200000E+08	1.91864393600000E+09	
5	4.675909384000E+07	-8.48155757700000E+08	4.02643086900000E+09	
6	-1.186602657000E+07	2.38022235500000E+08	-1.44120832700000E+09	
7	9.042958120000E+05	-1.98786268700000E+07	1.32847393000000E+08	

Πίνακας 11.2.1: Σταθερές εξίσωσης 11.2.1

Τα σφάλματα που προκύπτουν από τη συνάρτηση αυτή είναι:

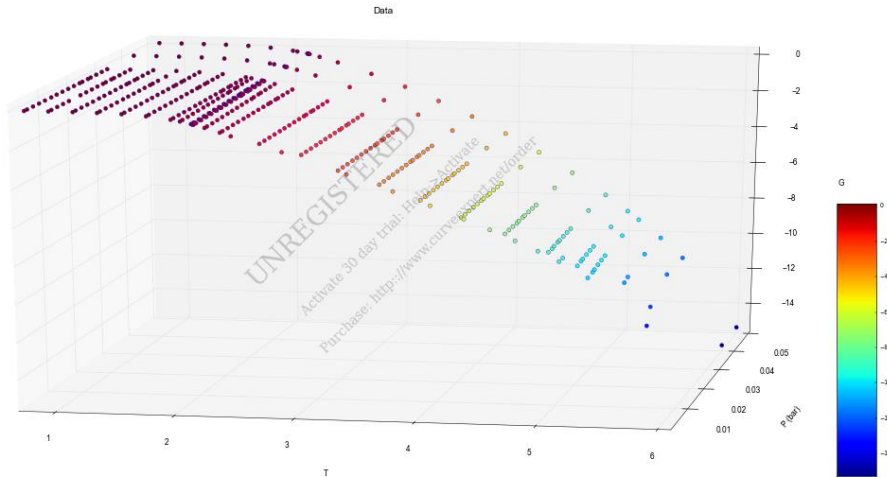


Διάγραμμα 11.2.1 % απόκλισης τιμών συνάρτησης Gibbs από τις πειραματικές στο HeI

Παρατηρούμε εδώ ότι η συνάρτηση στην περιοχή αυτή έχει σαφώς μικρότερα σφάλματα από τη συνάρτηση στην περιοχή του υπερρευστού, κάτι που σαφώς οφείλεται στην απλούστερη συμπεριφορά του ρευστού στην περιοχή αυτή καθώς και στο γεγονός ότι το η αριθμητική

ακρίβεια των αποτελεσμάτων δεν επηρεάστηκε από την λογαρίθμηση που είχε γίνει προηγουμένα για τον προσδιορισμό της μεταβαλλόμενης τάξης μεγέθους και της ασυμπτωτικής αυτής συμπεριφοράς.

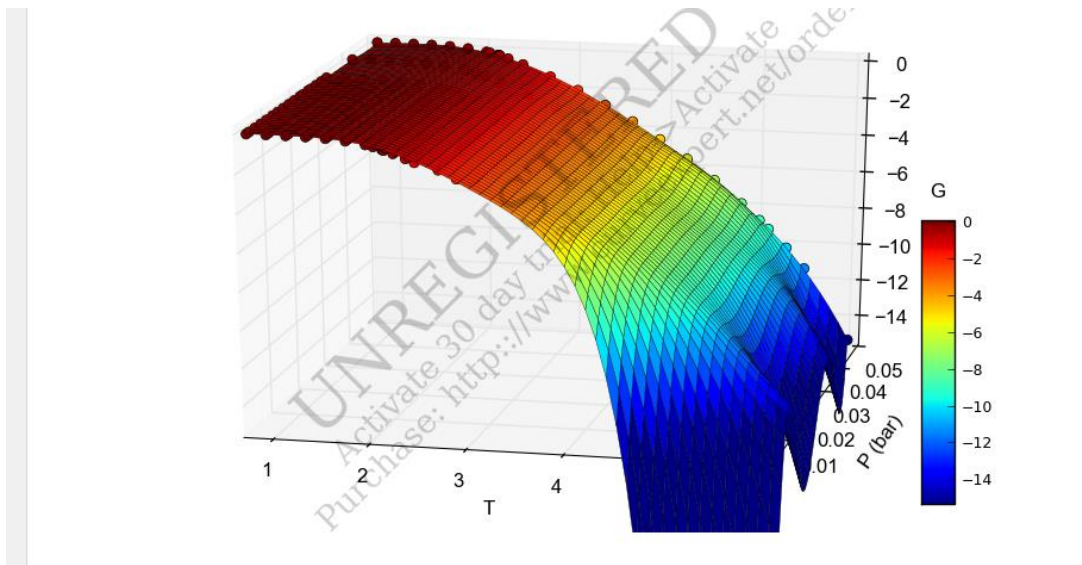
Το παραπάνω φαίνεται καλύτερα βλέποντας τα πειραματικά δεδομένα:



11.2.2: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών $G[\text{kJ}/\text{kgK}]-P[\text{atm}]-T[\text{K}]$ στο HeI

Βλέπουμε λοιπόν μία πολύ μεγαλύτερη γραμμικότητα των δεδομένων.

Στο σημείο αυτό κρίνεται χρήσιμο να παρουσιαστεί και ένα διάγραμμα με τη συνάρτηση να διέρχεται μέσα από τα πειραματικά σημεία, ώστε να δειχθεί η πολύ ομαλή συμπεριφορά της, καθώς δεν παρουσιάζονται καθόλου ταλαντωτικές συμπεριφορές ανάμεσα των σημείων, οπότε μπορούμε να εμπιστευτούμε τις παραγώγους σε όλο το φάσμα:



11.2.3: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών και υπολογισθείσας συνάρτησης $G[\text{kJ}/\text{kgK}]-P[\text{atm}]-T[\text{K}]$ στο HeI

Σημείωση: Η G(T,P) αποτελεί μία θεμελιώδη καταστατική εξίσωση με βάση την οποία μπορούν να προκύψουν όλα τα λοιπά θερμοδυναμικά μεγέθη.

Helmholtz free energy

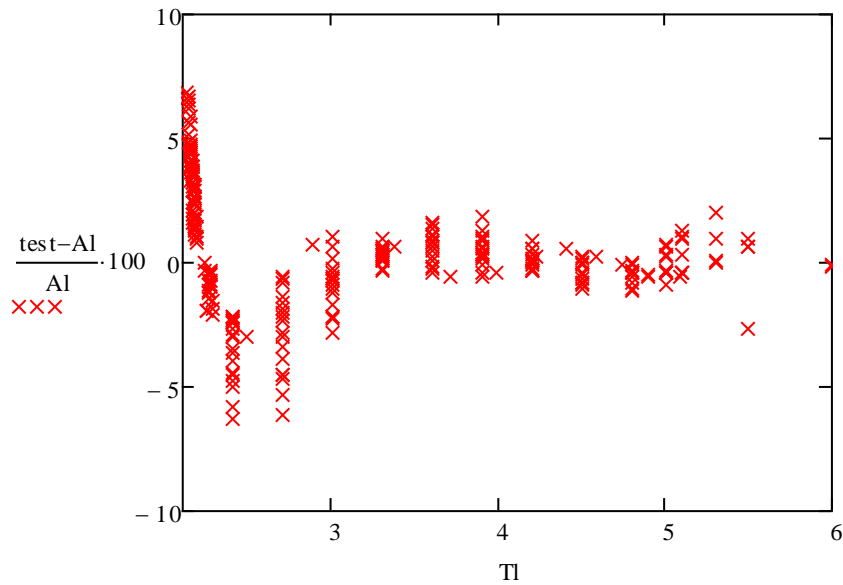
C	1	2	3	4
1	-3.35085196400000E+00	1.34097957000000E+03	-7.70366309700000E+04	9.35807446800000E+05
2	1.25707340500000E+01	-4.58375169100000E+03	2.75933733600000E+05	-4.87212056200000E+06
3	-1.86880305630000E+01	6.02816968100000E+03	-3.66031389800000E+05	7.00627069700000E+06
4	1.41162001070000E+01	-3.96092753200000E+03	2.37172063600000E+05	-4.30049626500000E+06
5	-5.66874942300000E+00	1.39414480100000E+03	-8.20984880500000E+04	1.35329737000000E+06
6	1.12565814400000E+00	-2.52791577585000E+02	1.48769908400000E+04	-2.38482299100000E+05
7	-8.76321580000000E-02	1.86413689960000E+01	-1.12623057600000E+03	2.01433783400000E+04
C	5	6	7	
1	1.911539415000E+07	-3.40466053500000E+08	3.63689771400000E+05	
2	5.530425567000E+06	-9.39953168000000E+07	8.12156511100000E+09	
3	-2.624617801000E+07	2.77128050900000E+08	-1.03439968000000E+10	
4	-4.237112776000E+06	4.30156719600000E+08	1.17892745100000E+09	
5	1.258557104000E+07	-4.54672638600000E+08	2.29990654200000E+09	
6	-3.489376303000E+06	1.24497656500000E+08	-8.32581062900000E+08	
7	2.191287993000E+05	-9.91315839200000E+06	7.57028969900000E+07	

Πίνακας 11.2.2: Σταθερές εξίσωσης 11.2.2

$$r_{\text{MW}}(T,P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(C_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right)$$

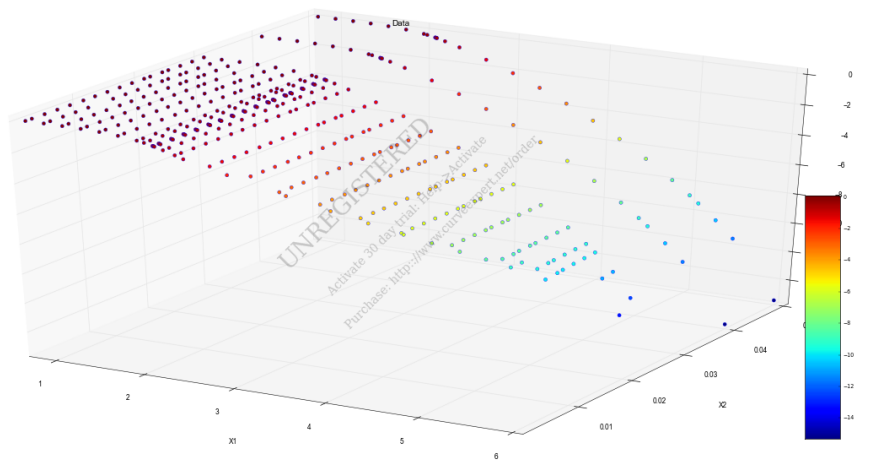
11.2.2

Με τα σφάλματα να είναι τα ακόλουθα.



Διάγραμμα 11.2.4: % απόκλισης των τιμών της συνάρτησης Helmholtz από τις αντίστοιχες πειραματικές στο HeI

Με τα πειραματικά δεδομένα να είναι:



11.2.5: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών $F[\text{kJ/kgK}]-P[\text{atm}]-T[\text{K}]$ στο HeI

11.3 Περιοχή ατμού

Και στην περιοχή του ατμού αντίστοιχα με την περιοχή του υγρού δεν έχουμε περίεργες συμπεριφορές, οπότε κρατάμε το ίδιο προφίλ συνάρτησης με το υγρό και πάλι χωρίς λογαρίθμηση.

Gibbs free energy

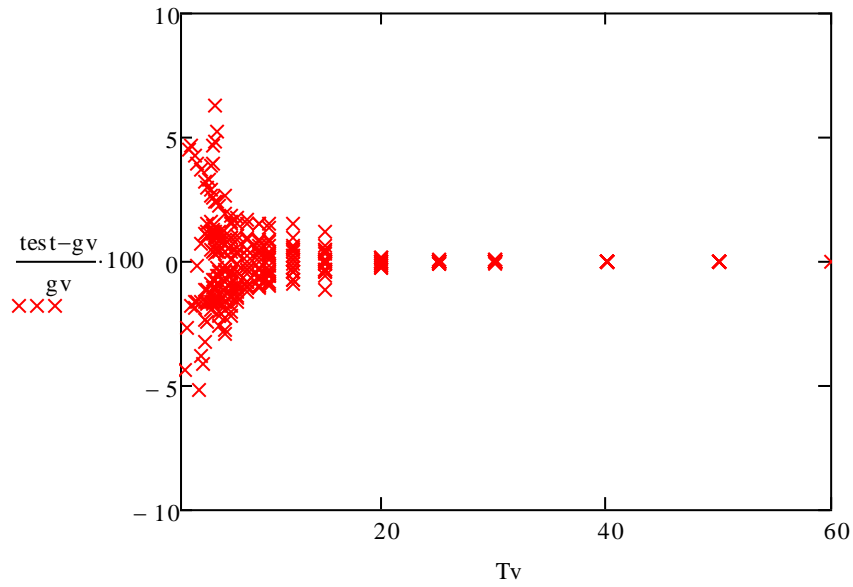
C	1	2	3	4
1	2.00182035980000E+01	4.69742562700000E+03	-7.01368423300000E+05	4.35077541600000E+07
2	-9.22246871400000E+00	-7.20098635668000E+02	1.93544251900000E+05	-1.34886068500000E+07
3	-1.17261705000000E+00	3.62961931809000E+02	-6.32452927500000E+04	4.42244689000000E+06
4	3.62347840000000E-02	-2.21637608330000E+01	4.36417963700000E+03	-3.23286112600000E+05
5	1.58434464000000E-04	4.49461132000000E-01	-1.17453341548000E+02	9.44834315000000E+03
6	-2.45989664900000E-05	-1.44726886500000E-03	1.25658658600000E+00	-1.17363486095000E+02
7	2.80974793300000E-07	-2.72072620200000E-05	-3.68182007200000E-03	4.94239835000000E-01
C	5	6	7	
1	-1.111214154000E+09	9.75819699500000E+09	1.00000000000000E+00	
2	3.583290998000E+08	-3.20150436600000E+09	1.00000000000000E+00	
3	-1.411691593000E+08	2.04467101000000E+09	-1.07815961100000E+10	
4	1.086507491000E+07	-1.67247622600000E+08	9.54878617700000E+08	
5	-3.306644868000E+05	5.23076420700000E+06	-3.05584349800000E+07	
6	4.325131803000E+03	-6.98979421300000E+04	4.11339297000000E+05	
7	-1.983425312400E+01	3.28711854052000E+02	-1.93206914800000E+03	

Πίνακας 11.3.1: Σταθερές εξίσωσης 11.3.1

$$r_{\text{MW}}(T, P) := \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N \left(C_{i+1, j+1} \cdot T^i \cdot P^j \right)$$

11.3.1

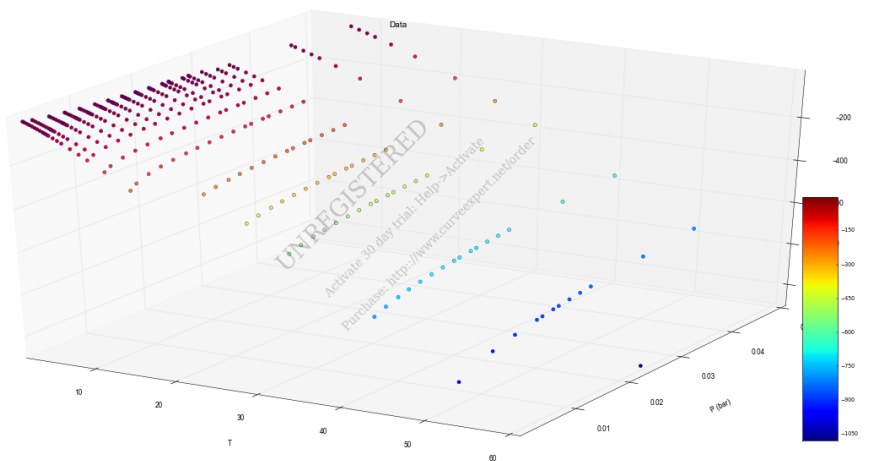
Και αντίστοιχα τα σφάλματα:



Διάγραμμα 11.3.1: % απόκλισης τιμών συνάρτησης Gibbs σε σχέση με πειραματικές στο αέριο

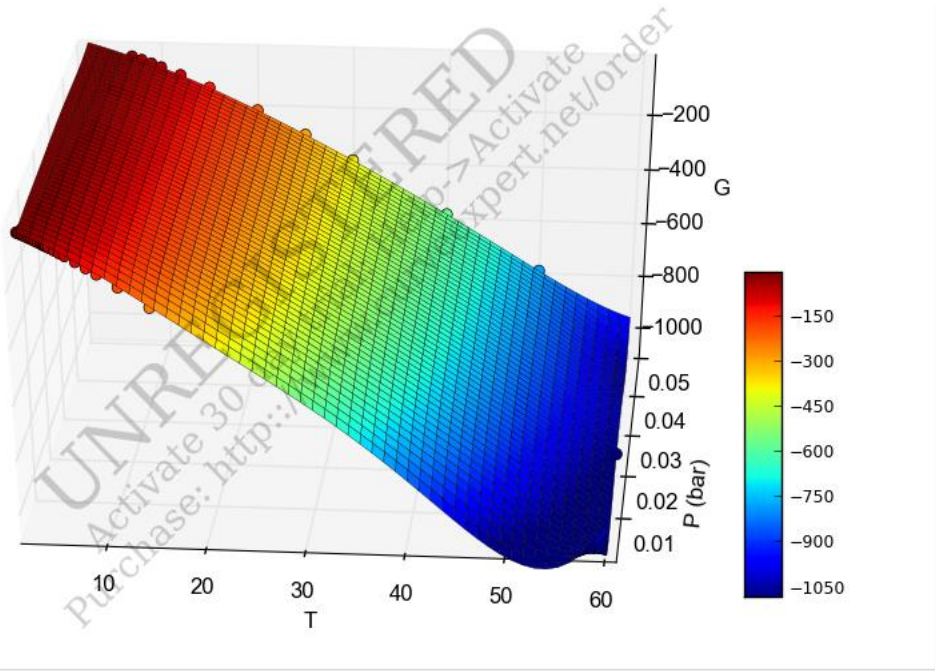
Άρα και στην περιοχή του ατμού βλέπουμε ότι έχουμε πολύ μικρές αποκλίσεις.

Πειραματικά δεδομένα:



11.3.2: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών ελεύθερης ενέργειας Gibbs στο αέριο

Και αντίστοιχα η συνάρτηση μέσα στα πειραματικά δεδομένα αυτά:



11.3.3: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών και υπολογισθείσας συνάρτησης της ελεύθερης ενέργειας Gibbs στο αέριο

Οπότε και εδώ βλέπουμε την ομαλότητα που μας δείχνει ότι μπορούμε να εμπιστευτούμε τις παραγώγους της συνάρτησης.

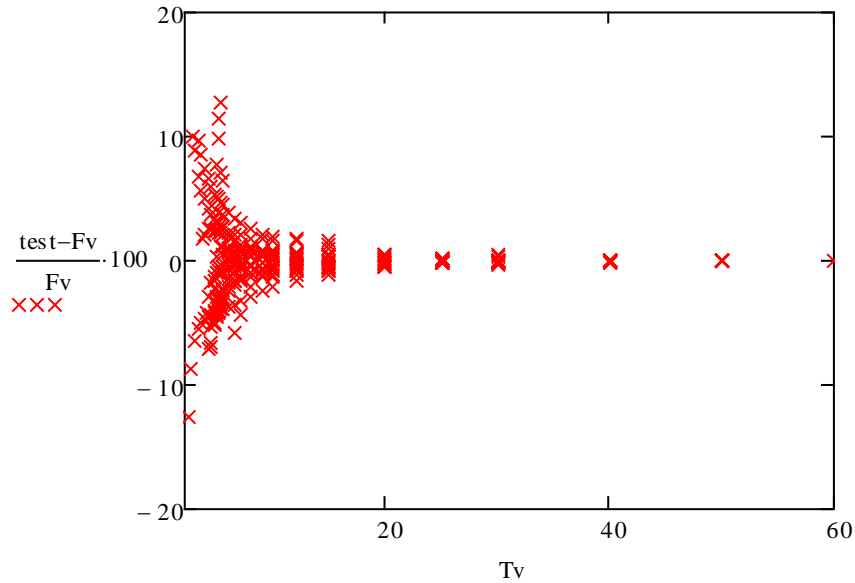
Helmholtz free energy

C	1	2	3	4
1	2.17957310170000E+01	1.94941113900000E+03	-9.30327973500000E+04	1.61685452700000E+06
2	-9.42670947300000E+00	1.45980974541000E+02	-1.11297387100000E+04	6.20331304400000E+05
3	-1.05790435500000E+00	1.09292833287000E+02	-6.44956394600000E+03	1.61211450100000E+05
4	3.51488380000000E-02	-2.33385064200000E+00	-2.43157163986000E+02	2.62875192300000E+04
5	-6.42817421300000E-04	-2.54039600000000E-02	1.70620753200000E+01	-8.61611176743000E+02
6	8.90235080500000E-06	-4.71383165500000E-06	-9.34961600000000E-02	-1.03948786750000E+01
7	-7.81513274800000E-08	1.33934598000000E-05	-2.12001648600000E-03	3.22973924000000E-01
C	5	6	7	
1	-4.972951255000E+06	3.57524415700000E+06	-5.82184977900000E+06	
2	-9.985162980000E+06	3.26044490800000E+06	-5.66726247968000E+02	
3	-2.355293455000E+06	2.21721455100000E+07	-2.83682355500000E+06	
4	-6.944432651000E+05	5.37264692100000E+06	4.30303538000000E+05	
5	-1.921608590000E+03	6.41815156700000E+05	-7.64876431100000E+06	
6	1.320263692000E+03	-3.92488215199999E+04	3.52203521100000E+05	
7	-1.990684683400E+01	4.85085899428000E+02	-4.00718354900000E+03	

Πίνακας 11.3.2: Σταθερές εξίσωσης 11.3.2

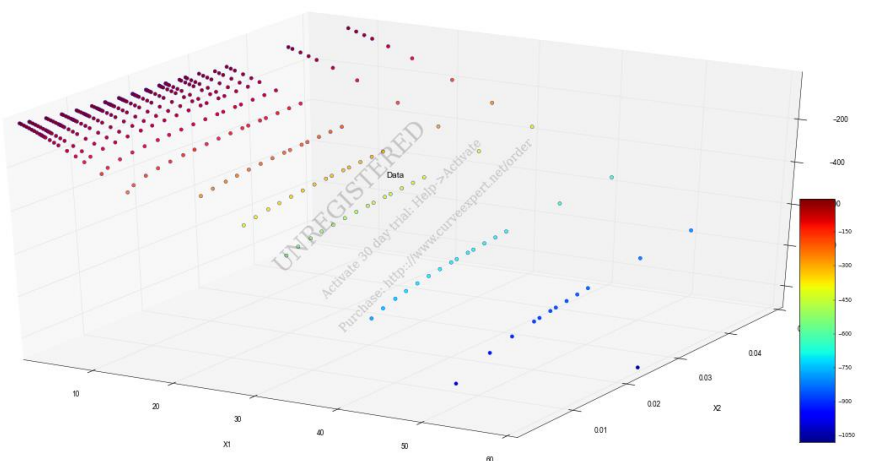
$$r(T,P) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N (C_{i+1,j+1} \cdot T^i \cdot P^j)$$

Με τα σφάλματα να είναι:



Διάγραμμα 11.3.4: % απόκλισης τιμών συνάρτησης ελεύθερης ενέργειας Helmholtz από τις πειραματικές

Και τις πειραματικές τιμές στο ακόλουθο διάγραμμα:



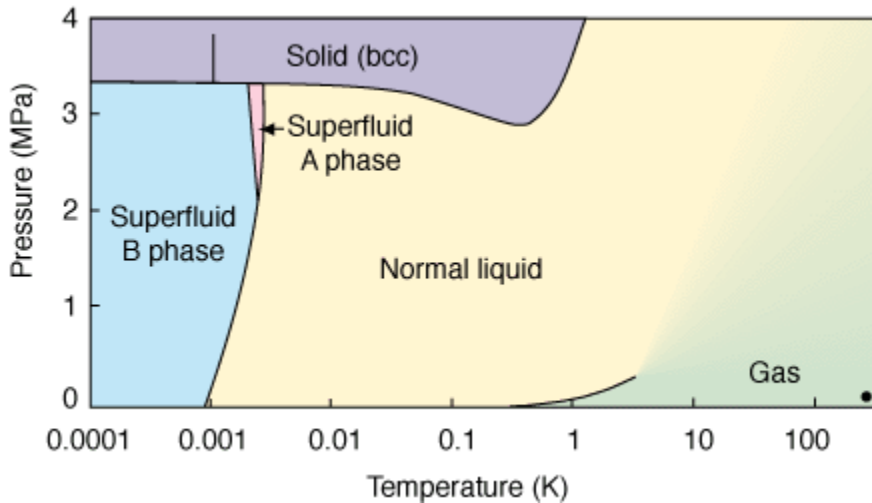
11.3.5: 3D διάγραμμα πειραματικών τιμών $F[\text{kJ/kgK}]-P[\text{atm}]-T[\text{K}]$

Έχοντας πλέον δώσει τις βασικές θερμοδυναμικές συναρτήσεις για το υγρό και τον ατμό, μπορούμε εδώ να σχολιάσουμε ότι βλέποντας τα σφάλματα, φαίνεται ότι πρόκειται για πολύ ακριβείς συναρτήσεις όπου μπορούν να χρησιμοποιηθούν όχι μόνο για προσδιορισμό τάξης μεγέθους, όπως στο υπερρευστό, αλλά και για ακριβείς θερμοδυναμικούς υπολογισμούς.

Αρχείο αναλυτικών υπολογισμών: [MathCad references\Table Equations\diags.xmcd](#)

12 Helium 3

Διάγραμμα Φάσεων Ηλίου 3



Διάγραμμα 12.1: Διάγραμμα φάσεων Ηλίου 3 συναρτήσει θερμοκρασίας και πίεσης.

Το Ήλιο, ως στοιχείο, αποτελείται από δύο ισότοπα, το He4 που μελετήσαμε μέχρι στιγμής στη εργασία αλλά και το He3. Το He3 αποτελεί ένα σταθερό μη ραδιενεργό ισότοπο που αποτελείται από δύο πρωτόνια και ένα νετρόνιο. Αποτελεί ένα πολύ σπάνιο στη φύση ισότοπο του He με ποσοστό 0.000137% στη φύση.

12.1 Υπερρευστότητα στο He3

Κατά τις πειραματικές μελέτες που έχουν γίνει πάνω στο He3, έχει παρατηρηθεί ότι απαιτεί πολύ χαμηλότερες θερμοκρασίες για την υγροποίησή του. Αρχικά ψύχοντας το He3 σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες αντίστοιχες με αυτές του He4, δεν παρατηρήθηκε κάποια ιδιαίτερη συμπεριφορά. Ωστόσο με την εξέλιξη των μεθόδων ψύξης κατεβάζοντας το He3 σε ακόμη χαμηλότερες θερμοκρασίες, κοντά στο 0,001 K, παρατηρήθηκε ότι παρουσιάζει κι αυτό συμπεριφορά υπερρευστού.

Αυτό ωστόσο ήρθε σε αντίθεση με την υπάρχουσα θεωρία, καθώς το He3 αποτελείται όπως είπαμε από 2 πρωτόνια και ένα νετρόνιο, κάθε ένα εκ των οποίων έχει spin $\frac{1}{2}$, το ίδιο έχει κι αυτό ημιακέραιο spin, που σημαίνει ότι δεν μπορεί να υπάγεται στην στατιστική Bose-Einstein οπότε και να μπαίνει σε κατάσταση συμπυκνώματος Bose-Einstein οπότε και να εξηγείται και η υπερρευστή συμπεριφορά του.

Κατ' αρχήν για να κατανοήσουμε το λόγο που δεν μπορούμε να έχουμε τέτοιου είδους συμπύκνωμα σε φερμιονικό αέριο, πρέπει να θυμηθούμε τις ιδιότητες της στατιστικής Bose-Einstein.

Σε ένα σύστημα που υπάγεται στη στατιστική αυτή ουσιαστικά όλα τα στοιχεία του συστήματος θα εκφυλιστούν και θα έρθουν στο ground state, δηλαδή στη χαμηλότερη δυνατή τους ενέργεια. Πράγμα που σημαίνει ότι θα πρέπει στο ίδιο σύστημα να έχουμε περισσότερα από ένα στοιχεία με την ίδια ενέργεια.

Αυτό το γεγονός όμως είναι κάτι που αντιβαίνει στην απαγορευτική αρχή του Pauli.

12.1.1 Απαγορευτική αρχή του Pauli

Υποθέτουμε δύο σωματίδια με ημιακέραιο spin. Άρα για την κυματοσυνάρτησή τους θα ισχύει:

$$\Psi(r_1, r_2) = e^{i\pi} \cdot \Psi(r_2, r_1) = -\Psi(r_2, r_1) \quad 12.1.1.1$$

Για να βρίσκονται και τα δύο σωματίδια στην ίδια ενεργειακή κατάσταση θα πρέπει:

$$r_1 = r_2$$

$$\Psi(r_1, r_1) = -\Psi(r_1, r_1) \quad \Psi(r_1, r_1) = 0$$

12.1.1.2

Άρα δεν υπάρχει κατάλληλη κυματοσυνάρτηση ώστε δύο σωματίδια με ημιακέραιο spin, στο ίδιο σύστημα, να βρίσκονται στην ίδια ενεργειακή κατάσταση.

Συνεπώς με βάση το παραπάνω βλέπουμε ότι το σύστημά μας για το He3 αναγκαστικά θα υπάγεται στην στατιστική Fermi-Dirac, καθώς είναι αυτή που περιγράφει συστήματα στα οποία δεν επιτρέπεται διαφορετικά στοιχεία να βρίσκονται στην ίδια κατάσταση.

Παραμένει ωστόσο ο προβληματισμός, με ποιον τρόπο θα μπορέσει ένα τέτοιο σύστημα να έρθει σε κατάσταση υπερρευστού.

Την απάντηση σ' αυτό το ερώτημα έδωσε ο Cooper με τη θεώρησή του για τα ζεύγη φερμιονίων.

12.1.2 Θεώρηση του Cooper

Για να δούμε τη διαδικασία πραγματοποίησης συμπύκνωσης Bose-Einstein σε φερμιονικό αέριο θεωρούμε αέριο ηλεκτρονίων μέσα σε αγωγό.

Σύμφωνα με τη θεώρηση του Cooper δύο φερμιόνια συμπεριφέρονται ως ζεύγος, ακολουθώντας έτσι ιδιότητες παρόμοιες ως ένα βαθμό με αυτές ενός μποζονίου.

Θεωρούμε 2 σωματίδια μέσα σε μονοδιάστατο σύστημα, οπότε η εξίσωση του Schrodinger που τα περιγράφει θα είναι η ακόλουθη:

$$\frac{-\hbar^2}{2 \cdot m_1} \left(\frac{d^2}{dr_1^2} \Psi(r_1, r_2) \right) - \frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2} \left(\frac{d^2}{dr_2^2} \Psi(r_1, r_2) \right) + V(r_1 - r_2) \cdot \Psi(r_1, r_2) = E \cdot \Psi(r_1, r_2) \quad 12.1.2.1$$

Μετασχηματίζουμε τώρα την παραπάνω εξίσωση σε σύστημα συντεταγμένων κέντρου μάζας ως:

$$\frac{1}{m_1} \cdot \frac{d^2}{dr_1^2} + \frac{1}{m_2} \cdot \frac{d^2}{dr_2^2} = \frac{1}{m_1 + m_2} \cdot \frac{d^2}{dX^2} + \mu \cdot \frac{d^2}{dx^2} \quad 12.1.2.2$$

$$X = \frac{m_1 \cdot r_1 + m_2 \cdot r_2}{m_1 + m_2} \quad 12.1.2.3$$

$$x = r_2 - r_1 \quad 12.1.2.4$$

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \quad 12.1.2.5$$

Μετά τη μετατροπή, λοιπόν, η εξίσωση που προκύπτει είναι:

$$\frac{-\hbar^2}{2 \cdot m_1} \left(\frac{d^2}{dr_1^2} \Psi(r_1, r_2) \right) - \frac{\hbar^2}{2 \cdot m_2} \left(\frac{d^2}{dr_2^2} \Psi(r_1, r_2) \right) = \frac{-\hbar^2}{2 \cdot (m_1 + m_2)} \cdot \frac{d^2}{dR^2} \Psi(R, r) + \frac{-\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \frac{d^2}{dr^2} \Psi(R, r) \quad 12.1.2.6$$

$$\frac{-\hbar^2}{2 \cdot (m_1 + m_2)} \cdot \frac{d^2}{dR^2} \Psi(R, r) + \frac{-\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \frac{d^2}{dr^2} \Psi(R, r) + V(r) \cdot \Psi(R, r) = E \cdot \Psi(R, r) \quad 12.1.2.7$$

Όπου

$$\Psi(R,r) = e^{i \cdot p \cdot \frac{R}{\hbar}} \cdot \Psi(r) \quad 12.1.2.8$$

Και

$$\frac{-\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \frac{d^2}{dr^2} \Psi(r) + V(r) \cdot \Psi(r) = E' \cdot \Psi(r) \quad 12.1.2.9$$

Με

$$E' = E - \frac{p^2}{2 \cdot (m_1 + m_2)} \quad 12.1.2.10$$

Οπότε τελικά έχουμε καταφέρει να μετασχηματίσουμε τη διαφορική εξίσωση Schrodinger δύο σωματιδίων σε μορφή ενός σωματιδίου.

Θεωρούμε τώρα μία σφαιρική επιφάνεια μέσα στον αγωγό στην οποία τα ηλεκτρόνια αλληλοεπιδρούν ανταλλάσσοντας φωνόνια, οπότε η ορμή και η ενέργεια του συστήματος πρέπει να διατηρείται.

Σε μία συντηρητική και σχετικά απλοϊκή προσέγγιση του προβλήματος μπορούμε να θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια στη επιφάνεια Fermi (δηλαδή στην προαναφερθείσα σφαίρα) αλληλοεπιδρούν μεταξύ τους αν και μόνο αν έχουν διαφορά ενέργειας μικρότερη από την ενέργεια που μπορεί να φέρει ένα φωνόνιο.

Οπότε το δυναμικό λόγω της αλληλεπίδρασης δύο ηλεκτρονίων θα έχει τη μορφή:

$$V(p) = -V_0, \quad \text{αν } \frac{p}{2m} - E_F < \hbar \omega_D \quad 12.1.2.11$$

$$V(p) = 0. \quad \text{Αλλιώς} \quad 12.1.2.12$$

Βλέπουμε λοιπόν ότι το παραπάνω αντιστοιχεί σε ένα δυναμικό δέλτα, οπότε η εξίσωση του Schrodinger που τελικά παίρνουμε είναι:

$$\frac{-\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dr^2} \Psi(r) - V_0 \delta(r, 0) \cdot \Psi(r) = E \cdot \Psi(r) \quad 12.1.2.13$$

Μετασχηματίζουμε τώρα την εξίσωση αυτή με κατάλληλο μετασχηματισμό Fourier, ώστε να μεταβούμε απ' το χώρο της θέσης στο χώρο της ορμής.

$$\text{Fourier transform} \quad \Psi(r) = \int \Psi'(p) \cdot e^{i \cdot k \cdot x} dp \quad 12.1.2.14$$

$$\frac{\hbar^2}{m} p \cdot \Psi'(p) - V_0 \cdot \Psi(0) = E \cdot \Psi'(p) \quad 12.1.2.15$$

$$\Psi'(p) = \frac{V_0 \cdot \Psi(0)}{\frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m} + E} \quad 12.1.2.16$$

$$\int \Psi'(p) dp = \Psi(0) \quad 12.1.2.17$$

$$1 = V_0 \cdot \left[\int_0^{\omega_D} \frac{1}{\frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m} + E} \cdot \frac{1}{(2 \cdot \pi)^D} dk^D \right] \quad 12.1.2.18$$

$$1 = \frac{V_0 \cdot S_{D-1}}{(2 \cdot \pi)^D} \int_0^{\omega_D} \frac{1}{\frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m} + E} \cdot k^{D-1} dk \quad 12.1.2.19$$

Μέσα στο δυναμικό βρισκόμαστε στη επιφάνεια μίας σφαίρας, οπότε κινούμαστε σε 2 διαστάσεις, $D=2$ οπότε:

$$1 = \frac{V_0 \cdot S_{D-1}}{(2 \cdot \pi)^D} \int_0^{\omega_D} \frac{1}{k^2 + \left(\frac{\sqrt{2 \cdot m \cdot E}}{\hbar}\right)^2} \cdot k^{D-1} dk \quad 12.1.2.20$$

$$1 = \frac{V_0 \cdot m}{\pi \cdot \hbar} \int_{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar}}^{\omega_D} \frac{1}{k} dk \quad 12.1.2.21$$

$$\frac{1}{\omega_D} \cdot \left(\frac{\sqrt{2 \cdot m \cdot E}}{\hbar}\right)^{-1} = e^{\frac{\pi \cdot \hbar}{m \cdot V_0}} \quad 12.1.2.22$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m \cdot \omega_D^2} \cdot e^{-2 \cdot \frac{\pi \cdot \hbar}{m \cdot V_0}} \quad 12.1.2.23$$

Οπότε κατά τον τρόπο αυτό καταλήγουμε σε bound state του συστήματος των δύο ηλεκτρονίων, πράγμα που μας δείχνει ότι πλέον τα διαφορετικά αυτά φερμιόνια συμπεριφέρονται με ιδιότητες ενός μποζονίου, οπότε τα ζεύγη των φερμιονίων ακολουθούν κατανομή Bose-Einstein οπότε και μπορούν να δημιουργήσουν υπερρευστό.

Η παραπάνω, λοιπόν, θεώρηση μας δείχνει αβίαστα ότι όντως το φερμιονικό αέριο He3 μπορεί τελικά να γίνει υπερρευστό.

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών: [MathCad references\Cooper pairing problem.xmcd](#)

12.2 Μηδενικός Ήχος

Όπως αναφέραμε στη μελέτη του He4 σε κατάσταση υπερρευστού, παρατηρούνται διαφορετικοί ήχοι, που αποτελούν κινήσεις και αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στο υπερρευστό και το ρευστό αντίστοιχα.

Καθώς σε φερμιονικά αέρια εκτός από quasiparticles πρέπει να αντιμετωπίσουμε και τις σχετικές κινήσεις των Cooper pairs, πρέπει να ανάγουμε κι ένα ακόμα είδος κίνησης.

Όπως είδαμε παραπάνω τα φερμιονικά αέρια, σχηματίζοντας Cooper pairs, μπορούν να έρθουν σε κατάσταση συμπυκνώματος Bose-Einstein. Ιδιαίτερα ενδιαφέρον κομμάτι αποτελεί η διάδοση του ήχου μέσα σ' ένα τέτοιο συμπύκνωμα. Γενικά ο ήχος αποτελεί ένα διάμηκες κύμα που μεταφέρεται απ' το μέσο, λόγω της αλληλουχίας των συγκρούσεων των ατόμων-μορίων που το απαρτίζουν. Ωστόσο, μέσα σ' ένα φερμιονικό υγρό, σε χαμηλές θερμοκρασίες, οι συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων είναι αμελητέες. Σύμφωνα με τον Landau, ένα διαφορετικό είδος ήχου μπορεί να οριστεί στις θερμοκρασίες αυτές. Αυτός ο μηδενικός ήχος ουσιαστικά δημιουργείται από τις ανακατατάξεις των quasiparticles (δηλαδή των φερμιονικών σωματιδίων στη χαμηλή αυτή θερμοκρασία).

Μία ιδιαιτερότητα που έχουν τα quasiparticles, σε ένα φερμιονικό αέριο He3 σε σχέση για παράδειγμα με ένα φερμιονικό αέριο ηλεκτρονίων, είναι ότι λόγω του υψηλότερου φορτίου και της μεγαλύτερης μάζας των σωματιδίων, αλληλεπιδρούν ισχυρότερα μεταξύ τους σε σχέση με τα σωματίδια σε ένα αέριο ηλεκτρονίων. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την ύπαρξης σχετικής στροφορμής στα προαναφερθέντα Cooper pairs, τα οποία σε διαφορετική περίπτωση θα είχαν μηδενικό spin. Έτσι μπορούμε να διαχωρίσουμε σε δύο είδη τα κύματα του μηδενικού αυτού ήχου μέσα σε ένα τέτοιο υγρό: στα p-waves ($l=1$) και στα d-waves ($l=2$) ανάλογα με την κατάσταση της στροφορμής τους. Τα κύματα αυτά παρατηρήθηκαν και πειραματικά με τη δημιουργία superfluid he3 στο εργαστήριο. Σημαντική σημείωση αποτελεί ότι το άθροισμα των

κυμάτων με περιττή στροφορμή πρέπει να είναι 0, ώστε να διατηρείται συνολικά η μποζονική συμπεριφορά των ζευγών για να μπορεί να υφίσταται συμπύκνωμα B-E.

Μία ιδιότητα που προκύπτει απ' τη συμπεριφορά αυτή είναι ότι λόγω του spin κατά τη μετακίνηση τα quasiparticles επηρεάζουν τα spin των γειτονικών τους, οπότε παρατηρείται μια φερομαγνητική τάση, η οποία οδηγεί στον περαιτέρω σχηματισμό ζευγών Cooper, τα οποία δεν περιορίζονται άμεσα από την απαγορευτική αρχή του Pauli, αλλά θα πρέπει και πάλι ο αριθμός τους να είναι περιττός, οπότε τελικά έχουν έναν παραπάνω βαθμό ελευθερίας σε σχέση με τα σωματίδια ενός συνήθους υπερρευστού, όπως το He4 ή το αέριο ηλεκτρονίων.

12.3 Ενέργεια Fermi

Μία πολύ σημαντική ιδιότητα του κάθε υπερρευστού από την οποία μπορούμε να υπολογίσουμε διάφορα στοιχεία για τη συμπεριφορά του, όταν βρίσκεται σε κατάσταση συμπυκνώματος Bose-Einstein, είναι η ενέργεια ή αντίστοιχα η θερμοκρασία fermi. Η ενέργεια fermi, ουσιαστικά αποτελεί τη διαφορά ενέργειας μεταξύ της χαμηλότερης και της υψηλότερης ενεργειακής κατάστασης σωματιδίων σε ένα κβαντικό σύστημα στο απόλυτο 0. Η ενέργεια fermi όπως γίνεται αντιληπτό μπορεί να ορισθεί μόνο για μη αλληλεπιδρώντα φερμιόνια, καθώς αν τα σωματίδια δεν ακολουθούσαν μεμονωμένα κατανομή Fermi-Dirac αλλά ακολουθούσαν κατανομή Bose-Einstein, τότε σε θερμοκρασία απόλυτου 0, όλες οι ενεργειακές καταστάσεις θα βρίσκονταν στο ground state, οπότε η διαφορά των ενεργειών τους θα είναι πάντα 0. Επίσης, πρέπει τα σωματίδια να είναι μη αλληλεπιδρώντα καθώς, αν τα σωματίδια αλληλοεπιδράσουν τότε αυτό θα οδηγήσει σε διέγερση κάποιου κβαντικού αριθμού τους οπότε και σε αύξηση της θερμοκρασίας πάνω από το απόλυτο 0.

Υπολογισμός της ενέργειας Fermi:

Θεωρούμε μία σφαιρική επιφάνεια, την οποία αναπτύσσουμε σε δισδιάστατο πηγάδι δυναμικού. Χάρην απλότητας θεωρούμε ότι το δυναμικό μέσα στο πηγάδι έχει μηδενική τιμή. Θεωρούμε αέριο ηλεκτρονίων μέσα στο πηγάδι δυναμικού (ως την απλούστερη περίπτωση φερμιονικού αερίου). Καθώς το αέριο είναι περιορισμένο τελικά από το δυναμικό, οι κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων θα αποτελούν στάσιμα κύματα με όρια-κόμβους τα όρια του πηγαδιού.

Η μαθηματική περιγραφή του παραπάνω με βάση την εξίσωση Schrodinger είναι:

$$\frac{-\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{d^2}{dr^2} \Psi \right) - V_0 \Psi(0) = E \cdot \Psi \quad 12.3.1$$

Με ανάλογο όπως και παραπάνω τρόπο καταλήγουμε στη σχέση

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{d^2}{dr^2} \Psi(r) + V(r) \cdot \Psi(r) = E \cdot \Psi(r) \quad 12.3.2$$

Οπότε λύνοντας τη διαφορική εξίσωση μπορούμε να πάρουμε τη σχέση για την ενέργεια Fermi He3 ακολουθώντας και πάλι την προσέγγιση του Sommerfeld, κάνοντας χρήση αντίστοιχων συνοριακών συνθηκών με αυτές που χρησιμοποιήθηκαν στην προσέγγιση για τον προσδιορισμό της θερμοκρασίας συμπύκνωσης Bose-Einstein.

$$E_F(k) = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m} \quad 12.3.3$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \left(3 \cdot \pi^2 \cdot \frac{N}{V} \right) \quad 12.3.4$$

Για να έχουμε μια εποπτεία αυτών που υπολογίσαμε, πραγματοποιούμε έναν αριθμητικό υπολογισμό για το He3:

Για θερμοκρασία κοντά στο απόλυτο μηδέν μπορούμε να θεωρήσουμε πυκνότητα του He3 $\rho = 0.081 \text{ g/cm}^3$, και γνωρίζουμε το μοριακό βάρος ως $M = 3a_{\mu} = 3 \cdot 1.67 \cdot 10^{-24} \text{ g}$

$$n := \frac{\rho}{M} \quad 12.3.5$$

$$\hbar := \frac{6.626 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot \pi} \quad 12.3.6$$

$$n_{\lambda} := 1.61710^{28} \quad 12.3.7$$

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ K} \cdot \text{eV} \quad 12.3.8$$

$$E_F := \frac{(\hbar \text{bar})^2}{2 \cdot M} \cdot \left(3 \cdot \pi^2 \cdot n \right)^{\frac{2}{3}} \quad 12.3.9$$

$$E_F = 6.8 \times 10^{-26} \text{ eV} \quad 12.3.10$$

$$T_F := \frac{E_F}{k} \rightarrow 0.0049220988549951088 \text{ K} \quad 12.3.11$$

Άρα για τη θερμοκρασία αυτή αντίστοιχα με βάση τον τύπο που αποδείξαμε προηγούμενα, το μήκος κύματος κατά de Broglie θα είναι:

$$\lambda := \frac{\hbar \text{bar} \cdot 2 \cdot \pi}{\sqrt{2 \cdot M \cdot E_F}} \quad 12.3.12$$

$$\lambda = 8.032 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Αρχείο αναλυτικών υπολογισμών: [MathCad references\He 3 Fermi Energy.xmcd](#)

12.4 Θερμοδυναμική Μελέτη He3

Για τη μελέτη των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του He3, όπως και το He4, θα πορευτούμε αρχικά θεωρητικά και εν συνεχεία με βάση τα πειραματικά δεδομένα.

12.4.1 Θεωρητική Προσέγγιση

Αρχικά θα επιχειρήσουμε θεωρητικά να υπολογίσουμε κάποια θερμοδυναμικά μεγέθη ξεκινώντας από τις αντίστοιχες κβαντομηχανικές και στατιστικές εξισώσεις.

Θεωρούμε ότι το φερμιονικό αέριο βρίσκεται εγκλεισμένο μέσα σε πηγάδι δυναμικού, που ουσιαστικά εν τέλει αποτελεί οποιοδήποτε αδιαβατικό σκεύος που έχουμε χρησιμοποιήσει κατά τη διαδικασία. Σύμφωνα με τα παραπάνω το αέριο αυτό θα διέπεται από τη στατιστική Fermi-Dirac. Επίσης, λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli γνωρίζουμε ότι θα υπάρχουν μοναδικά ζευγάρια φερμιονίων με αντίθετα spin. Οπότε το μακροσκοπικό σύστημα ουσιαστικά μπορεί να εκφυλιστεί στα δύο αυτά συστήματα με αντίθετα spin, οπότε και να γίνει μελέτη μόνον με βάση το ένα.

Οπότε:

$$v = \sqrt{\frac{2 \cdot E}{m}} \quad \Delta v = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{d}{dE} v \right) \cdot \Delta E \quad \Delta v \rightarrow \frac{\sqrt{2} \cdot \Delta E}{4 \cdot m \cdot \sqrt{\frac{E}{m}}} \quad 12.4.1.1$$

Με αντίστοιχα την ενέργεια ανηγμένη στο χώρο να προκύπτει ως:

$$\Delta G_v = \frac{8 \cdot \pi \cdot m^3 \cdot V}{h^3} \cdot v^2 \cdot \Delta v \quad 12.4.1.2$$

$$\Delta G_v \rightarrow \frac{4 \cdot \pi \cdot \sqrt{2} \cdot E \cdot V \cdot m \cdot \Delta E}{h^3 \cdot \sqrt{\frac{E}{m}}} \quad 12.4.1.3$$

Θεωρούμε βοηθητική μεταβλητή A:

$$A = 4\pi \cdot V \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad 12.4.1.4$$

$$\Delta G_E = A \cdot \sqrt{E} \cdot \Delta E \quad 12.4.1.5$$

Η στατιστική Fermi-Dirac μας λέει ότι το number density των ενεργειακών καταστάσεων των σωματιδίων.

$$\Delta N' = \frac{\Delta G}{\frac{(E-\mu)}{e^{k \cdot T} + 1}} \quad 12.4.1.6$$

$$\Delta N' = \frac{\Delta G_E}{\frac{(E-\mu)}{e^{k \cdot T} + 1}} \quad \Delta N' \rightarrow \frac{4 \cdot \pi \cdot \sqrt{E} \cdot V \cdot \Delta E \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}}{\frac{E-\mu}{e^{T \cdot k} + 1}} \quad 12.4.1.7$$

$$N = A \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E}}{\left(\frac{E-\mu}{e^{T \cdot k} + 1}\right)} dE \quad N \rightarrow 4 \cdot \pi \cdot V \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E}}{\frac{E-\mu}{e^{T \cdot k} + 1}} dE \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad 12.4.1.7$$

Παρατηρούμε στο σημείο αυτό ότι το παραπάνω ολοκλήρωμα δεν μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά. Για τον λόγο αυτό αναπτύσσουμε το μ σε δυναμοσειρά.

$$\mu = E_F \left[1 - \frac{1}{12} \cdot \pi^2 \cdot \left(k \cdot \frac{T}{E_F} \right)^2 - \frac{\pi^4}{80} \cdot \left(k \cdot \frac{T}{E_F} \right)^4 \dots \right] \quad 12.4.1.8$$

Άρα για $T = 0$

$$\mu = E_F \quad 12.4.1.9$$

$$\Delta N = \frac{4 \cdot \pi \cdot \sqrt{E} \cdot V \cdot \Delta E \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}}{e^{\frac{E - E_F}{T \cdot k}} + 1} \quad 12.4.1.10$$

Για $E - E_F < 0$

Προσεγγιστικά έχουμε:

$$\frac{E - E_F}{T \cdot k} = -\infty \quad 12.4.1.11$$

Οπότε

$$\Delta N_0 = \Delta G_E \quad \Delta N_0 \rightarrow 4 \cdot \pi \cdot \sqrt{E} \cdot V \cdot \Delta E \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad 12.4.1.12$$

Για $E - E_F > 0$

$$\Delta N_0 = 0 \quad 12.4.1.13$$

$$N = A \cdot \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE \quad N \rightarrow \frac{8 \cdot \pi \cdot E_F^{\frac{3}{2}} \cdot V \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}}{3} \quad 12.4.1.14$$

Οπότε τελικά θα έχουμε για το ορισμένο με αυτόν τον τρόπο σύστημα Ενέργεια Fermi:

$$E_F = \frac{h^2}{8 \cdot m} \cdot \left(\frac{3 \cdot N}{\pi \cdot V} \right)^{\frac{2}{3}} \quad 12.4.1.15$$

Έχοντας λοιπόν συνδέσει την ενέργεια του Fermi με το συγκεκριμένο σύστημα αναζητούμε τα μακροσκοπικά ενεργειακά μεγέθη ώστε να φθάσουμε στα θερμοδυναμικά.

Η συνολική ενέργεια του συστήματος θα είναι ουσιαστικά η αθροισμένη ενέργεια των ενεργειακών καταστάσεων των σωματιδίων επί τον αριθμό των σωματιδίων στο μακροσκοπικό σύστημα.

$$U = \sum_i (E \cdot \Delta N) \quad 12.4.1.16$$

$$U = A \cdot \int_0^{\infty} \frac{E^{\frac{3}{2}}}{\left(e^{\frac{E-E_F}{T \cdot k}} + 1 \right)} dE \quad 12.4.1.17$$

Και πάλι για τον υπολογισμό του παραπάνω ολοκληρώματος αναλύουμε την εσωτερική ενέργεια σε δυναμοσειρά ως:

$$U = A \cdot \int_0^{\infty} \frac{E^{\frac{3}{2}}}{\left(e^{\frac{E-E_F}{T \cdot k}} + 1 \right)} dE \quad 12.4.1.18$$

Οπότε για συγκεκριμένη ενεργειακή κατάσταση

$$E = \mu$$

Θα έχουμε:

$$\Delta N' = \frac{\Delta G_E}{\left(e^{\frac{E-\mu}{k \cdot T}} + 1 \right)} \quad 12.4.1.19$$

$$\Delta N' \rightarrow 2 \cdot \pi \cdot \sqrt{E} \cdot V \cdot \Delta E \cdot \left(\frac{2 \cdot m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad 12.4.1.20$$

$$\Delta N' - \frac{1}{2} \cdot \Delta G_E \rightarrow 0 \quad 12.4.1.21$$

Οπότε τελικά:

$$\Delta N' = \frac{1}{2} \cdot \Delta G_F \quad 12.4.1.21$$

Από τα παραπάνω λοιπόν έχουμε υπολογισμένο τον τύπο της εσωτερικής ενέργειας εξεφρασμένο από δυναμοσειρά με γνωστά μεγέθη, οπότε μπορούμε θερμοδυναμικά να παράγουμε το C_v .

$$C_v = \frac{d}{dT} U \quad 12.4.1.22$$

Με

$$U = \frac{3}{5} \cdot N \cdot E_F \cdot \left[1 + \frac{5}{12} \cdot \pi^2 \cdot \left(k \cdot \frac{T}{E_F} \right)^2 - \frac{\pi^4}{16} \cdot \left(k \cdot \frac{T}{E_F} \right)^4 \dots \right] \quad 12.4.1.23$$

Στην παραπάνω δυναμοσειρά μπορούμε να θεωρήσουμε ότι για τις πολύ χαμηλές θερμοκρασίες που πραγματευόμαστε, οι ανώτερης τάξης όροι μπορούν να θεωρηθούν αμελητέοι.

Κρατώντας λοιπόν τους σημαντικούς όρους μόνο με βάση τις παραπάνω εξισώσεις υπολογίζουμε:

$$C_v = \frac{\pi^2}{2} \cdot \left(\frac{k \cdot T}{E_F} \right) \cdot N \cdot k \quad 12.4.1.24$$

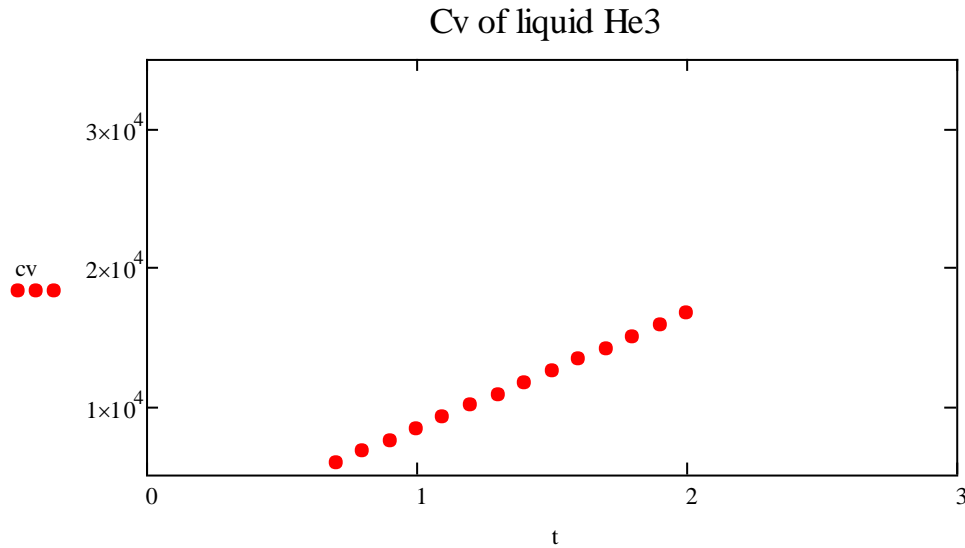
$$c_v = \frac{\pi^2}{2} \cdot \left(\frac{k \cdot T}{E_F} \right) \cdot R \quad 12.4.1.25$$

Γνωρίζοντας λοιπόν τις σταθερές:

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23}$$

$$R_{\text{gas}} := 8.31$$

Και έχοντας προηγουμένα υπολογίσει την ενέργεια Fermi για το He3, μπορούμε να υπολογίσουμε τις τιμές της ειδικής θερμότητάς του.



Διάγραμμα 12.4.1.1: Cv – θερμοκρασίας για υγρό Ήλιο 3

Αναλυτικό αρχείο υπολογισμών: [MathCad references\fermion gas.xmcd](#)

12.4.2 Καταστατική εξίσωση κρυογονικού ηλίου 3 – (0.1,3.375) K

Όμοια και με το ήλιο 4, για να μελετήσουμε τις θερμοδυναμικές ιδιότητες του ηλίου 3 θα κάνουμε χρήση κάποιων εξισώσεων, που έχουν δημιουργηθεί από υπολογιστικά προγράμματα προσομοίωσης καθώς και κατάλληλα πειραματικά δεδομένα, η συγκεκριμένη εξίσωση που επιλέγουμε να μελετήσουμε είναι κατασκευασμένη από τον Huang στην αντίστοιχη δημοσίευσή του.

Αναφερόμενη δημοσίευση:[6] [Text references\arp huang he3.pdf](#)

Η εξίσωση που θα χρησιμοποιήσουμε μας δίνει την ελεύθερη ενέργεια Helmholtz συναρτήσει της πυκνότητας και της θερμοκρασίας:

$$\begin{aligned} A/RT\alpha(\delta, \tau) = & C_1 \cdot \ln(\delta) \cdot \tau + \left(C_2 \cdot \delta^{-4} \cdot \tau^{-1} + C_3 \cdot \delta^{-1} \cdot \tau^{-2} + C_4 \cdot \delta^{-2} \cdot \tau^{-3} + C_5 \cdot \delta^{-2} \cdot \tau^{-4} \right) + \blacksquare \\ & \blacksquare + \left(e^{-\delta^2} - 1 \right) \cdot \left(C_6 \cdot \ln(\delta) + C_7 \cdot \delta^1 + C_8 \cdot \delta^2 + C_9 \cdot \delta^3 + C_{10} \cdot \delta^4 + C_{11} \cdot \delta^5 + C_{12} \cdot \delta^6 + C_{13} \cdot \delta^7 \right) \\ & \blacksquare + \left(e^{-\delta^2} - 1 \right) \cdot \left(C_{14} \cdot \delta^0 + C_{15} \cdot \delta^1 + C_{16} \cdot \delta^2 + C_{17} \cdot \delta^3 + C_{18} \cdot \delta^4 + C_{19} \cdot \delta^5 \right) \cdot \tau \cdot (\ln(\tau) - 1) \\ & \blacksquare + \left(e^{-\delta^2} - 1 \right) \cdot \left(C_{20} \cdot \tau^3 + C_{21} \cdot \tau^5 + C_{22} \cdot \tau^8 + C_{23} \cdot \tau^9 \right) \\ & \blacksquare + \left(e^{-\delta^2} - 1 \right) \cdot \delta^{-2} \cdot \left(C_{24} \cdot \tau^2 + C_{25} \cdot \tau^4 + C_{26} \cdot \tau^6 + C_{27} \cdot \tau^8 + C_{28} \cdot \tau^9 \right) \\ & \blacksquare + C_{29} \cdot \delta^2 \cdot \tau^4 \cdot e^{-(\delta^2 + \tau^2)} \end{aligned}$$

12.4.2.1 – πηγή [6]

Σε J/(KgK)

Και

$$R_M = 8.31447:$$

Οι παραπάνω σταθεροί συντελεστές της εξίσωσης δίνονται ως οι ακόλουθοι:

i	C	i	C
1	-3.57000E-01	15	1.64100E+01
2	-3.30000E-03	16	-1.36870E+01
3	9.97100E-06	17	5.70800E+00
4	1.71900E-06	18	-1.18700E+00
5	-2.65100E-08	19	9.80000E-02
6	1.41370E+01	20	-1.00000E-01
7	8.33200E+00	21	4.38000E-01
8	-2.13320E+01	22	-8.48000E-01
9	1.33330E+01	23	5.79000E-01
10	-4.49200E+00	24	1.57900E+00
11	8.84000E-01	25	1.09500E+00
12	-1.01000E-01	26	-3.81500E+00
13	5.47100E-03	27	6.72000E+00
14	-7.62500E+00	28	-4.02000E+00
		29	3.80000E-02

Πίνακας 12.4.2.1 – πηγή [6]: Σταθερές εξίσωσης 12.4.2.1

Τα λοιπά μεγέθη των οποίων γίνεται χρήση δίνονται ακολούθως;

$$M = 3.010 \quad \text{g/mol}$$

$$T_c = 3.3157 \quad \text{K}$$

$$\rho_c = 41.191 \quad \text{kg/m}^3$$

$$\delta \leftarrow \frac{\rho}{\rho_c} \quad 12.4.2.2$$

$$\tau \leftarrow \frac{T}{T_c} \quad 12.4.2.3$$

Τα δ και τ αποτελούν βοηθητικές μεταβλητές, δεν έχουν κάποιο λειτουργικό ρόλο.

$$R := \frac{R_M}{M} = 2.757 \quad 12.4.2.4$$

Οπότε η ελεύθερη ενέργεια κατά Helmholtz δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$A(\rho, T) = A/R T_c \left(\frac{\rho}{\rho_c}, \frac{T}{T_c} \right) \cdot R \cdot T_c \quad 12.4.2.5$$

Τώρα, εκτός από τη εξίσωση της ελεύθερης ενέργειας καταλαβαίνουμε ότι για να έχουμε μια καταστατική εξίσωση στη μορφή της πίεσης, της θερμοκρασίας και της πυκνότητας πρέπει προβούμε σε διάφορους μετασχηματισμούς, παρουσιάζονται λοιπόν, οι απαραίτητη μετασχηματισμοί μέσω των εξισώσεων Maxwell που πρέπει να γίνουν ώστε να πάρουμε τόσο την καταστατική εξίσωση όσο και τα υπόλοιπα καταστατικά μεγέθη:

Πίεση

$$p(\rho, T) = \frac{\rho^2}{1.0132510^2} \cdot \left(\frac{d}{d\rho} A(\rho, T) \right) \quad 12.4.2.6$$

Εδώ κάνουμε στη συνέχεια χρήση ενός διαφορετικού υπολογισμού της πυκνότητας συναρτήσει της πίεσης και της θερμοκρασίας, ώστε να μπορούμε να έχουμε τη συνάρτησή της και να κάνουμε τυχόν διαφορικούς λογισμούς παρακάτω.

$$F(\rho, T, P) = \text{root}(p(\rho, T) - P, \rho) \quad 12.4.2.7$$

$$\text{dens}(T, P) = F(100, T, P) \quad 12.4.2.8$$

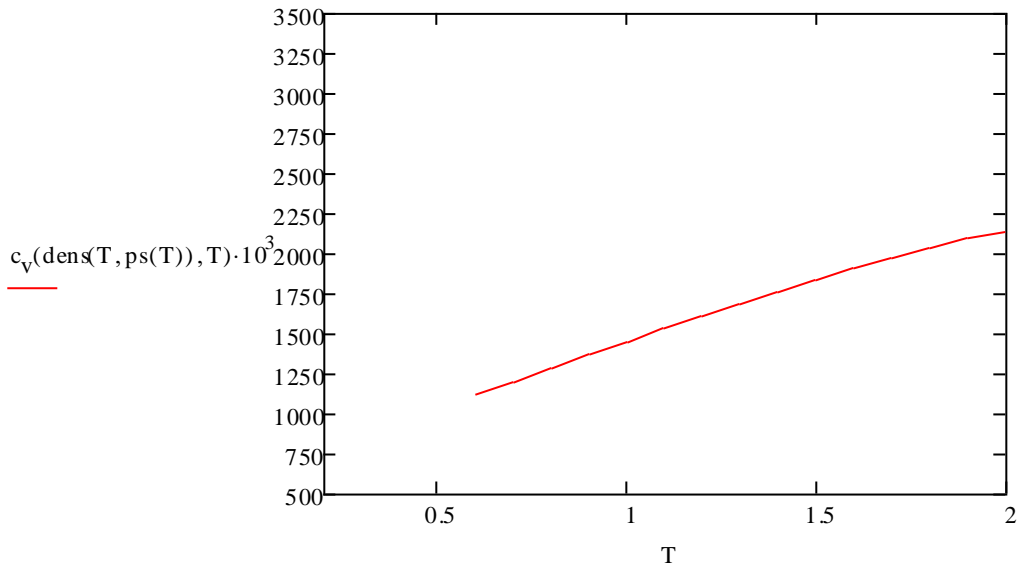
$$v(T, P) = \frac{1}{\text{dens}(T, P)} \quad \text{Ειδικός όγκος} \quad 12.4.2.9$$

$u(\rho, T) = A(\rho, T) - T \cdot \left(\frac{d}{dT} A(\rho, T) \right)$	Εσωτερική ενέργεια	12.4.2.10
$h(\rho, T) = u(\rho, T) + \rho \cdot \left(\frac{d}{d\rho} A(\rho, T) \right)$	Ενθαλπία	12.4.2.11
$s(\rho, T) = -\frac{d}{dT} A(\rho, T)$	Εντροπία	12.4.2.12
$g(\rho, T) = h(\rho, T) - T \cdot s(\rho, T)$	Ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs	12.4.2.13
$c_v(\rho, T) = -T \cdot \left(\frac{d^2}{dT^2} A(\rho, T) \right)$	Ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο	12.4.2.14
$c_p(\rho, T) = c_v(\rho, T) + \frac{T \cdot \left(\frac{d}{dT} p(\rho, T) \right)^2}{\rho^2 \cdot \frac{d}{d\rho} p(\rho, T)}$	Ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεσης	12.4.2.15
$\gamma(\rho, T) := \frac{c_p(\rho, T)}{c_v(\rho, T)}$		12.4.2.16
$W(\rho, T) = \left[\left(2 \cdot \rho \cdot \frac{d}{d\rho} A(\rho, T) + \rho^2 \cdot \frac{d^2}{d\rho^2} A(\rho, T) \right) \cdot \gamma(\rho, T) \right]^{0.5}$	Ταχύτητα του 1ου ήχου	12.4.2.17
$z(\rho, T) := \frac{p(\rho, T)}{\rho \cdot R \cdot T}$	Συντελεστής συμπιεσιμότητας	12.4.2.18

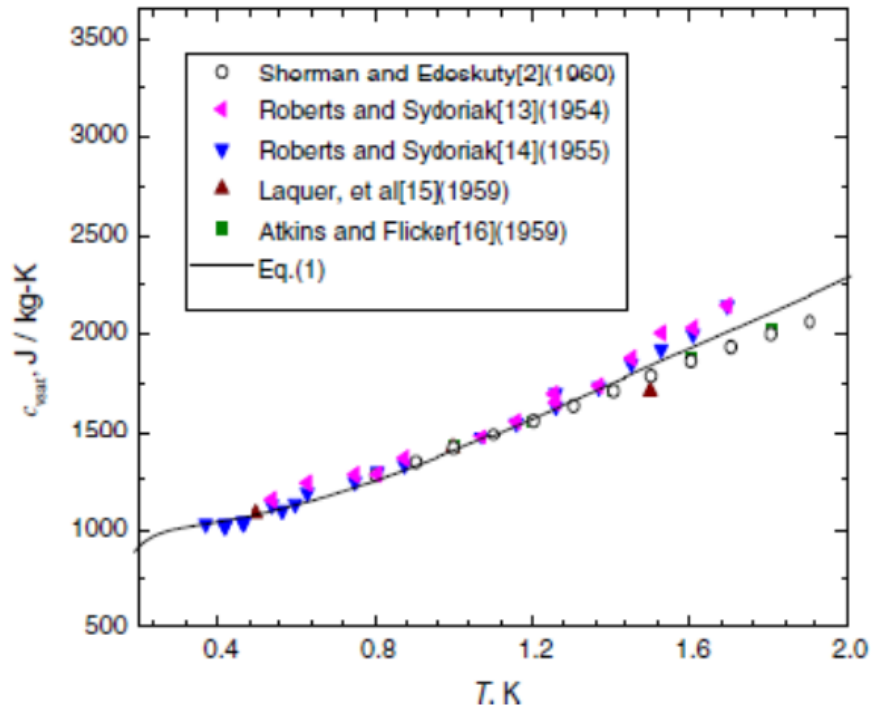
Με τους προαναφερθέντες τύπους, τόσο για το ήλιο 3 όσο και για οποιοδήποτε θερμοδυναμικό μέγεθος, μπορούμε να μεταβούμε απ' το ένα θερμοδυναμικό μέγεθος στο άλλο, εφόσον έχουμε αρκετά σημεία για να προσδιορίσουμε ένα θερμοδυναμικό σημείο, και μία καταστατική εξίσωση ενός μεγέθους συναρτήσει δύο άλλων.

Έχοντας λοιπόν τώρα τις απαραίτητες εξισώσεις για τα μεγέθη καλούμαστε να επιβεβαιώσουμε αν η προαναφερθείσα εξίσωση περιγράφει κατάλληλα το ήλιο 3 στις συνθήκες αυτές, συγκρίνοντας με διαγράμματα των πειραματικών τιμών.

Σύγκριση διαγράμματος ειδικής ισόχωρης θερμοχωρητικότητας με διάγραμμα πειραματικών δεδομένων:



Διάγραμμα 12.4.2.1: Υπολογισμένων τιμών $C_v[J/kgK]-T[K]$



Διάγραμμα 12.4.2.2 - πηγή [6]: Πειραματικών τιμών $C_v[J/kgK]-T[K]$

Βλέπουμε λοιπόν από τη σύγκριση των παραπάνω διαγραμμάτων ότι για αυτό το θερμοδυναμικό μέγεθος έχουμε επαρκή ακρίβεια.

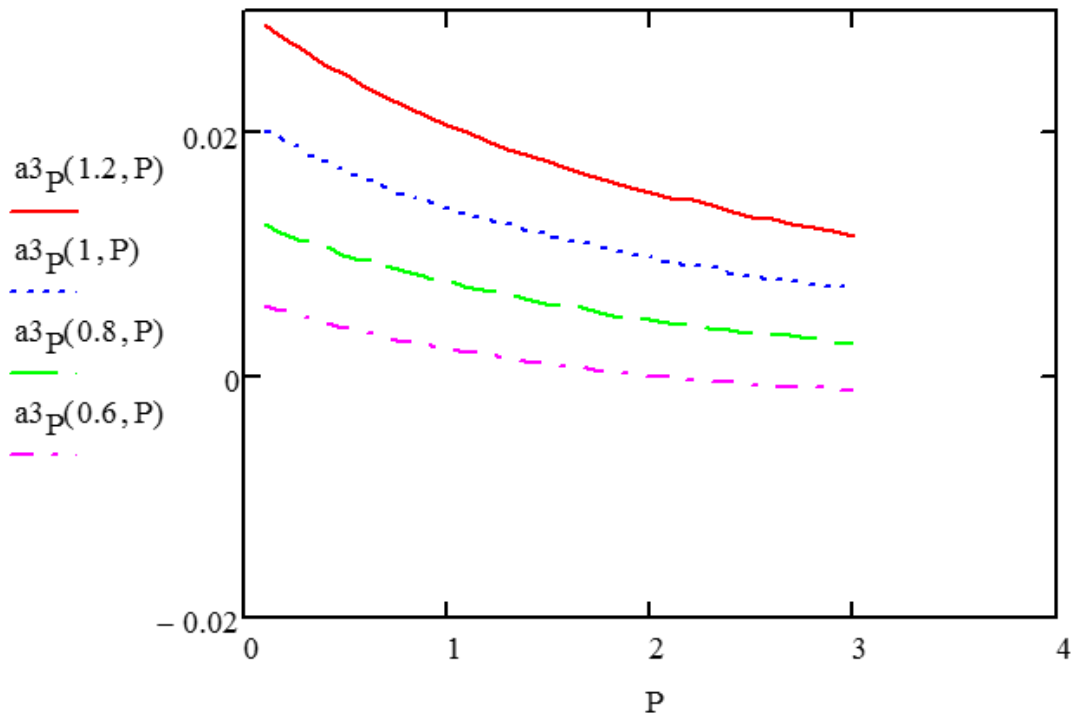
Εν συνεχεία με κατάλληλους και πάλι μετασχηματισμούς θα καταστρώσουμε την εξίσωση και θα φτιάξουμε το διάγραμμα του συντελεστή διαστολής του ηλίου 3.

$$a_p(\rho, T) = \frac{\frac{d}{d\rho} \left(\frac{d}{dT} A(\rho, T) \right)}{2} \cdot \left(\frac{d}{d\rho} A(\rho, T) \right) + \rho \cdot \frac{d^2}{d\rho^2} A(\rho, T) \quad 12.4.2.19$$

$$a_{2p}(T, P) = a_p(\text{dens}(T, P), T) \quad 12.4.2.20$$

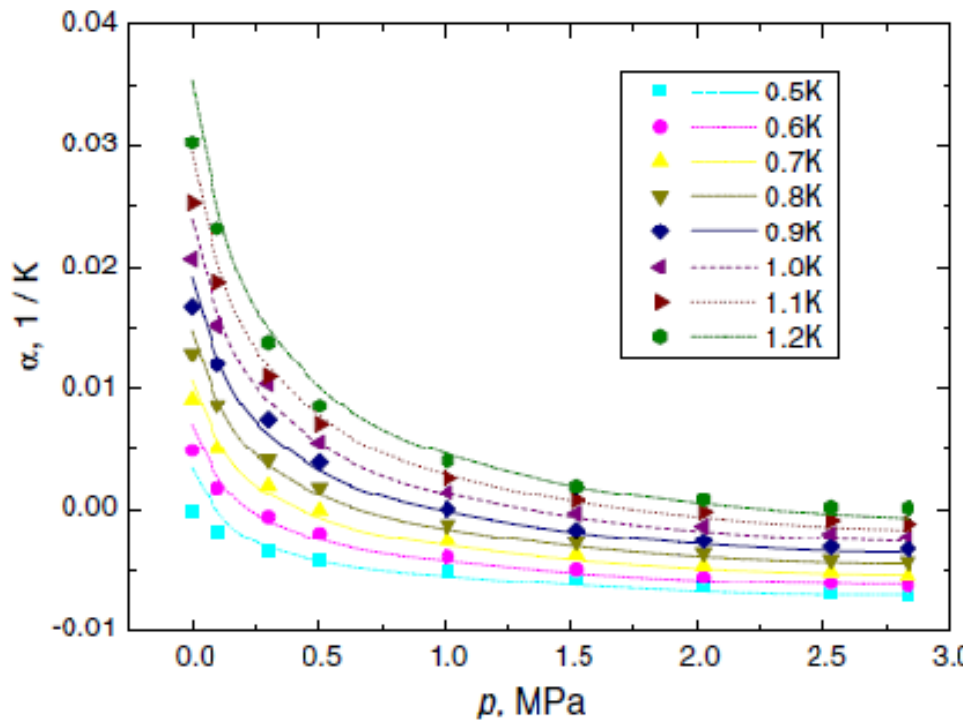
$$a_{3p}(T, P) = \frac{1}{v(T, P)} \cdot \left(\frac{d}{dT} v(T, P) \right) \quad 12.4.2.21$$

Οπότε:



Διάγραμμα 12.4.2.3: Υπολογισμένων τιμών συντελεστή διαστολής [K⁻¹] συναρτήσει πίεσης [MPa]

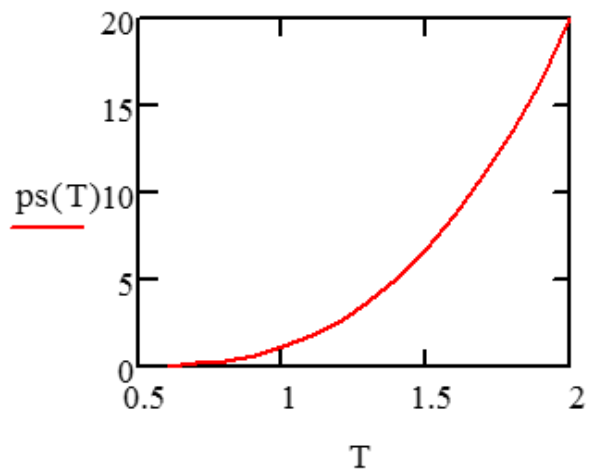
Και το αντίστοιχο πειραματικό διάγραμμα:



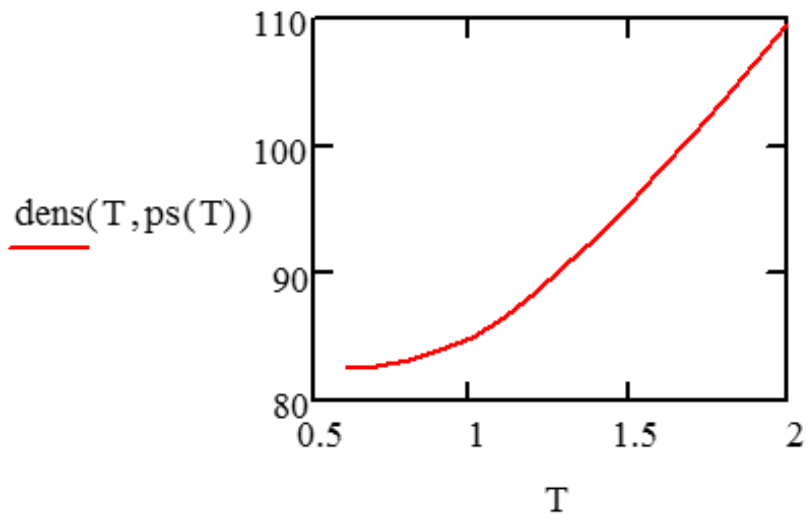
Διάγραμμα 12.4.2.4 - πηγή [6]: υπολογισμένων τιμών συντελεστή διαστολής [K^{-1}] συναρτήσει πίεσης [MPa]

Συγκρίνοντας λοιπόν και αυτό το διάγραμμα καθώς και τις τιμές σε μεμονωμένα θερμοδυναμικά σημεία, βλέπουμε ότι η ακρίβεια της εξίσωσης αυτής είναι πολύ μεγάλη, πράγμα που την καθιστά ικανή να χρησιμοποιηθεί μέσα σε υπολογισμούς.

Για να έχουμε μία καλύτερη εικόνα των μεγεθών παραθέτουμε στη συνέχεια τα διαγράμματα της πυκνότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας, καθώς και της πίεσης κορεσμού συναρτήσει της θερμοκρασίας.



Διάγραμμα 12.4.2.5: τάσης ατμών – θερμοκρασίας



Διάγραμμα 12.4.2.6: πυκνότητας - θερμοκρασίας στην τάση ατμών

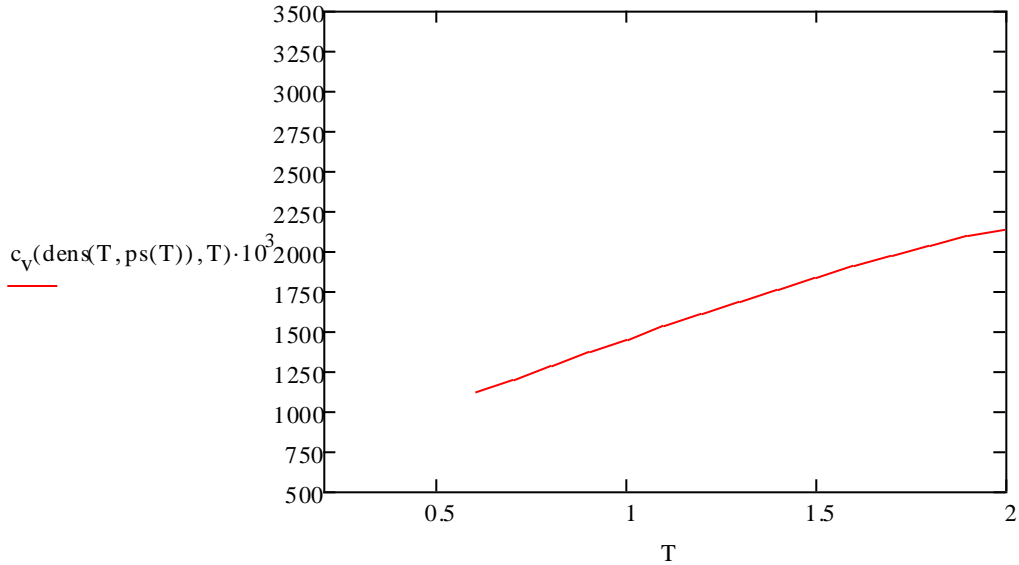
Με βάση τα παραπάνω βλέπουμε ότι έχουμε στη διάθεσή μας μία πολύ καλή περιγραφή για την καταστατική εξίσωση του ήλιου 3, σε όλες της περιοχές που αποτελεί υγρό. Είναι γεγονός, ότι στο ήλιο 3 η μελέτη καθίσταται ευκολότερη σε μεγαλύτερο φάσμα θερμοκρασιών, καθώς όπως προαναφέρθηκε το υπερρευστό αρχίζει να διαφαίνεται με πάρα πολύ χαμηλές

Θερμοκρασίες, πράγμα που σημαίνει ότι δεν έχει επηρεάσει τις καταστατικές εξισώσεις στο σημείο όπου δουλέψαμε.

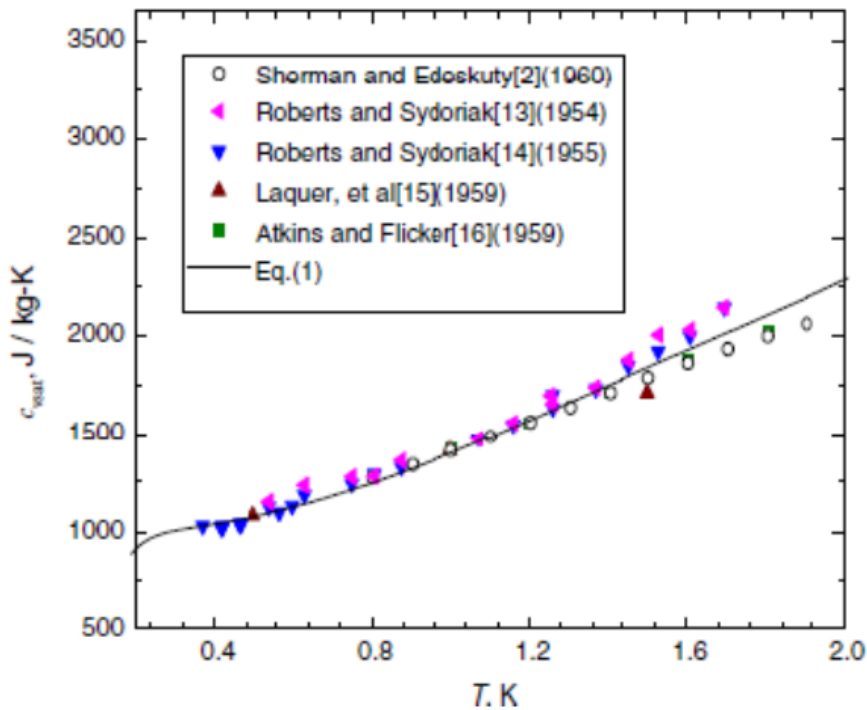
Αρχείο αναλυτικών υπολογισμών: [MathCad references\Helium 3 total.xmcd](#)

12.5 Σύγκριση θεωρητικών και πειραματικών τιμών:

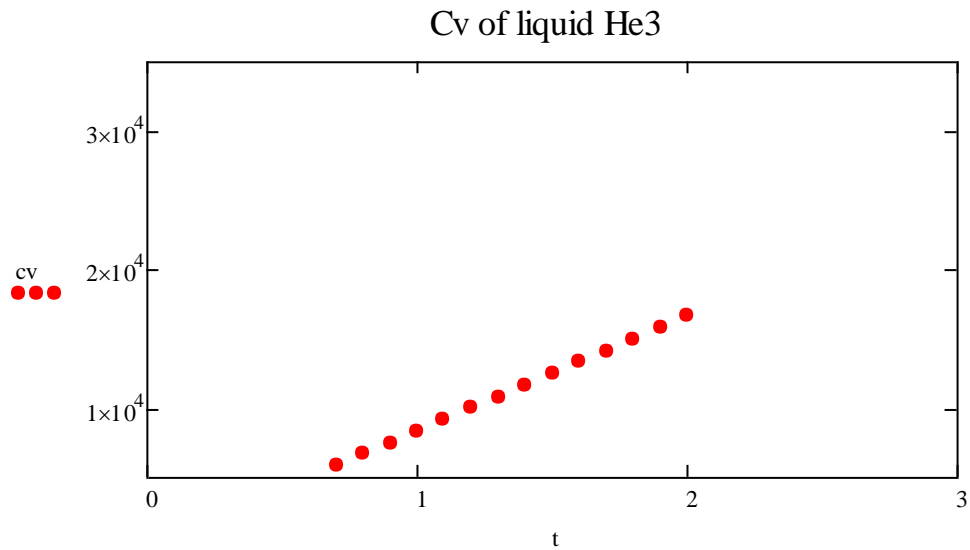
Με τους δύο παραπάνω τρόπους έχουμε ουσιαστικά υπολογίσει θεωρητικά και πειραματικά τις τιμές του C_v για το υγρό He^3 .



Διάγραμμα 12.5.1: : Υπολογισμένων τιμών C_v [J/kgK]- T [K]



Διάγραμμα 12.5.2 – πηγή [6]: Πειραματικών τιμών C_v [J/kgK]- T [K]



Διάγραμμα 12.5.3: C_v – θερμοκρασίας για υγρό Ήλιο 3

Συγκρίνοντας λοιπόν τα τρία παραπάνω διαγράμματα, των πειραματικών σημείων, της δοθείσας συνάρτησης καθώς και της θεωρητικά υπολογισμένης συνάρτησης, μπορούμε να δούμε ότι μας δίνουν πολύ παρόμοιες τιμές, πράγμα που μας δείχνει ότι και η δοθείσα συνάρτηση καθώς και οι θεωρητικοί μας υπολογισμοί είναι ακριβείς και κατάλληλοι για χρήση.

13 Μαθηματικό παράρτημα

Στατιστικές

13.1 Bose - Einstein Distribution Function

Αναλυτικός υπολογισμός της συνάρτησης κατανομής κατά Bose-Einstein

Έχουμε 2 συστήματα τα οποία έχουν τις ίδιες ενεργειακές τιμές αλλά ο αριθμός των σωματιδίων που τα απαρτίζουν διαφέρει κατά $n \ll N$ όπου N ο αριθμός των σωματιδίων του ενός συστήματος

$$N' = N - n \quad 13.1.1$$

$$U' = U - n \cdot \varepsilon_r \quad 13.1.2$$

Καθώς και

$$dU = \sum_j (\varepsilon_j \cdot dN_{\alpha_j}) + \sum_j (N_{\alpha_j} \cdot d\varepsilon_j) \quad 13.1.3$$

Για να ικανοποιούνται οι παραπάνω σχέσεις πρέπει οι occupation numbers και των δύο συστημάτων να είναι κοινοί σ όλες τις στάθμες με εξαίρεση μία αυθαίρετη στάθμη r στην οποία θεωρούμε ότι εντοπίζεται η διαφορά των αριθμών πλήρωσης.

Θεωρούμε ότι το n , δηλαδή ο αριθμός των σωματιδίων που αφαιρούμε από το σύστημα παίρνει τη μικρότερη τιμή οπότε έστω $n=1$. Θεωρούμε εν συνεχεία ότι το ένα τελικά σωματίδιο αφαιρείται από τη στάθμη r . Άρα τα στατιστικά βάρη των δύο συστημάτων μας τελικά θα είναι της μορφής:

$$N'_{rk} = N_{rk} - 1 \quad 13.1.4$$

όπου k η μακροκατάσταση του συστήματος

Αρχικό σύστημα

$$W_k = \prod_j \frac{(g_j + Nk_j - 1)!}{(g_j - 1)! Nk_j!} \quad 13.1.5$$

Νέο σύστημα

$$W'_{rk} = \prod_j \frac{(g_j + N'k_j - 1)!}{(g_j - 1)! N'k_j} \quad 13.1.6$$

$$\frac{(g_r - 2)!}{(g_r - 1)!} \text{ expand} \rightarrow \frac{1}{g_r - 1} \quad 13.1.7$$

Πολλαπλασιάζοντας κατόπιν με το $(-1)!$ Έχουμε:

$$\frac{(g_r - 2)!}{(g_r - 1)! (-1)!} = \frac{1}{g_r - 1} \cdot \frac{1}{(-1)!} \quad 13.1.8$$

άρα τελικά το ηλίκο το στατιστικών βαρών W_k και W'_{rk} των δύο συστημάτων αντίστοιχα είναι:

$$\frac{\frac{\Gamma[(g_j + Nk_j - 1) + 1]}{\Gamma[(g_j - 1) + 1] \cdot \Gamma(Nk_j + 1)}}{\frac{\Gamma[(g_j + N'k_j - 1) + 1]}{\Gamma[(g_j - 1) + 1] \cdot \Gamma(N'k_j + 1)}} \text{ expand} \rightarrow \frac{Nk_j \cdot \Gamma(N'k_j + g_j) \cdot \Gamma(Nk_j)}{N'k_j \cdot \Gamma(Nk_j + g_j) \cdot \Gamma(N'k_j)} \quad 13.1.9$$

*εκφράζουμε τα παραγοντικά ως συναρτήσεις Γ κατά Euler ώστε να μπορέσει το λογισμικό να εκτελέσει τις πράξεις.

$$\frac{\Gamma(n + 1)}{n} \text{ expand} \rightarrow \Gamma(n) \quad 13.1.10$$

άρα τελικά έχουμε

$$\frac{W'_{rk}}{W_k} = \prod_j \frac{Nk_j \cdot \Gamma(N'k_j + g_j) \cdot \Gamma(Nk_j)}{N'k_j \cdot \Gamma(Nk_j + g_j) \cdot \Gamma(N'k_j)} = \prod_j \left[\frac{(g_j + N'k_j - 1)! \cdot Nk_j!}{(g_j + Nk_j - 1)! \cdot N'k_j!} \right] \quad 13.1.11$$

όμως για $j \neq r$

$$N'k_j = Nk_j$$

Και για $j=i$

$$Nk_r = N'k_r + 1$$

Άρα

$$Nk_r! = Nk_r(Nk_r - 1)! = Nk_r \cdot N'k_r! \quad 13.1.12$$

Και

$$(g_r + Nk_r - 1)! = (g_r + N'k_r) \cdot (g_r + N'k_r - 1)! \quad 13.1.13$$

$$\frac{W'_{rk}}{W_k} = \frac{Nk_r \cdot \Gamma(N'k_r + g_r) \cdot \Gamma(Nk_r)}{N'k_r \cdot \Gamma(Nk_r + g_r) \cdot \Gamma(N'k_r)} \rightarrow \frac{Nk_r \cdot \Gamma(N'k_r + g_r) \cdot \Gamma(Nk_r)}{N'k_r \cdot \Gamma(Nk_r + g_r) \cdot \Gamma(N'k_r)} \quad 13.1.14$$

Άρα

$$\frac{W'_{rk}}{W_k} = \frac{Nk}{N'k_r + g_r} \quad 13.1.15$$

αθροίζοντας λοιπόν για τις διάφορες μακροκαταστάσεις k τον παραπάνω λόγο των θερμοδυναμικών πιθανοτήτων έχουμε:

$$\sum_k (Nk_r \cdot W_k) = \sum_k (g_r \cdot W_k) + \sum_k (N'k_r \cdot W'_{rk}) \quad 13.1.16$$

Άρα

$$Na\psi \cdot \Omega = (g_r + Na\psi) \cdot \Omega'_r \quad 13.1.17$$

$$\ln\left(\frac{Na\psi}{g_r + Na\psi}\right) = \ln\left(\frac{\Omega'_r}{\Omega}\right) \quad 13.1.18$$

Όμως γνωρίζουμε ότι

$$S = k_B \cdot \ln(\Omega) \quad 13.1.19$$

$$\Omega = e^{\frac{S}{k_B}} \quad \Omega'_r = e^{\frac{S'}{k_B}} \quad 13.1.20$$

$$\ln\left(\frac{\Omega'_r}{\Omega}\right) \rightarrow \ln\left(e^{-\frac{S}{k_B}} \cdot e^{\frac{S'}{k_B}}\right) \quad 13.1.21$$

$$\ln\left(e^{-\frac{S}{k_B}} \cdot e^{\frac{S'}{k_B}}\right) \text{ simplify } \rightarrow \ln\left(e^{-\frac{S-S'}{k_B}}\right) \quad 13.1.22$$

$$\ln\left(\frac{Na\psi}{g_r + Na\psi}\right) = \frac{S' - S}{k_B} = \frac{\Delta S}{k_B} \quad 13.1.23$$

με βάση λοιπόν τον 2ο θερμοδυναμικό νόμο και θεωρώντας :

$$\Delta U = -\varepsilon_r \quad \Delta N = -1$$

Οπότε

$$\Delta S = \frac{\mu - \varepsilon_r}{T} \quad 13.1.24$$

Διότι

$$\Delta S = \frac{\Delta U - \mu \Delta N}{T} \quad 13.1.25$$

Άρα

$$\Delta S \rightarrow -\frac{\mu \Delta N + \varepsilon_r}{T} \quad \frac{\Delta S}{k_B} \rightarrow -\frac{\mu \Delta N + \varepsilon_r}{T \cdot k_B} \quad 13.1.26$$

Γενικεύοντας λοιπόν τη σχέση για κάθε r έχουμε:

$$\ln\left(\frac{N a_j}{g_j + N a_j}\right) = \frac{\mu - \varepsilon_j}{T \cdot k_B} \quad 13.1.27$$

άρα η τελική σχέση που μας προκύπτει και συνδέει τον μέσο αριθμό πλήρωσης ανά ενεργειακή στάθμη συναρτήσει της ενέργειας, του χημικού δυναμικού και της θερμοκρασίας είναι:

$$\frac{N a_j}{g_j} = \frac{1}{e^{\left(\frac{\varepsilon_j - \mu}{k_B \cdot T}\right)} - 1} \quad 13.1.28$$

Αναλυτικό αρχείο: [MathCad references\B_E my version.xmcd](#)

13.2 Fermi – Dirac Distribution Function

Ορίζουμε και πάλι δύο συστήματα N και N' με:

$$N' = N - 1 \quad 13.2.1$$

Οι μακροκαταστάσεις των δύο συστημάτων είναι κοινές για όλες τις ενεργειακές στάθμες εκτός από μία αυθαίρετη ενεργειακή στάθμη r στην οποία:

$$\begin{aligned} N'k_r &= Nk_r - 1 && \text{Για } j=r \\ Nk_j &= N'k_j && \text{Για } j \neq r \end{aligned}$$

άρα οι θερμοδυναμικές πιθανότητες των δύο συστημάτων αντίστοιχα, με βάση την κατανομή των στατιστικών βαρών κατά Fermi-Dirac, θα είναι :

$$W_k = \prod_j \frac{g_j!}{(g_j - Nk_j)! \cdot Nk_j!} \quad 13.2.2$$

$$W'_{kr} = \prod_j \frac{g_j!}{(g_j - N'k_j)! \cdot N'k_j!} \quad 13.2.3$$

εκφράζουμε και πάλι τα παραγωγικά ως συναρτήσεις Γ κατά Euler για την διευκόλυνση των πράξεων

$$\frac{\frac{\Gamma[(g_j+1)]}{\Gamma[(g_j-N'k_j+1)] \cdot \Gamma(N'k_j+1)}}{\frac{\Gamma[(g_j+1)]}{\Gamma[(g_j-Nk_j+1)] \cdot \Gamma(Nk_j+1)}} \text{ expand } \rightarrow \frac{Nk_j^2 \cdot \Gamma(Nk_j) \cdot \Gamma(g_j - Nk_j) - Nk_j \cdot g_j \cdot \Gamma(Nk_j) \cdot \Gamma(g_j - Nk_j)}{N'k_j^2 \cdot \Gamma(N'k_j) \cdot \Gamma(g_j - N'k_j) - N'k_j \cdot g_j \cdot \Gamma(N'k_j) \cdot \Gamma(g_j - N'k_j)} \quad 13.2.4$$

$$\frac{W'_{kr}}{W_k} = \prod_j \frac{Nk_j \cdot \Gamma(Nk_j) \cdot \Gamma(g_j - Nk_j) \cdot (Nk_j - g_j)}{N'k_j \cdot \Gamma(N'k_j) \cdot \Gamma(g_j - N'k_j) \cdot (N'k_j - g_j)} = \prod_j \frac{\Gamma(Nk_j + 1) \cdot \Gamma(g_j - Nk_j + 1)}{\Gamma(N'k_j + 1) \cdot \Gamma(g_j - N'k_j + 1)} = \prod_j \frac{Nk_j! \cdot (g_j - Nk_j)!}{N'k_j! \cdot (g_j - N'k_j)!} \quad 13.2.5$$

για κάθε j εκτός από j=r οι όροι απλοποιούνται οπότε το παραπάνω κλάσμα προκύπτει ως:

$$\frac{W'_{kr}}{W_k} = \frac{Nk_r}{g_r - N'k_r} \quad 13.2.6$$

αθροίζοντας τώρα για τις διάφορες μακροκαταστάσεις έχουμε:

$$\sum_k (Nk_r \cdot W_k) = \sum_k (g_r \cdot W_k) - \sum_k (N'k_r \cdot W_{rk}) \quad 13.2.7$$

$$Na\psi \cdot \Omega = (g_r - Na\psi) \cdot \Omega'_r \quad 13.2.8$$

όμως γνωρίζουμε ότι :

$$S = k_B \cdot \ln(\Omega) \quad 13.2.9$$

$$\Omega = e^{\frac{S}{k_B}} \quad \Omega'_r = e^{\frac{S'}{k_B}} \quad 13.2.10$$

$$\ln\left(\frac{\Omega'_r}{\Omega}\right) \rightarrow \ln\left(e^{-\frac{S}{k_B}} \cdot e^{\frac{S'}{k_B}}\right) \quad 13.2.11$$

$$\ln\left(\frac{Na\psi}{g_r - Na\psi}\right) = \frac{S' - S}{k_B} = \frac{\Delta S}{k_B} \quad 13.2.12$$

$$T \cdot \Delta S = \Delta U - \mu \cdot \Delta N \quad 13.2.13$$

Όπου

$$\Delta U = -\varepsilon_r \quad \Delta N = -1$$

Οπότε

$$\Delta S = \frac{\mu - \varepsilon_r}{T} \quad 13.2.14$$

Διότι

$$\Delta S = \frac{\Delta U - \mu \Delta N}{T} \quad 13.2.15$$

$$\Delta S \rightarrow -\frac{\mu \Delta N + \varepsilon_r}{T} \quad 13.2.16$$

αδιαστατοποιώντας οπότε για κάθε r προκύπτει:

$$\ln \left(\frac{N a_j}{g_j - N a_j} \right) = \frac{\mu - \varepsilon_j}{T \cdot k_B} \quad 13.2.17$$

άρα η τελική σχέση για την κατανομή Fermi-Dirac που προκύπτει είναι:

$$\frac{N a_j}{g_j} = \frac{1}{e^{\left(\frac{\varepsilon_j - \mu}{k_B \cdot T} \right)} + 1} \quad 13.2.18$$

Αναλυτικοί υπολογισμοί: [MathCad references\F_D.xmcd](#)

14 Βιβλιογραφία

- [1] The Calculated Thermodynamic Properties of Superfluid Helium 4 [Text references\Calculated therm Properties of Superfluid He4 NIST - Donelly & Brooks 1977.pdf](#)
- Thermophysical properties of Helium-4 from 2 to 1500K with pressures to 1000 Atmospheres – McCarty 1972 [Text references\McCarty He4 Techn Note 1972.pdf](#)
- Thermodynamic Properties of Helium II from 0 K to the Lambda Transitions [Text references\McCarty1980.pdf](#)
- [4] Thermophysical Properties of Helium-4 from 0.8 to 1500 K with pressures to 2000 MPa [Text references\McCarty1998.pdf](#)
- [2] The Observed Properties of Liquid Helium at Saturated Vapor Pressure [Text references\Observed Properties of Liquid He4 at saturated vapor pressure NIST - Donelly & Barebghi 1998.pdf](#)
- [3] A New Wide Range Equation of State for Helium [Text references\McCarty 1990 Adv Cryog Democritus.pdf](#)
- Thermodynamic Properties of Helium 4 from 2 to 1500 K at pressures up to 10^5 Pa [Text references\Therm Properties of He4 NIST 2-1500K - McCarty 1973.pdf](#)
- State equation of liquid helium 4 from 0.8 to 2.5 K [Text references\State equation of liquid helium-4 from 0.8 to 2.5 K Arp.pdf](#)
- [5] Equation of State for Normal Liquid Helium 3 from 0.1 to 3.3157 K [Text references\arp huang he3.pdf](#)
- [6] A practical vapor pressure equation for helium 3 from 0.01 K to critical point [Text references\Huang A practical vapor pressure equation for helium-3.pdf](#)
- Helium Cryogenics – Steven W. Van Sciver [Text references\Helium Cryogenics Van Sciver.pdf](#)
- Low Temperature Physics – Cristian Enss, Siegfried Hunklinger [Text references\Low Temp Physics.pdf](#)
- Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics – Sears. Salinger
- Molecular Quantum Mechanics, Fourth Edition – Atkins [Text references\Molecular Quantum Mechanics, Fourth Edition - Atkins.pdf](#)
- Exploring Quantum Mechanics – Victor Galitski
- Εφαρμοσμένη Θερμοδυναμική William Z. Black, James G. Hartley
- Κβαντομηχανική Ι – Στέφανος Τραχανάς
- Μαθηματική Ανάλυση ΙΙ – Θεμιστοκλής Μ. Ρασσιάς
- Θέματα Εφαρμοσμένων Μαθηματικών – Δ.Χ. Κραββαρίτης

