

Jovan B. Radunović

**STATISTIČKA FIZIKA
SA KINETIČKOM TEORIJOM**
u fizičkoj elektronici

AKADEMSKA MISAO
Univerzitet u Beogradu, Elektrotehnički fakultet
Beograd, 2013

Prof. dr Jovan B. Radunović
Elektrotehnički fakultet Univerziteta u Beogradu, Srbija

STATISTIČKA FIZIKA
SA KINETIČKOM TEORIJOM
u fizičkoj elektronici

Recenzenti

dr Dejan Gvozdić

Profesor Elektrotehničkog fakulteta Univerziteta u Beogradu

dr Petar Matavulj

Profesor Elektrotehničkog fakulteta Univerziteta u Beogradu

dr Milan Tadić

Profesor Elektrotehničkog fakulteta Univerziteta u Beogradu

Izdaje i štampa

AKADEMSKA MISAO, Beograd, Srbija

Tiraž

150 primeraka

ISBN 86-7466-460-5

NAPOMENA: Fotokopiranje ili umnožavanje na bilo koji način ili ponovno objavljivanje ove knjige u celini ili u delovima - nije dozvoljeno bez saglasnosti i pismenog odobrenja izdavača.

SADRŽAJ

UVOD	1
-------------	----------

Glava 1. KLASIČNA STATISTIČKA FIZIKA	4
---------------------------------------------	----------

1. MIKROSKOPSKI MODEL OPISIVANJA STANJA	
KLASIČNIH SISTEMA	4
1.1. PREDMET I METOD STATISTIČKE FIZIKE	4
1.2. STANJE ČESTICE	5
1.2.1. Potencijalna energije interakcije između čestica	6
1.3. MIKRO STANJE SISTEMA	7
1.4. FAZNI PROSTORI	8
1.4.1. μ -fazni prostor	8
1.4.2. Γ -fazni prostor	9
1.5. MAKRO STANJE SISTEMA	10
1.6. SREDNJE VREDNOSTI FIZIČKIH VELIČINA	11
1.7. LIOUVILLEOVA JEDNAČINA	14
1.7.1. Liouvilleova teorema	16
1.8. FUNKCIJA RASPODELE FIZIČKIH VELIČINA SISTEMA	17
1.9. JEDNAČINA KLIMONTOVIČA	18
2. RAVNOTEŽNA STATISTIČKA FIZIKA	20
2.1. STANJE STATISTIČKE RAVNOTEŽE	20
2.2. IZOLOVANI SISTEMI	21
2.3. SISTEMI U TERMOSTATU	22
2.4. FUNKCIJE STANJA SISTEMA	26
2.5. ENTROPIJA SISTEMA	28
2.6. BOLTZMANNOVA H TEOREMA	30
2.6.1. Izvođenje H teoreme	33

2.7. PRIKAZ POMOĆU JEDNOČESTIČNE	
FUNKCIJE RASPODELE	36
3. PRIMENA STATISTIČKE FIZIKE	
U ODREĐIVANJU STANJA GASOVA	38
3.1. PARAMETAR RETKOG GASA	38
3.2. IDEALAN GAS U RAVNOTEŽI	39
3.2.1. Pritisak i entropija idealnog gasa	40
3.2.2. Maxwell-Boltzmannova raspodela	42
3.2.3. Maxwellova funkcija raspodele	44
3.2.4. Maxwellova raspodela po jednoj komponenti impulsa	46
3.2.5. Maxwellova raspodela po intenzitetu brzina	48
3.2.6. Boltzmannova funkcija raspodele	49
3.3. REALAN GAS U RAVNOTEŽI	51
3.3.1. Pritisak realnog gasa	51
3.3.2. Raspodela čestica realnog gasa u prostoru, kada nema spoljašnjeg polja	58
3.4. PLAZMA – COULOMBOV GAS	60
3.4.1. Veličine stanja za Coulombov gas	65
Glava 2. KVANTNA STATISTIČKA FIZIKA	68
<hr/>	
1. MIKROSKOPSKI MODEL OPISIVANJA STANJA	
KVANTNIH SISTEMA	68
1.1. KVANTNO MEHANIČKI MODEL	68
1.2. STANJA NEZAVISNA OD VREMENA	70
1.2.1. Čestica u potencijalnoj jami	71
1.3. MIKROSTANJE KVANTNIH SISTEMA	72
1.4. KVANTNI PROSTORI	74
2. KVANTNI SISTEMI U RAVNOTEŽI	76
2.1. ANALIZA STANJA SISTEMA PRIMENOM n-PROSTORA	76

2.2. ANALIZA STANJA SISTEMA PRIMENOM k –PROSTORA	79
2.2.1. Fermi-Diracova funkcija raspodele	81
2.2.2. Bose-Einsteinova funkcija raspodele	82
2.2.3. Poređenje kvantnih raspodela	83
2.3. KVAZI KVANTNA BOLTZMANNOVA STATISTIKA ZA ATOMSKI GAS	84
3. PRIMENA KVANTNE STATISTIČKE FIZIKE	88
3.1. FOTONSKI GAS; ZRAČENJE APSOLUTNO CRNOG TELA	88
3.2. ELEKTRONSKI GAS U METALU	92
3.3. SPOJ METAL OKSID METAL I METAL OKSID POLUPROVODNIK	95
3.4. ELEKTRONI I ŠUPLJINE U POLUPROVODNIKU	97

Glava 3. NERAVNOTEŽNA STATISTIČKA FIZIKA **101**

1. BBGKY LANAC	103
1.1. RENORMIRANE ČESTIČNE FUNKCIJE RASPODELE	103
1.2. IZVOĐENJE LANCA BBGKY	104
1.3. KORELACIONE FUNKCIJE	109
2. KINETIČKA TEORIJA	111
2.1. PARAMETRI KINETIČKE TEORIJE	113
2.2. KINETIČKA JEDNAČINA	114
2.3. ENTROPIJA U FUNKCIJI OD JEDNOČESTIČNE FUNKCIJE RASPODELE	116
2.4. JEDNAČINA VLASOVA	117
2.5. APROKSIMACIJA BINARNIH SUDARA	119
2.6. INTEGRAL SUDARA U FORMI BOGOLJUBOVA	122
2.7. INTEGRAL SUDARA U FORMI BOLTZMANNA	125
2.8. OSOBINE INTEGRALA SUDARA	129
2.9. OPŠTI IZRAZ ZA INTEGRAL SUDARA	132

Glava 4. STATISTIČKI OSNOV DRIFT-DIFUZIONOG MODELA 144

1. IZVOĐENJE DRIFT-DIFUZIONOG MODELA	145
1.1. KINETIČKA JEDNAČINA U APROKSIMACIJI VREMENA RELAKSACIJE I DIFUZIONOJ APROKSIMACIJI	145
1.2. VEZA IZMEĐU KINETIČKIH I DRIFT-DIFUZIONIH FIZIČKIH VELIČINA	146
1.3. IZVOĐENJE JEDNAČINE KONTINUITETA	147
1.4. IZVOĐENJE DIFUZONE JEDNAČINE	148
2. DRIFT-DIFUZIONI MODEL I PRIMENA	151
ZAKLJUČAK	154
LITERATURA	155

PREDGOVOR

Zanimanje naučnika i istraživača uvek je bilo okrenuto rešavanju uglavnom dva problema. Prvi predstavlja većitu težnju da se realizuju novi neiscrpní izvori energije. Drugi je danas mnogo atraktivniji, jer se nalazimo u informatičkoj eri, a predstavlja želju za posedovanjem i vladanjem što većim brojem informacija. Zbog toga je i interesovanje mladih istraživača okrenuto ka rešenju problema termonuklearne i laserske fuzije; problemima razvoja super brzih i moćnih računara; problemu razvoja uređaja modernih komunikacionih sistema (mobilne i satelitske komunikacije); optoelektronskih i laserskih sistema (optičke komunikacije, optički računari).

Zašto ja onda pišem ovu knjigu iz statističke fizike?

Primena statističke fizike početkom 20-tog veka dala je osnove sledećim atraktivnim disciplinama: nuklearnoj fizici, fizici plazme, fizičkoj elektronici i fizici lasera. Funkcionisanje uređaja odnosno komponenti u sistemima informacionih tehnologija, kao i vladanje novim neklasičnim izvorima energije zahteva rešenje sledeća dva problema. Prvi je problem kvantne prirode materije a drugi je problem mnoštva. Primena modela koji koriste zakone klasične fizike i jednočestični prilaz, koji su do tada bili uspešno korišćeni u drugim oblastima fizike i tehnike (akustici, termodinamici, elektromagnetici,...) ovde nisu dali nikakav rezultat. Nažalost, kvantna priroda materije i problem mnoštva ne daju mogućnost određivanja traženih fizičkih veličina na taj način. Zbog toga je neophodno primeniti pojam verovatnoće za pojavu željenog stanja tih veličina. Naravno, potvrda valjanosti ove nove teorije nije moguća na ovom mikroskopskom nivou. Tek nakon konkretne realizacije modelovane komponente sistema, moguća je njena verifikacija. Upravo konkretna primena novih brzih mikroprocesora, poluprovodničkih lasera i fotodetektora, modelovanih primenom kvantne mehanike i kinetičke teorije, predstavljaju potvrdu valjanosti ovih teorija.

Dosadašnji modeli koji su opisivali sisteme sa mnoštvom čestica poznati su pod nazivom hidrodinamički modeli. Stanje sistema opisivano je merljivim fizičkim veličinama. Zakoni koji ih povezuju su empirijski, napisani intuitivno i eksperimentalno potvrđeni. Problem je u tome što ovi modeli nisu u stanju da prepoznaju čestičnu strukturu i fizičku prirodu mikro sveta. Upravo zbog toga

oni nisu u mogućnosti da opišu procese koji se dešavaju u savremenim tehničkim disciplinama.

Cilj statističke fizike je da omogući opisivanje ponašanja makroskopskih (merljivih) fizičkih veličina kod sistema koji se sastoje od jako velikog broja čestica. Pod česticama se podrazumevaju elementarni delovi sistema, odnosno to mogu biti: atomi, molekuli, joni, elektroni, šupljine, fotoni, fononi, neutroni... Pojam jako veliki broj podrazumeva red veličine Avogadrovog broja. Zadatak statističke fizike je definisanje statističkih zakona odnosno zakona koji upravljaju procesima u tako složenim sistemima. Statistička fizika predstavlja spoj kojim se procesi u makrosvetu mogu opisati pomoću procesa u mikrosvetu.

Ponašanje čestica u mikro svetu može se opisati modelom klasične ili kvantne fizike, te se u skladu sa tim može prepoznati klasična i kvantna statistička fizika. Proces koji se dešavaju u sistemu mogu u trivijalnom slučaju da budu takvi da se fizički merljive veličine, koje karakterišu stanje sistema, praktično ne menjaju u vremenu. To je takozvano stanje ravnoteže sistema. Naravno ovo stanje je izuzetno retko u prirodi. Sa stanovišta primene potrebno je posmatrati stanja koja su u neravnoteži. To su stanja kod kojih se spoljašnjim uticajem na sistem postiže da procesi u sistemu omogućuju konkretne rezultate bitne za njihovu primenu u raznim tehnološkim oblastima. U termodinamičkim i hidrodinamičkim sistemima to su procesi kada se može izvršiti mehanički rad ili prenos toplote onako kako to tehnološki proces zahteva, ili ostvariti kretanje nosilaca naelektrisanja između pojedinih čvorišta onako kako se želi, čime bi se obezbedilo pojačanje električnog signala odnosno njegova željena obrada. Takođe, to može da bude generisanje laserskog snopa i njegovo upravljanje, kako sa stanovišta prenosa i obrade u fotonskim komunikacijama, ili kod snažnih lasera njihova primena u drugim oblastima. Ta stanja mogu biti i kontrolisana ali i nekontrolisana fisija i fuzija.

Primena statističke fizike obezbeđuje kompletno poznavanje sistema, sa takozvanom najvećom tačnošću jer se sistem prati ponašanjem svih čestica sistema. Nažalost njegova egzaktna primena moguća je samo u stanjima ravnoteže. U neravnotežnim stanjima koristi se kinetički i stohastički model. Kinetički model opisuje stanje sistema primenom teorije verovatnoće, prateći ponašanje jedne čestice, uzimajući u obzir njihovu klasičnu ili kvantnu prirodu i razne tipove mogućih interakcija između njih. Stohastički model prati stanje sistema takođe prateći ponašanje jedne čestice. Lanžvenov metod u procesima determiniranog ponašanja sistema uvodi slučajni izvor čime karakteristične fizičke veličine postaju slučajne. Primenom momentnog metoda izračunava se njihova srednja vrednost i odstupanje. Metod Monte Carlo prati kretanje jedne čestice u sistemu tako što ona u toku svog ponašanja doživljava sve moguće događaje ali koji joj se dešavaju slučajnim odabirom. Za razliku od kinetičkog, kod koga je uticaj svih čestica uzet u obzir, ova dva modela predstavljaju modele koji se simuliraju na mnogo manjem broju čestica od njihovog realnog broja.

Ovaj udžbenik napisan je posle mog višegodišnjeg iskustva u nastavi na Elektrotehničkom fakultetu u Beogradu. Udžbenik ima za cilj da studentima

ukaže i upozna ih sa savremenim metodama koje se koriste u praćenju ponašanja sistema mnoštva.

U uvodnom delu ukazano je na značaj i cilj primene statističke fizike. Izložen je metod N -čestične funkcije raspodele i pokazana primena kod klasičnih sistema u ravnoteži, kako na idealnom tako i na realnom gasu. Takođe analiziran je sistem naelektrisanih čestica u stanju ravnoteže. Za kvantne sisteme prikazana su dva modela, korišćenje verovatnoće za pojavu stanja celog sistema, i verovatnoće za praćenje stanja pojedine čestice. Ukazano je na specifičnost rešenja koja se dobijaju u ovim sistemima. Pokazani su uslovi kada se javlja degeneracija kvantnih sistema, odnosno kada ovi sistemi gube kvantnu prirodu i mogu se prikazati kvazi kvantnom raspodelom. Ovim modelima u ravnoteži analizirani su sistemi: pobuđenog atomskog gasa, fotonskog gasa i gasa elektrona. Primena ovih rezultata pokazana je za slučajeve zračenja crnog tela, metala, metal oksid struktura, i poluprovodnika.

Poseban deo posvećen je problemu rešavanja neravnotežnog stanja. Pokazano je da nije moguće primeniti postupak N -čestične funkcije raspodele, korišćen u slučaju ravnoteže. Izvođenjem lanca BBGKY i njegovim zalamanjem izvedena je kinetička jednačina. Pokazani su i analizirani razni oblici integrala sudara. Za kvantne sisteme data je jednačina prelaza, i njenim korišćenjem pokazan je uslov za pojavu stimulisane emisije i njenu primenu kod lasera.

Oblast primene hidrodinamičkog, odnosno drift-difuzionog modela i kinetičkog modela analizirana je i pokazana u prostorno vremenskom domenu. U želji da se ukaže na statistički osnov drift-difuzionog modela, on je izveden polazeći od kinetičkog modela. Navedene su primene ovog modela za sisteme neutralnih i naelektrisanih čestica, kod poluprovodnika i plazme, kao i kod biomolekularnih ili nuklearnih procesa.

U Zaključku je ukazano na otvorena pitanja u analizi savremenih sistema mnoštva čestica. To je učinjeno zbog čitalaca koji žele da se bave daljim usavršavanjem u ovoj oblasti. Navedena je literatura koja može da ih uvede u ove probleme i da pokaže kako se primenom kinetičkog modela može izvrši modifikacija odnosno proširenje primene drift-difuzionog modela. Ova modifikacija pokazuje da se mogu koristiti već dobro poznate jednačine ali da parametri: pokretljivost, koeficijent difuzije i vreme relaksacije postaju promenljive, koje su sada spregnute sa ovim jednačinama. Takođe interakcija između čestica opisana je samosaglasnim poljem, što znači da sila koja deluje na česticu nije više nezavisno promenljiva već zavisi od stanja svih čestica. To zahteva formiranje novog sistema spregnutih jednačina i njegovo simultano rešavanje. Rezultati koji se dobijaju na ovakav način potvrđeni su u praksi. Upravo oni ukazuju na neophodnost primene statističkog pristupa kod savremenih tehničkih disciplina: nanoelektronike, fotonike, fotonskih komunikacija, biomedicinskog inženjeringa, procesa fisije i fuzije.

Pisanje ove knjige započeto je davno, prekidano dobro poznatim burnim događajima i sada konačno završeno. U tom dugom periodu mnogim prijateljima, drugarima i kolegama dugujem zahvalnost na ukazanoj podršci i nadi da ću ovo pisanje ipak privesti kraju. Posebnu zahvalnost želim da izrazim

svojim nekadašnjim studentima a sada bliskim saradnicima i kolegama prof. dr Dejanu Gvozdiću i prof. dr Petru Matavulju sa kojima sam ovu oblast razvijao, a oni su daljom konkretnom primenom i radom sa novim saradnicima dali originalne doprinose u oblasti optičkih komunikacija i fotonike.

Knjiga je posvećena mojim najmilijima.

UVOD

Opšta fizička teorija sistema koji se sastoje iz velikog broja čestica, naziva se statistička fizika. Oblast njene primene je jako široka: gasovi, tečnosti, plazma, poluprovodnici, metali, elektromagnetno zračenje, razni makroskopski objekti i pojave koji mogu biti predmet izučavanja, a sastoje se od velikog broja elemenata.

U razvoju statističke fizike mogu se uočiti sledeće dve etape. Prva etapa je razvoj ravnotežne statističke teorije - molekularne teorije gasova ravnotežnog stanja. Tada funkcija raspodele, a time i srednje vrednosti makroskopskih (merljivih) fizičkih veličina ne zavise od vremena. Naravno, ovo je slučaj koji nije jako značajan za primenu ali je, kao što će se videti, vrlo koristan za dobijanje rešenja neravnotežnih stanja sistema. Kao prvi značajan rad u oblasti molekularne teorije gasova javlja se rad Clausiusa (1857.). U radu je jasno ukazano da toplota predstavlja kinetičku energiju haotičnog kretanja molekula. Funkciju raspodele molekula gasa po brzinama dao je Maxwell (1859.).

Poseban doprinos u razvoju statističke fizike dali su Boltzmann i Gibbs. Boltzmann izvodi funkciju raspodele molekula gasa u spoljašnjem polju i definiše smisao entropije sa stanovišta određivanja statističkog stanja sistema čestica. Ono što Boltzmann odvajava od drugih naučnika koji se mogu svrstati u osnivače statističke fizike je da je on intuitivno napisao kinetičku jednačinu (kinetička jednačina Boltzmann, 1866. g.), kojom su se mogla opisati neravnotežna stanja gasa. Polazeći od ove jednačine on (1872.) izvodi H (*heat*) teoremu, koja daje statističko objašnjenje drugog zakona termodinamike, saglasno kome u procesu vremenske evolucije zatvorenih sistema entropija ne može da opada. Nažalost značaj i veličina ovih radova u tom trenutku nisu bili priznati od strane njegovih savremenika. Tek posle njegove smrti (1906.) doživeo je priznanje od sledeće generacije naučnika. Schrödinger (1926.) izjavljuje da Boltzmannov način razmišljanja i intuicija ukazuju na svu lepotu bavljenja naukom. Zajedno sa Boltzmannom Gibbs (1902.) se svrstao u osnivače statističke fizike. Njegovim radovima ona dobija fundamentalne osnove čime je omogućeno da se primeni na sve sisteme mnoštva, a ne kao do tada samo na gasove. Na osnovu toga bilo je moguće na najopštiji način spojiti statističku fiziku sa termodinamikom, i time zaokružiti sve što je do tada fenomenološki pristup dao u molekularnoj kinetici.

Teorijom toplotnog zračenja Planck (1900.) postavlja načela kvantne mehanike i uspešno objašnjava svojstva zračenja koja su dobijena

eksperimentom. Oslanjajući se na pojam fotona kao kvantne čestice Bose i Einstein (1924.) daju kvantnu statistiku fotonskog gasa. Fermi i Dirac (1926.) daju drugu kvantnu statistiku kojom se opisuju elektroni.

Druga etapa predstavlja razvoj neravnotežne statističke fizike odnosno kinetičke teorije retkih gasova. Ova etapa započela je kao što je rečeno radovima Boltzmanna u kojima je dao kinetičku jednačinu i izveo H teoremu. Ovom teoremom pokazano je da je proces uspostavljanja ravnotežnog stanja nepovratni proces, za razliku od procesa koji opisuju kretanje pojedinih čestica. Nemogućnost objašnjenja ovog problema bacila je Boltzmanna u pesimizam. Rešenje problema dato je mnogo kasnije (1946.).

Sa pojavom kvantne mehanike, koristeći prost model atoma koji interaguje sa fluktuacijama elektromagnetnog polja, Einstein (1916.) uvodi pojam spontane i stimulisane emisije i dobija za raspodelu pobuđenih atoma Boltzmannovu, a za fluktuacije elektromagnetnog polja Planckovu funkciju raspodele za ravnotežno stanje, a za neravnotežno stanje, jednačinu kinetičkog balansa ili takozvanu Einsteinovu jednačinu.

Kinetičke jednačine Boltzmanna i Einsteina bile su definisane za proste sisteme retkih gasova, a dobijene su ne na osnovu egzaktnog izvođenja već na osnovu niza intuitivnih pretpostavki. Takvo stanje u statističkoj teoriji neravnotežnih procesa ostalo je praktično nepromenjeno više od pedeset godina. Nova etapa u razvoju kinetičke teorije izazvana je razvojem nuklearne fizike, fizike plazme i fizičke elektronike, od kojih su dobijeni značajni praktični rezultati uglavnom u mikroelektronici, optoelektronici i laserskoj tehnici. Osnovni doprinos u ovoj novoj etapi dali su radovi: Bogoljubova, Borna, Greena, Kirkwooda i Yvona, kojima se kao analog Liouvilleovoj jednačini stavlja sistem integrodiferencijalnih jednačina, takozvani lanac BBGKY. Poseban značaj ima rad Bogoljubova (1946.) kojim je pokazan postupak dobijanja kinetičke jednačine iz ovog lanca. Sada je postalo jasno kako to polazeći od jednačina koje opisuju stanje pojedinih čestica, a za koje važi princip inverzije vremena, može da se dobije Boltzmannova jednačina kojom se opisuju nepovratni procesi. Jasni su sada postali i uslovi pri kojima važe do tada poznate kinetičke jednačine: jednačina Boltzmanna za redak gas, jednačina Landaua za sistem naelektrisanih čestica, jednačina Vlasova ili Balescu Lenarda za sistem naelektrisanih čestica i elektromagnetnog polja. Zahvaljujući ovim rezultatima kinetička teorija postaje jedna od osnovnih oblasti statističke fizike.

Početkom šezdesetih godina naglo raste interesovanje za primenu kinetičke teorije u fizici gasova i plazme, a zatim i u fizici čvrstog tela. Klimontovič (1975.) primenom kinetičke teorije fluktuacija daje temelje kinetičkoj teoriji elektromagnetnih procesa, kojom je omogućena analiza uticaja kolektivnih efekata, posebno onih koji traju duže od procesa izazvanih neposrednim procesom sudara. Sistematski prikaz savremene statističke teorije otvorenih sistema daje Klimontovič (1995.). To su oni sistemi koji razmenjuju sa okolnom sredinom materiju, energiju i informaciju. Zahvaljujući tome kod njih se pored procesa degradacije javljaju i procesi samoorganizacije. Kao rezultat

Statistička fizika sa kinetičkom teorijom u fizičkoj elektronici

ovih procesa javljaju se još složenije i još savršenije strukture kao što su turbulentna kretanja, koji se mogu sada opisati kinetičkim modelom.

Poslednjih godina, u oblasti primene kinetičke teorije u mikroelektronici, optoelektronici i laserskoj tehnici kao otvoren problem javlja se želja za modelovanjem komponenti ovih sistema. Problem je vezan sa minijaturizacijom elemenata odnosno velikom gustinom pakovanja u jednom čipu, kao i zahtevom da brzina prenosa i obrade signala bude što veća. U konkretnoj realizaciji komponenti oba ova zahteva traže primenu novih materijala i tehnologija. Rešenje problema može se dobiti primenom kinetičke teorije elektromagnetnih procesa u poluprovodnicima ili korišćenjem stohastičkih metoda odnosno metoda Monte Carlo. Uz pretpostavku da se može usvojiti Maxwelllova raspodela Blotekjaer (1970.) daje hidrodinamički model jednačina za opisivanje transporta nosilaca u ovim modernim poluprovodničkim mikrostrukturama. I dalje ostaje otvoreno pitanje transporta u ovim strukturama kada je neophodan egzaktan (a ne kvazi) kvantni tretman.