

# Gazların termodinamiğinde kuantum ölçek etkileri ve yanal kuvvetler

Coşkun FIRAT\*, Altuğ ŞİŞMAN

İTÜ Enerji Enstitüsü, Enerji Bilim ve Teknoloji Programı, 34469, Ayazağa, İstanbul

## Özet

Nano ölçekte elektronik yapıların yanı sıra mekanik yapıların da üretilebilir hale gelmesiyle birlikte bu ölçekte gazların termodinamik özelliklerinin ne şekilde değiştiği, nasıl modellenebileceği, bu değişimlerden nasıl yararlanılabileceği, olası yeni davranışlara dayalı yeni cihazların/teknolojilerin nasıl geliştirilebileceği gibi sorular da gündeme gelmeye başlamıştır. Nano ölçekte gazların termodinamik özellikleri makro ölçektekinden farklılık gösterir. Bu farklılığın nedenlerden biri olan Kuantum Ölçek Etkileri (KÖE); sistemin karakteristik boyutu ( $L=V/A$ ,  $V$ : hacim,  $A$ : yüzey alanı) yanında, parçacıkların ısl de Broglie dalga boyunun ( $\lambda_T$ ) ihmal edilemediği durumlarda önem kazanır. Böyle bir durumda, parçacıkların enerji değerlerine ilişkin süreklilik yaklaşımı da geçerliliğini yitirir ve kesiklilik, sistemin davranışlarında özellikle nano ölçekte belirgin hale gelen KÖE'nin ortaya çıkmasına yol açar. KÖE, termodinamik hal fonksiyonlarını sistemin geometri (şekil) ve ölçeğine bağımlı hale getirerek makro ölçekte karşılaşılmayan yeni ve ilginç davranışlara yol açar. Bunlar arasında anizotropik gaz basıncı, ölçek ve geometri farkından kaynaklanan gaz difüzyonu, termoelektrik etkilere benzer termoölçek etkilerinin ortaya çıkması ve kütleyle bağımlı büyüklüklerin (extensive quantities) toplanabilirlik (additivity) özelliğinin ortadan kalkması sayılabilir. Bu çalışmada, Weyl varsayımından hareketle keyfi bir ortamda tutuklanmış Maxwell gazların bütünsel termodinamik özellikleri KÖE göz önüne alınarak türetilmiştir. Buradan hareketle makro ölçekte gözlenmeyen bir davranış olarak ideal bir gazda dahi yanal kuvvetler oluşabileceği tespit edilmiştir. Maxwellian bir gazın yerel yoğunluk dağılımı incelendiğinde, ortam sınırları civarında gözlenen bir sınır tabaka nedeniyle yoğunluğun termodinamik denge durumunda dahi homojen olmadığı ve bu sınır tabaka yardımıyla yanal kuvvetlerin de açıklanabileceği anlaşılmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** Kuantum ölçek etkileri, Maxwellian gaz, Weyl varsayımı, kuantum sınır tabakası, yanal kuvvetler.

\*Yazışmaların yapılacağı yazar: Coşkun FIRAT. firat@energy.itu.edu.tr; Tel: (212) 285 38 82.

Bu makale, birinci yazar tarafından İTÜ Enerji Enstitüsü, Enerji, Bilim ve Teknoloji Programı'nda tamamlanmış olan "Gazların termodinamik davranışlarında kuantum ölçek etkileri" adlı doktora tezinden hazırlanmıştır. Makale metni 14.12.2007 tarihinde dergiye ulaşmış, 25.02.2008 tarihinde basım kararı alınmıştır. Makale ile ilgili tartışmalar 31.01.2010 tarihine kadar dergiye gönderilmelidir.

## Quantum size effects on thermodynamics of gases and the lateral forces

### Extended abstract

Today, especially parallel to the progress in semiconductor technology, the developing nanotechnology makes the mechanical systems and structures in micro/nano scale possible. Mechanical structures in micro/nano scale such as gas turbines, pumps, mixers, heat exchangers, valves etc., bring the following topics into consideration: how vary thermodynamic properties of gases, how it can be modeled, how one can make use of these differences, how new devices and technologies can be developed in this scale. In this perspective, the subject of quantum size effects (QSE) on thermodynamics of gases at micro/nano scale is a new research area and it has many potential applications from the technologies of genetic, space and energy to the military ones.

In nano scale, thermodynamic properties (TP) of gases differ from those in macro scales. One of the reasons of this difference is the QSE, which become important when the thermal de Broglie wavelength of particles ( $\lambda_T$ ) is not negligible in comparison with the characteristic length of the system ( $L=V/A$ ,  $V$  volume,  $A$  surface area). In such a case, the continuum approximation for the energy eigenvalues of particles becomes invalid and the discrete nature of energy eigenvalues causes QSE, which are noticeable in nano scale. QSE make the thermodynamic state functions depend on geometry (shape) and size of the system, and QSE causes some new and interesting behaviors, which are not observed in macro scale. Some of them are anisotropic gas pressure, gas diffusion due to size and geometry differences, thermosize effects like thermoelectric effects and the disappearance of the additivity property of extensive quantities.

In literature, the dependence of TP of gases on the shape and size of the confinement domain have recently been examined for the global properties only. These studies consider only rectangular, cylindrical and spherical geometries with a single domain, for which the analytical solution of the Schrödinger equation (SE) is possible, and they are limited with the classical ideal gases obeying Maxwell-Boltzmann statistics.

All TP of a system can be calculated when the partition function (PF) is known. PF consists of a summation over the energy eigenvalues of the stationary SE. For macro systems, it is a very good approximation to replace the summation by integration to calculate the PF. For micro/nano systems, however, it is necessary to use a more precise formula (such as Poisson, Euler-Maclaurin or Abel-Plana formula). The precise calculation of the PF is the key work in determining the QSE on TP of small systems. A complete analytical solution of the stationary SE is possible only for a rectangular domain. Even for spherical and cylindrical domains, some approximations should be made to obtain an analytical expression for the energy eigenvalues. For a domain of an arbitrary shape, it is impossible to solve the SE and find the eigenvalues. Fortunately, Weyl's conjecture gives a precise formula for an asymptotic behavior of the eigenvalue spectrum of the stationary SE. Therefore, it is possible to determine the density of states of eigenvalue spectrum in an asymptotic form for a domain of an arbitrary shape. Consequently, the influence of the confinement geometry on the global TP of an ideal gas can be generalized by using the Weyl's conjecture.

In this study, global TP of an ideal Maxwellian gas confined in a domain of an arbitrary shape are derived by using Weyl's conjecture for the density of states. It is seen that the results obtained by this generalization agree with the results for the domains in which the SE can be solved analytically. It is obtained that as a result of QSE; the global TP of gases confined in nano scale are considerably different than those in macro scale. As an example, an infinitely thin and movable wall which separates a rectangular box filled by an ideal gas into two parts is subjected to a repulsive lateral force due to quantum size effects.

When the local gas density distribution is examined, it is seen that there is a layer near to the boundaries of the domain and the gas density goes to zero within this layer due to non-local interactions of the particles with the boundaries. Lateral forces can be explained by considering this boundary layer.

**Keywords:** Quantum size effects, Maxwellian gas, Weyl's conjecture, quantum boundary layer, lateral forces.

## **Giriş**

Özellikle yarı iletken teknolojisindeki ilerlemelere paralel olarak gelişen nano teknoloji bugün mikro ve nano ölçekte mekanik donanımların ve sistemlerin yapımını da olanaklı hale getirmiştir. Nano ölçekte mekanik yapıların üretilebilir hale gelmesi ve mikro/nano ölçekte türbinler, pompalar, karıştırıcılar, ısı değiştiricileri, valfler vb. donanımların gerçekleştirilmeye başlamasıyla birlikte bu ölçekte gazların termodinamik özelliklerinin ne şekilde değiştiği, nasıl modellenebileceği, bu değişimlerden nasıl yararlanılabileceği, olası yeni davranışlara dayalı yeni cihazların ve teknolojilerin nasıl geliştirilebileceği gibi sorular da gündeme gelmeye başlamıştır. Bu çerçevede gazların termodinamik davranışları üzerinde kuantum ölçek etkilerinin araştırılması da göreceli olarak yeni ve güncel bir konuyu oluşturmaktadır. Bu nedenle mikro/nano ölçekte gazların termodinamiği konusu, yarı iletkenlere göre daha yeni bir çalışma alanını oluşturmakta ve gen teknolojisinden uzay teknolojisine, enerji teknolojilerinden savunma teknolojilerine kadar birçok alanda uygulama potansiyelini barındırmaktadır.

Nano ölçekte gazların termodinamik özellikleri makro ölçektekinden farklılık gösterir. Bu farklılığın nedenlerden biri olan kuantum ölçek etkileri; sistemin karakteristik boyutu ( $L=V/A$ ,  $V$  hacim,  $A$  yüzey alanı) yanında, parçacıkların ısı de Broglie dalga boyunun ( $\lambda_T$ ) ihmal edilemediği durumlarda önem kazanır. Böyle bir durumda, parçacıkların dalga karakteri sistemin davranışlarında özellikle nano ölçekte belirgin hale gelen kuantum ölçek etkilerinin ortaya çıkmasına yol açar. Kuantum ölçek etkileri, termodinamik hal fonksiyonlarını sistemin geometri (şekil) ve ölçeğine bağımlı hale getirerek makro ölçekte karşılaşılmayan yeni ve ilginç davranışlara yol açar. Bunlar arasında anizotropik gaz basıncı, ölçek ve geometri farkından kaynaklanan gaz difüzyonu, termoelektrik etkilere benzer termoölçek etkilerin ortaya çıkması ve kütleyle bağımlı büyüklüklerin (extensive quantities) toplanabilirlik (additivity) özelliğinin ortadan kalkması sayılabilir (Sisman ve Müller, 2004). Literatürde gazların termodinamik özelliklerinin tutuklandıkları ortamın şekil ve ölçeğine olan bağımlılığı sadece bütünsel

özelliklerle sınırlı olarak son yıllarda incelenmeye başlanmıştır (Molina, 1996; Pathria, 1998; Dai ve Xie, 2003; Sisman, 2004; Sisman ve Müller, 2004; Dai ve Xie, 2004; Sisman vd., 2005; Pang vd., 2006).

Bu çalışmada, kuantum ölçek etkileri göz önüne alınarak keyfi şekle sahip bir ortamda tutuklanmış ideal klasik (Maxwellian) gazların bütünsel termodinamik özellikleri hal yoğunluğu için Weyl varsayımı kullanılarak türetilmiştir. Literatürde Schrödinger denkleminin analitik olarak çözülebildiği ortamlar için elde edilebilen sonuçlar ile bu genelleştirme sonucunda elde edilen sonuçların aynı olduğu görülmüştür. Nano ölçekte tutuklanmış gazların bütünsel termodinamik özelliklerinde şekil ve ölçeğin kontrol parametresi haline geldiği gösterilmiştir. Buradan hareketle makro ölçekte gözlenmeyen bir davranış olarak ideal Maxwellian bir gazda dahi yanal kuvvetlerin gözlenebileceği ortaya konulmuştur. Yanal kuvvetlerin nedeni, Maxwellian bir gazın yerel yoğunluk dağılımı incelendiğinde ortam sınırları civarında gözlenen sınır tabaka yardımıyla açıklanmıştır.

## **Keyfi şekilli bir ortamda tutuklanmış Maxwellian bir gazın termodinamik özelliklerinde kuantum ölçek etkileri**

Enerji, basınç, entropi gibi birçok termodinamik özellik termodinamik hal fonksiyonlarından hareketle elde edilebilir. Burada termodinamik hal fonksiyonu olarak serbest enerji seçilmiş olup, sistemin serbest enerjisinin hesaplanması, diğer özelliklerin hesaplanması için yeterlidir. Serbest enerjinin hesaplanabilmesi için de parçacıkların  $\varepsilon_r$  enerji özdeğerlerinin bilinmesi ve bu özdeğerler üzerinden toplam olarak ifade edilen bölüşüm fonksiyonunun hesaplanması gerekmektedir.

Buna göre, termodinamik özelliklerin hesaplanması serbest enerjinin bilinmesine, serbest enerjinin bilinmesi ise parçacıkların enerji özdeğer spektrumunun bilinmesi ve verilen sonsuz toplam ifadesinin hesaplanmasına bağlıdır.

Makro sistemlerde bölüşüm fonksiyonu hesaplanırken toplamlar yerine integral ifadeler yaz-

mak iyi bir yaklaşım sağlarken, mikro/nano sistemlerde toplamlar daha hassas yöntemlerle yapılmalıdır. Küçük sistemlerde termodinamik özellikler üzerinde kuantum ölçek etkilerinin incelenmesinde, bölüşüm fonksiyonunun hassas bir şekilde hesaplanması, anahtar problemlerden birini oluşturmaktadır.

Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin analitik çözümü sadece dikdörtgen ortamlar için mümkündür. Enerji özdeğerleri için analitik ifadeler küresel ve silindirik ortamlar için dahi bazı yaklaşımlar yapılarak elde edilebilir (Sisman, 2004). Keyfi şekilli bir ortam için ise Schrödinger denklemini analitik olarak çözmek ve enerji özdeğerlerini elde etmek mümkün değildir. Weyl varsayımı, zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin özdeğer spektrumu için hassas bir formül verir. Böylece keyfi şekilli bir ortam için enerji özdeğerlerinin hal yoğunluğunu asimptotik bir formda belirlemek mümkün olmaktadır. Sonuç olarak, bir ideal gazın bütünsel termodinamik özellikleri üzerinde kuantum ölçek etkileri Weyl varsayımı kullanılarak elde edilebilir.

Sonsuz kuyu potasyeli ile sınırlı keyfi şekle sahip bir  $D$  ortamında tutuklanmış tek parçacık için Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır:

$$\nabla^2\psi + \kappa^2\psi = 0, \psi|_{\partial D} = 0 \quad (1)$$

Bu ifadede  $\kappa$  dalga sayısıdır. Weyl varsayımına göre; verilen bir  $\kappa$  özdeğerinden daha küçük özdeğerlerin sayısı,  $\Omega(\kappa)$ ,  $V\kappa^3 \rightarrow \infty$  için,

$$\Omega(\kappa) = \frac{V}{6\pi^2} \kappa^3 - \frac{A}{16\pi} \kappa^2 + o(\kappa^2) \quad (2)$$

ile verilir (Pathria, 1996). Burada  $V$  ve  $A$  sırasıyla ortamın hacmi ve yüzey alanıdır.

Denklem (2)'de ikinci terim, özdeğerlerin hassas sayımından ileri gelmektedir. Makro sistemlerde  $A/V$  oranının çok küçük olması sebebiyle bu terim ihmal edilir. Öte yandan, bu terim mikro/nano sistemlerde önemli olup kuantum ölçek

etkilerinin kaynaklandığı terimdir. Buradan hareket ederek  $\kappa$  özdeğerlerinin hal yoğunluğu aşağıdaki şekilde elde edilir.

$$g(\kappa) \cong \frac{d\Omega(\kappa)}{d\kappa} d\kappa = \frac{V}{2\pi^2} \kappa^2 d\kappa - \frac{A}{8\pi} \kappa d\kappa \quad (3)$$

Her  $\kappa$  değerine karşılık farklı bir enerji durumu mevcut olup, enerji ile  $\kappa$  arasında

$$\varepsilon(\kappa) = \hbar^2 \kappa^2 / 2m \quad (4)$$

şeklinde bir ilişki vardır.

İdeal tek atomlu Maxwellian bir gaz için tek parçacık bölüşüm fonksiyonu,

$$\zeta = \sum_{\kappa} g(\kappa) e^{-\varepsilon(\kappa)/k_b T} \quad (5)$$

ve serbest enerji ifadesi

$$F = -k_b T N \left[ \ln \left( \frac{\zeta}{N} \right) + 1 \right] \quad (6)$$

olarak ifade edilir. Bu ifadelerde,  $k_b$  Boltzmann sabiti,  $T$  sıcaklık ve  $N$  toplam parçacık sayısıdır. (3) ifadesi, Denklem (5)'de kullanılıp integral alınarak bölüşüm fonksiyonu,

$$\zeta = \frac{\pi^{3/2} V}{8L_c^3} \left[ 1 - \frac{L_c}{2\sqrt{\pi}} \frac{A}{V} \right] \quad (7)$$

olarak elde edilir. Bu ifadede  $L_c$  en olası de Broglie dalga boyunun yarısına eşit olup

$$L_c = h / 2\sqrt{2mk_b T} \quad (8)$$

olarak tanımlanır.

Böylece serbest enerji aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$F = -Nk_b T \left[ \ln \left( \frac{\pi^{3/2}}{8nL_c^3} + 1 \right) \right] + Nk_b T \frac{L_c}{2\sqrt{\pi}} \frac{A}{V} \quad (9)$$

Bu ifadede ikinci terim, keyfi şekilli bir ortamda tutuklanmış ideal Maxwellian bir gazın serbest enerjisi üzerindeki kuantum ölçek etkisini temsil eder.

Denklem (9) kullanılarak keyfi şekilli bir ortamda tutuklanmış bir ideal Maxwellian gazın bazı bütünsel termodinamik özellikleri aşağıdaki gibi verilir:

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = Nk_b \left[ \ln\left(\frac{n_q}{n_{cl}}\right) + \frac{5}{2} \right] - Nk_b \frac{\lambda_T}{8} \frac{A}{V} \quad (10)$$

$$E = F + TS = \frac{3}{2} Nk_b T \left[ 1 + \frac{\lambda_T}{12} \frac{A}{V} \right] \quad (11)$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right) = \frac{3}{2} Nk_b \left[ 1 + \frac{\lambda_T}{24} \frac{A}{V} \right] \quad (12)$$

Basınç ve basınca bağlı ifadeler ise sistemin içinde bulunduğu ortamın geometrik özelliklerine ve deformasyonun ayrıntılarına bağlı olduğundan keyfi şekilli bir ortam için genel bir ifade verilmesi mümkün değildir. Ancak geometri ve hacim deformasyonu belirlendikten sonra ifade edilebilir.

### Dikdörtgen bir ortamda tutuklanmış ideal Maxwellian gazın yerel yoğunluk dağılımı

İdeal Maxwellian bir gaz için,  $\mathbf{x}$ -konumunda merkezlenmiş bir  $dV$  differansiyel yerel hacmi içinde ve  $r$  kuantum halinde bulunan parçacıkların sayısı aşağıdaki ifade ile verilir (Sisman vd., 2007),

$$dN_r = N \left[ \frac{\exp(-\varepsilon_r/k_b T)}{\sum_r \exp(-\varepsilon_r/k_b T)} \right] \left[ |\psi_r(\mathbf{x})|^2 dV \right] \quad (13)$$

Burada  $N$ , tüm tutuklama hacmindeki parçacık sayısı,  $\varepsilon_r$ ,  $r$  kuantum halinde bulunan parçacıkların enerjileri,  $\psi_r$ ,  $r$  kuantum haliyle ilişkili özfonksiyonlardır. İlk parantezdeki terim, bir parçacığın  $r$  kuantum halinde bulunma olasılığını (termodinamik olasılık), ikinci parantezdeki

terim ise parçacığın  $\mathbf{x}$ -konumunda merkezlenmiş bir  $dV$  hacminde bulunma olasılığını (kuantum olasılık) vermektedir.

Yerel yoğunluk,

$$n(\mathbf{x}) = \sum_r n_r(\mathbf{x}) = N \frac{\sum_r \exp(-\varepsilon_r/k_b T) |\psi_r(\mathbf{x})|^2}{\sum_r \exp(-\varepsilon_r/k_b T)} \quad (14)$$

olarak elde edilir. Dikdörtgen geometriye sahip bir ortam, Schrödinger denkleminin enerji özdeğerleri ile özfonksiyonlarının analitik olarak bilinebilmesi dolayısıyla özel bir önem taşır. Böylece dikdörtgen bir ortamda tutuklanmış Maxwellian gazın yerel yoğunluğunu (14) ifadesi ile analitik olarak hesaplayabilmek imkanı doğar.

Boyutları  $L_x$ ,  $L_y$  ve  $L_z$  olan dikdörtgen bir kutuda tutuklanmış gaz parçacıkları için enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları aşağıdaki gibi verilir (Griffiths, 1995):

$$\varepsilon_r = \varepsilon_{ijk} = \frac{\hbar^2}{8m} \left[ \left(\frac{i}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{j}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{k}{L_z}\right)^2 \right] \quad (15)$$

$$\psi_r(\mathbf{x}) = \left[ \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{\pi x}{L_x} i\right) \right] \left[ \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{\pi y}{L_y} j\right) \right] \times \left[ \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{\pi z}{L_z} k\right) \right] \quad (16)$$

(15) ve (16) ifadeleri (14) denkleminde kullanılıp gerekli düzenlemeler yapıldığında, boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı,

$$\tilde{n} = \frac{n(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})}{n_{cl}} = \frac{f_x(\tilde{x})}{\left(1 - \frac{\alpha_x}{\sqrt{\pi}}\right)} \frac{f_y(\tilde{y})}{\left(1 - \frac{\alpha_y}{\sqrt{\pi}}\right)} \frac{f_z(\tilde{z})}{\left(1 - \frac{\alpha_z}{\sqrt{\pi}}\right)} \quad (17)$$

olarak elde edilir. Burada  $\tilde{x} = x/L_x$ ,  $\tilde{y} = y/L_y$ ,  $\tilde{z} = z/L_z$  ve  $\alpha_x = L_c/L_x$ ,  $\alpha_y = L_c/L_y$ ,  $\alpha_z = L_c/L_z$  olup,  $f_x(\tilde{x})$  ise aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir:

$$f_x(\tilde{x}) = \left(1 - e^{-(\tilde{x}/\alpha_x)^2}\right) \left(1 - e^{-(\pi(1-\tilde{x})/\alpha_x)^2}\right) \quad (18)$$

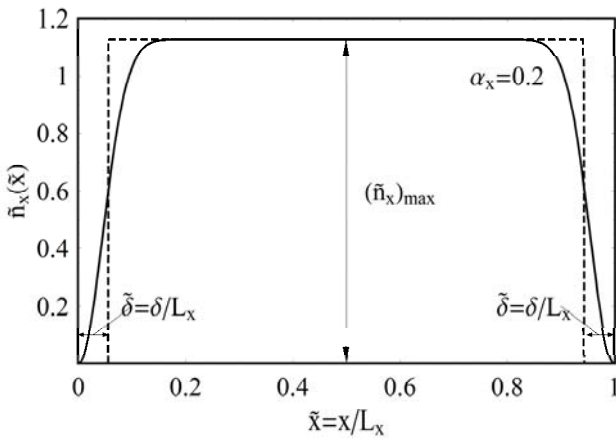
$f_y(\tilde{y})$  ve  $f_z(\tilde{z})$  ise (18) ifadesine benzer şekilde yazılabilir. Boyutsuz yoğunluğun  $x$ -doğrultusundaki değişimi Denklem (17)'den

$$\tilde{n}_x(\tilde{x}) = \frac{f_x(\tilde{x})}{\left(1 - \frac{\alpha_x}{\sqrt{\pi}}\right)} \quad (19)$$

şeklinde ifade edilir. Şekil 1'de  $\tilde{n}_x(\tilde{x})$ 'in değişimi verilmektedir. Ortamda yoğunluk dağılımının homojen olmadığı ve yoğunluğun sifıra gittiği bir sınır tabakanın bulunduğu görülmektedir. Bu tabakanın kalınlığı için analitik bir ifade elde edebilmek amacıyla, ortam integrasyonu ve genliği gerçek dağılımın ortam integrasyonu ve genliği ile aynı olmak koşuluyla, gerçek yoğunluk dağılımına Şekil 1'de kesikli çizgi ile gösterilen, homojenleştirilmiş bir dağılım fonksiyonu ile yaklaşım yapılabilir. Gerçek dağılımın ortam integrasyonu ve dağılımın genliği ise aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\int_0^1 \tilde{n}_x(\tilde{x}) d\tilde{x} = 1 \quad (20)$$

$$(\tilde{n}_x)_{\max} = \tilde{n}_x(1/2) = \frac{\left(1 - e^{-\pi^2/4\alpha_x^2}\right)^2}{1 - \alpha_x/\sqrt{\pi}} \cong \frac{1}{1 - \alpha_x/\sqrt{\pi}} \quad (21)$$



Şekil 1. Dikdörtgen ortamda boyutsuz yoğunluk dağılımı

Atomik gazlar için  $L_c$  nanometreden daha küçük değerler aldığından hemen her durumda  $\alpha_x = L_c/L_x \ll 1$  olacaktır.

Homojen dağılımın boyutsuz genişliği  $\tilde{L}^{eff}$ ,

$$(\tilde{n}_x)_{\max} \tilde{L}_x^{eff} = 1 \quad (22)$$

koşulundan hareketle Denklem (21) yardımıyla,

$$\tilde{L}_x^{eff} = 1 - \alpha_x/\sqrt{\pi} = 1 - 2\tilde{\delta} \quad (23)$$

olarak belirlenir. Burada  $\tilde{\delta}$  tabakanın boyutsuz kalınlığı olup aşağıdaki biçimde ifade edilir:

$$\tilde{\delta} = \frac{\delta}{L_x} = \frac{\alpha_x}{2\sqrt{\pi}} = \frac{L_c}{2\sqrt{\pi}L_x} = \frac{\lambda_T}{2L_x} \quad (24)$$

Şekil 1 incelendiğinde, parçacıkların ortamın geometrik boyutundan,  $L_x$ , daha küçük olan

$$L_x^{eff} = L_x - 2\delta = L_x - L_c/2\sqrt{\pi} \quad (25)$$

boyutuna sahip etkin bir bölgeyi işgal ettikleri anlaşılmaktadır.

Benzer sonuçlar  $y$ - ve  $z$ -yönleri için de elde edilebilir. Bütün yönlerde sınır tabakanın kalınlığı aynı değerde olup aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir (Sisman vd., 2007):

$$\delta = L_c/2\sqrt{\pi} \quad (26)$$

$\tilde{x} > 2\tilde{\delta}$  ve  $1 - \tilde{x} < 2\tilde{\delta}$  olduğu sürece,  $\tilde{n}_x(\tilde{x})$  hemen hemen homojendir. Bu; parçacıklar ile duvar arasındaki mesafe, ısıl de Broglie dalga boyunun yarısından küçük olduğunda parçacıklar ve duvar arasında itici bir etkileşmenin başladığı anlamına gelmektedir. Yerel olmayan bu etkileşme nedeniyle, parçacıklar ortamın daha iç kısımlarında toplanma eğilimi göstermekte olup, iç bölgelerde klasik yoğunluğa göre daha yüksek bir yerel yoğunluk değerine neden olur,  $\tilde{n} > 1$ .

Sonuç olarak, termodinamik denge koşullarında dahi, bu sınır tabaka nedeniyle yoğunluk homo-

jen değildir. Bu tabaka, kalınlığı  $h$  Planck sabitine bağlı olduğundan, kuantum sınır tabakası (KST) olarak adlandırılmaktadır (Sisman vd., 2007).

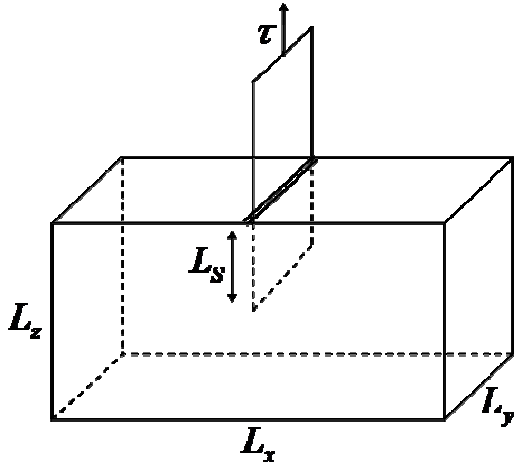
### Maxwellian gazlarda yanal kuvvetler

Kuantum yüzey gerilimi (9) ifadesinden hareketle,

$$\sigma = \left(\frac{\partial F}{\partial A}\right)_{N,V} = \frac{N}{V} k_b T \frac{L_c}{2\sqrt{\pi}} = n_{cl} k_b T \delta \quad (27)$$

olarak elde edilir. 300 K ve  $10^5$  Pa koşullarında  $\text{He}^4$  gazı için  $\sigma$  yaklaşık olarak  $10^{-6} \text{ nm}^{-1}$  civarındadır. Yüzey gerilimi ideal gazlarda klasik olarak beklenmeyen bir davranıştır.

Şekil 2’de görüldüğü gibi, teorik olarak kalınlığı sıfır olan hareketli bir duvarla iki parçaya ayrılmış dikdörtgen bir kutu içinde tutuklanmış gazın yüzey gerilimi, kuantum yüzey enerjisini minimize etmeye çalışırken, hareketli duvar üzerinde yönü dışarı doğru olan bir yanal kuvvete neden olur.



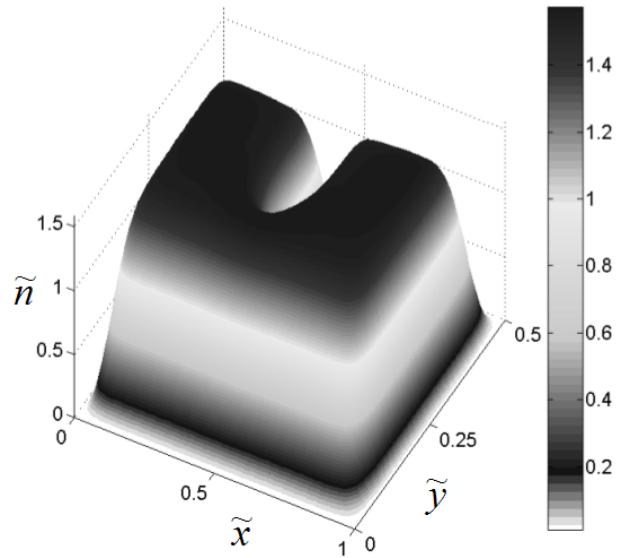
Şekil 2. Hareketli duvar üzerinde oluşan  $\tau$  yanal kuvveti

Bu yanal kuvvet,

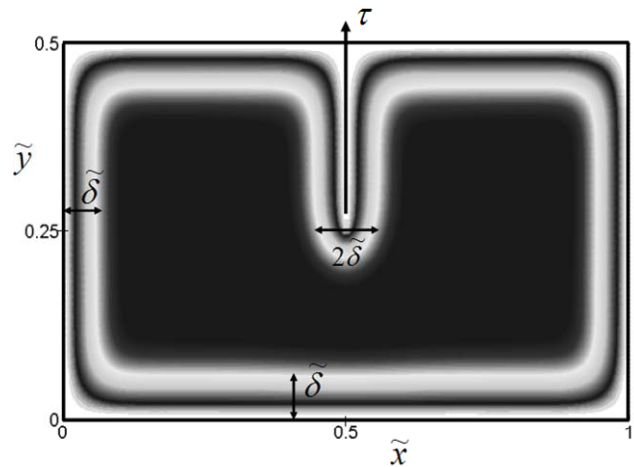
$$\tau = -\left(\frac{\partial F}{\partial L_s}\right)_{N,V} = -\frac{N}{V} k_b T \frac{L_c L_y}{\sqrt{\pi}} = -n_{cl} k_b T 2\delta L_y \quad (28)$$

olarak belirlenir. Şekil 2’de verilen ortamda tutuklanmış ideal Maxwellian bir gazın yerel yoğun-

luk dağılımı, parçacıkların enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları Schrödinger denkleminin sayısal çözümünden elde edilip Denklem (14)’te kullanılarak hesaplanabilir. Gösterim kolaylığı açısından yerel yoğunluk dağılımının 2 boyutlu davranışı Şekil 3 ve Şekil 4’te verilmektedir. Kalınlığı teorik olarak sıfır olan hareketli duvarın etrafında oluşan kuantum sınır tabakası nedeniyle duvarın etkin kalınlığının  $2\delta$  olduğu anlaşılmaktadır. Böylece duvar üzerinde yönü ortam dışına doğru olan bir  $\tau$  yanal kuvveti, stres tensörünün normal bileşeni ile hareketli duvarın etkin kalınlığının çarpımıyla kolayca açıklanabilmektedir.



Şekil 3. Boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı



Şekil 4. Boyutsuz yerel yoğunluk dağılımının üstten görünümü

Kuantum sınır tabakasının, ortamın yüzeyini takip ettiği Şekil 4’te net bir biçimde görülmektedir.

## Sonuçlar

Bu çalışmada, keyfi şekilli bir ortamda tutuklanmış ideal Maxwellian bir gaz için serbest enerji ifadesi türetilmiştir. Serbest enerji ifadesinin kuantum ölçek etkileri nedeniyle, klasik serbest enerji ifadesinden farklı olduğu gösterilmiştir. Serbest enerji ifadesinden hareket edilerek, nano ölçekte tutuklanmış gazın diğer termodinamik özellikleri elde edilmiştir. Kuantum ölçek etkilerinin bir sonucu olarak ideal gazlarda dahi makro ölçekte karşılaşılmayan yanal kuvvetlerin oluşabileceği gösterilmiştir. Klasik olmayan bu davranışın deneysel olarak doğrulanması durumunda, kuantum ölçek etkilerinin makroskopik bir belirtisi doğrulanmış olacaktır.

## Kaynaklar

- Dai, W.S. ve Xie, M., (2003). Quantum statistics of ideal gases in confined space, *Physics Letters A*, **311**, 340-346.
- Dai, W.S. ve Xie, M., (2004). Geometry effects in confined space, *Physical Review E*, **70**, 016103-1-12.

- Griffiths, D.J., (1995). *Introduction to quantum mechanics*, 24, Prentice Hall, New Jersey.
- Molina, M.I., (1996). Ideal gas in a finite container, *The American Journal of Physics*, **64**, 503-505.
- Pang, H., Dai, W.S. ve Xie, M., (2006). The difference of boundary effects between Bose and Fermi systems, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **39**, 2563-2571.
- Pathria, R.K., (1996). *Statistical mechanics*, 2<sup>nd</sup> Edition, Butterworth-Heinemann, Woburn, MA.
- Pathria, R.K., (1998). An ideal quantum gas in a finite-sized container, *The American Journal of Physics*, **66**, 1080-1085.
- Sisman, A., (2004). Surface dependency in thermodynamics of ideal gases, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **37**, 11353-11361.
- Sisman, A. ve Müller, I., (2004). The Casimir-like size effects in ideal gases, *Physics Letters A*, **320**, 360-366.
- Sisman, A., Ozturk, F. ve Fırat, C., (2005). Quantum surface tension in ideal gases, 2005 Dünya Fizik Yılı-Türk Fizik Derneği, 23. Uluslararası Fizik Kongresi, Muğla, Türkiye, 13-16 Eylül, 134-139.
- Sisman, A., Ozturk, Z.F. ve Fırat, C., (2007). Quantum boundary layer: A non-uniform density distribution of an ideal gas in thermodynamic equilibrium, *Physics Letters A*, **362**, 16-20.