

# درس پنجم : مکانیک آماری کوانتومی

وحید کریمی پور- دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شریف

۱۶ آبان ۱۳۹۷

## ۱ مقدمه

همه بحث ما تا کنون منحصر به مکانیک آماری سیستم های کلاسیک بوده است و خصوصیات کوانتومی دنیای میکروسکوپی را تقریباً نادیده گرفته ایم. آیا این کار مجاز است؟ آیا می توان در مطالعه مکانیک آماری یک گاز، مولکول ها و اتم ها را مثل گوی های کوچکی در نظر گرفت که تابع قوانین حرکت نیوتن هستند؟ آیا می توان در مطالعه مکانیک آماری مجموعه ای از نوسانگرها، گسسته بودن سطوح انرژی را نادیده گرفت؟

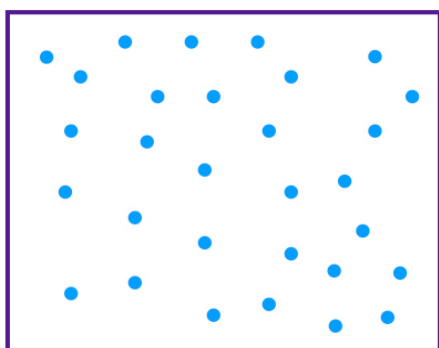
پاسخ این سوال هم آری است و هم نه؟ در واقع استفاده از مکانیک کوانتومی بسته به شرایط دما و فشار و نظایر آن دارد. ممکن است که شرایط میکروسکوپی نظیر چگالی ( یا فشار ) و دما به گونه ای باشد که تقریب کلاسیک برای توصیف رفتار ذرات میکروسکوپی تقریب بسیار خوبی باشد. به عنوان مثال برای یک مجموعه از نوسانگرهای هارمونیک که همگی فرکانس یکسان دارند، هرگاه دما چنان باشد که  $kT \gg \hbar\omega$  ، گسسته بودن سطوح انرژی نوسانگر دیده نمی شوند و مکانیک آماری کلاسیک در این حد از دما همان نتایجی را بدست می دهد که مکانیک آماری کوانتومی.

در مورد یک گاز یا مایع هم تنها تحت شرایط معینی است که مکانیک آماری کلاسیک کافی نیست و می بایست از مکانیک آماری کوانتومی استفاده کرد. اگر ذرات گاز دارای جرم  $m$  باشند، می دانیم که طول موج گرمایی آنها یعنی طول موج دوبروی آنها در دمای  $T$  برابر است با

هرگاه  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}$  این طول موج از فاصله بین ذرات بسیار کمتر باشد، می توان از اثرات کوانتومی صرف نظر کرد، یعنی ذرات را مثل گوی های کوچک کلاسیک و جایگزیده در نظر گرفت که تابع موج فضایی آنها هیچ گونه گستردگی فضایی ندارد. بنابراین ملاکی که تعیین می کند آیا رفتار یک گاز کوانتومی است یا کلاسیکی نسبت فاصله متوسط بین ذرات یعنی  $l$  به طول موج گرمایی یعنی  $\lambda$  است. می دانیم که  $l = n^{1/3}$ ؛ که در آن  $n$  چگالی است. بنابراین به ملاک زیر می رسم:

$$\lambda n^3 \ll 1 \rightarrow \text{Classical Behaviour}$$

$$\lambda n^3 \gg 1 \rightarrow \text{Quantum Behaviour.} \quad (1)$$



$$n\lambda^3 \ll 1$$



$$n\lambda^3 \gtrsim 1$$

شکل ۱: شکل سمت چپ: گاز در دمای بالا و یا چگالی پایین، طول موج گرمایی در مقایسه با فاصله بین ذرات کوچک است. شکل سمت راست: گاز در دمای پایین یا چگالی بالا، طول موج گرمایی در مقایسه با فاصله بین ذرات بزرگ یا قابل مقایسه است. گاز اول کلاسیک و گاز دوم کوانتومی است.

## ۲ میکرو حالت های کوانتومی - ماتریس چگالی

وضعیت یک سیستم کلاسیک که از  $N$  ذره تشکیل شده است، در هر لحظه با یک نقطه در فضای فاز  $6N$  بعدی توصیف می شود. این نقطه با مختصات  $(r_1, r_2, \dots, r_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$  مشخص می شود. در مکانیک آماری کلاسیک و در آزمایش کانونیک دیدیم که چگالی احتمال این که در حالت تعادل سیستم در این نقطه باشد برابر است با:

$$P(r, p) = \frac{1}{Z} \text{tr}(e^{-\beta H}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(r, p)} \quad (۲)$$

که در آن  $H$  هامیلتونی یک سیستم ایده آل است که در آن برهم کنش های بسیار جزئی بین ذرات در نظر گرفته نشده است. این برهم کنش های جزئی <sup>۱</sup> همان هایی هستند که باعث رفتار تصادفی سیستم و پخش شدن در تمام فضای فاز و ایجاد خاصیت ارگودیک می شوند. اگر این برهم کنش های جزئی (برخورد ذرات با یکدیگر با دیواره های ظرف) نبود، سیستمی که با هامیلتونی  $H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}$  توصیف می شد؛ مسیرش در فضای فاز یک خط راست می شد. به طریق مشابه در یک سیستم کوانتومی میکرو حالت ها با ویژه انرژی های یک هامیلتونی ایده آل توصیف می شوند که مثل حالت کلاسیک برهم کنش های باقیمانده در آن در نظر گرفته نشده است. اگر این برهم کنش ها نباشند، سیستمی که با هامیلتونی ایده آل  $H$  توصیف می شود، هرگاه در یک ویژه حالت انرژی قرار بگیرد همواره در همان ویژه حالت باقی می ماند. اما برهم کنش های باقیمانده باعث می شوند که سیستم دائماً روی ویژه حالت های هامیلتونی جابجا شود و نهایتاً روی تمام ویژه حالت ها پخش شده و حالت معینی نداشته باشد. بنابراین اگر ویژه حالت های هامیلتونی را با  $|\psi_i\rangle$  نشان دهیم که در آن اندیس  $i$  نشان دهنده تمام اعداد کوانتومی لازم برای مشخص کردن ویژه حالت هاست، یعنی

$$H|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle, \quad (۳)$$

آنگاه در حالت تعادل و در دمای ثابت  $T$  سیستم با احتمال  $P_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$  در حالت  $|\psi_i\rangle$  است. در چنین حالتی می گوئیم سیستم در یک حالت خالص <sup>۲</sup> نیست بلکه در یک حالت آمیخته <sup>۳</sup> ماست. هرگاه بخواهیم متوسط کمیتی مثل  $A$  را اندازه بگیریم به ترتیب زیر عمل می کنیم: قرار می دهیم:

$$\bar{A} = \sum_i P_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle, \quad (۴)$$

---

<sup>۱</sup> Residual Interactions

<sup>۲</sup> Pure State

<sup>۳</sup> Mixed State

که در آن  $\langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$  یک متوسط کوانتومی است، زیرا حتی وقتی که سیستم در یک حالت معین  $|\psi_i\rangle$  باشد، باز هم مقدار مشاهده پذیر  $A$  معین نیست. در عبارت بالا بعد از متوسط کوانتومی متوسط روی آنزامل گرمایی گرفته شده است. می توان عبارت ۳ را به صورت بهتری نوشت. از آنجا که  $|\psi_i\rangle$  ها یک پایه متعامد تشکیل می دهند، می توانیم بنویسیم:

$$\bar{A} = tr(\sum_i P_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|) = tr(\hat{\rho} \hat{A}) \quad (5)$$

که در آن

$$\hat{\rho} := \sum_i P_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (6)$$

ماتریس چگالی<sup>۴</sup> خوانده می شود. باید دقت کنیم که ماتریس چگالی برای هر تابع توزیع  $\{P_i\}$  و برای هر مجموعه بردارهای  $\{|\psi_i\rangle\}$  تعریف می شود. ( در صورتی که خواننده بخواهد دانش کامل تر و دقیق تری در باره ماتریس چگالی پیدا کند، می تواند به درسنامه « رایانش کوانتومی » مراجعه کند). برای آنزامل کانونیک داریم:  $P_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$ . بنابراین ماتریس چگالی برابر می شود با:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (7)$$

و یا

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} \quad (8)$$

که در آن

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = tr(e^{-\beta \hat{H}}). \quad (9)$$

### ۳ فضای هیلبرت سیستم های بس ذره ای

در این بخش به اختصار فضای هیلبرت یک سیستم بس ذره ای را شرح می دهیم. شرح مفصل تری را خواننده می تواند در درس نامه مکانیک کوانتومی بیابد.

Density Matrix<sup>۴</sup>

فضای هیلبرت یک ذره را با  $V$  نشان می دهیم و فضای هیلبرت یک سیستم  $N$  ذره ای را که متشکل از  $N$  ذره تمیز پذیر است با  $V_N$  نشان می دهیم. در این صورت بنا بر مکانیک کوانتومی فضای هیلبرت  $V_N$  برابر است با:

$$V_N = V \otimes V \otimes V \dots V \equiv V^{\otimes N} \quad (10)$$

که در آن  $\otimes$  نشان دهنده ضرب تانسوری فضاهاست. هرگاه بردارهای پایه  $V$  را با  $|e_i\rangle$  نشان دهیم بردارهای پایه  $V^{\otimes N}$  به صورت  $|e_{i_1}\rangle \otimes |e_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |e_{i_N}\rangle$  خواهد بود. هرگاه بعد  $V$  برابر با  $d^N$  خواهد بود. هرگاه عملگری مثل  $\hat{A}$  را در فضای هیلبرت یک ذره تصور کنیم، عملگر  $A_i$  نشان دهنده اثر  $\hat{A}$  روی ذره  $i$  ام است و به صورت زیر خواهد بود:

$$\hat{A}_i = I \otimes I \otimes \dots \otimes \hat{A} \otimes \dots \otimes I, \quad (11)$$

از خواص ضرب تانسوری می دانیم که اگر  $i \neq j$  نگاه  $\hat{A}_i \hat{A}_j = \hat{A}_j \hat{A}_i$ .

■ مثال: فرض کنید که با سیستمی سرو کار داریم که در آن ذرات با یکدیگر برهم کنش ندارند. این ذرات البته می توانند هرکدام با محیط خارج برهم کنش کنند. در چنین شرایطی هامیلتونی به شکل زیر نوشته می شود:

$$H^{(N)} = \sum_{i=1}^N H_i \quad (12)$$

که در آن  $H$  در مکان  $i$  ام عمل می کند و بقیه عملگرهای  $I$  روی بقیه ذرات عمل می کنند. در این صورت تابع پارش برابر خواهد بود با:

$$Z_N = tr(e^{-\beta H^{(N)}}) = tr(e^{-\beta(H_1+H_2+\dots+H_N)}). \quad (13)$$

از آنجا که  $H_i$  ها باهم جابجا می شوند خواهیم داشت:

$$Z_N = tr(e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} \dots e^{-\beta H_N}). \quad (14)$$

اما ب راحتی می توان دید که

$$e^{-\beta H_1} = e^{-\beta H} \otimes I \otimes I \dots \otimes I, \quad (15)$$

و با استفاده از خواص ضرب تانسوری :

$$e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} \dots e^{-\beta H_N} = e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \dots e^{-\beta H}. \quad (16)$$

در نتیجه

$$Z_N = \text{tr}(e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \dots e^{-\beta H}) = \text{tr}(e^{-\beta H})^N. \quad (17)$$

بنابراین مثل حالت کلاسیک در این حالت هم تابع پارش  $N$  ذره ای توان  $N$  ام تابع پارش یک ذره ای است یعنی  $Z_N = Z_1^N$  که در آن  $Z_1 = \text{tr}(e^{-\beta H})$ .

■ مثال: ذرات آزاد تمیز پذیر:

برای چنین سیستمی داریم:

$$Z_N = Z_1^N \quad (18)$$

که در آن

$$Z_1 = \text{tr}(e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}) \quad (19)$$

بنابر رابطه بالا  $Z_1$  برابر است با:

$$Z_1 = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (20)$$

که در آن  $E_i$  ها ویژه مقدارهای انرژی یک ذره آزاد است و  $i$  نشان دهنده اعداد کوانتومی یک ذره است. برای یک ذره که در یک چاه  $d$  بعدی با اضلاعی به طول  $L$  زندگی می کند، تا عدد کوانتومی وجود دارد و انرژی برابر است با:

$$E_{\mathbf{n}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + \dots + n_d^2). \quad (21)$$

در شرایط مرزی دیواره های بی نهایت سخت، تابع موج مربوط به چنین ویژه حالتی برابر است با:

$$\psi_{\mathbf{n}} = A \sin \frac{n_1 \pi}{L} x_1 \sin \frac{n_2 \pi}{L} x_2 \dots \sin \frac{n_d \pi}{L} x_d, \quad (22)$$

که در آن  $A$  یک ثابت بهنجارش است. بنابراین تابع پارش برابر می شود با:

$$Z_1 = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_d} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + \dots + n_d^2)} := Q^d \quad (23)$$

که در آن  $Q$  برابر است با:

$$Q = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2}. \quad (24)$$

این جمع را با تقریب خوبی می توان به ی انتگرال گاوسی تبدیل و آن را محاسبه کرد. اگر متغیر  $k$  را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$k = \frac{\hbar \pi}{L} n, \quad (25)$$

متوجه می شویم که با توجه به بزرگ بودن  $L$  وقتی که  $n$  تغییر می کند، تغییر  $k$  بسیار اندک است. بنابراین مطابق زیر می توان جمع را به صورت زیر انجام داد:

$$Q = \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{\Delta n}{\Delta k} \right) \Delta k e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}, \quad (26)$$

که در آن تعداد نقاط درون یک بازه ی  $\Delta k$  است. این تعداد را می توان با استفاده از رابطه ی  $k = \frac{\pi}{L} n$  بدست آورد. بنابراین  $\frac{\Delta n}{\Delta k} = \frac{L}{\pi}$  در نتیجه داریم

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L}{\pi} \Delta k e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = \frac{L}{\pi} \int_0^{\infty} dk e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \\ &= \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar^2 \beta}} = \frac{L}{\lambda}, \end{aligned} \quad (27)$$

که در آن  $\lambda$  طول موج گرمایی است که بنا بر تعریف برابر است با:

$$\lambda := \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}}. \quad (28)$$

در نتیجه تابع پارش یک ذره یعنی  $Z_1$  برابر می شود با:

$$Z_1 = \frac{V}{\lambda^d} \quad (29)$$

و تابع پارش گاز  $N$  ذره ای برابر خواهد شد با:

$$Z_N = \left( \frac{V}{\lambda^d} \right)^N. \quad (30)$$

نکته قابل توجه در این جا این است که ضریب  $h$  که قبلا در بررسی آنزامل کانونیک برای سیستم های کلاسیک و برای تبدیل حجم فضای فاز به تعداد وارد شده بود و در آنجا از استدلال های شهودی مربوط به اصل عدم قطعیت استفاده کرده بودیم در این جا به طور بدیهی و

طبیعی در تابع پارش وارد می شود. اما نباید انتظار داشته باشیم که ضریب  $\frac{1}{N!}$  که در آنجا به خاطر تمیز ناپذیری ذرات وارد کرده بودیم در این جا نیز ظاهر شود زیرا در این جا از همان ابتدا فرض کرده ایم که ذرات تمیز ناپذیرند. بنابراین اگر بخواهیم تابع پارشی بدست بیاوریم که در چگالی های کم معتبر باشد و تمیز ناپذیری ذرات را نیز در بر داشته باشد، باید همچنان ضریب  $\frac{1}{N!}$  را در این جا اضافه کنیم و تابع پارش را به صورت زیر بنویسیم:

$$Z_N = \frac{1}{N!} \left( \frac{V}{\lambda^d} \right)^N. \quad (31)$$

پس از این مقدمات به مسئله مهم ذرات یکسان می پردازیم و آن را از دیدگاه دقیق کوانتومی بررسی می کنیم.

## ۴ ذرات یکسان در مکانیک کوانتومی

تابع موج یک سیستم دو ذره ای را به صورت  $\psi(r_1, r_2)$  می نویسیم که در آن  $r_1$  مکان ذره اول و  $r_2$  مکان ذره دوم است. این توصیف وقتی درست است که لااقل از نظر ذهنی ما بتوانیم هویت ذرات 1 و 2 را از هم تمیز بدهیم. این تشخیص اگر چه در مکانیک کلاسیک که ذرات مثل گوی های کوچک هستند امکان پذیر است، ولی در مکانیک کوانتومی که ذرات با بسته های موج توصیف می شوند همواره امکان پذیر نیست. حتی اگر در یک لحظه ذرات را از هم تمیز بدهیم و آن ها را به طور ذهنی شماره گذاری کنیم در اثر گذشت زمان تابع موج این ذرات پخش شده و در هم فرو می روند و بعد از جدا شدن بسته های موج دیگر نمی توانیم ذرات را شناسایی کنیم. این نکته به صورت شماتیک در شکل (۱) نشان داده شده است که برخورد دو ذره یکسان را نشان می دهد. بعد از برخورد دو ذره ما واقعاً نمی دانیم که کدام ذره ذره ی 1 و کدام ذره ذره ی 2 است. بنابراین توصیف درست از یک سیستم دو ذره ای می بایست توسط تابع موجی داده شود که این تمیز ناپذیری ذرات در آن در نظر گرفته شده باشد. بنابراین یک تابع موج دو ذره ای مثل  $\psi(r_1, r_2)$  می بایست تنها بتواند احتمال وجود یک ذره را در نقطه  $r_1$  و یک ذره را در نقطه  $r_2$  معین کند نه این که بگوید کدام ذره در کدام نقطه است. در نتیجه می بایست داشته باشیم:

$$|\psi(r_1, r_2)|^2 = |\psi(r_2, r_1)|^2 \quad (32)$$



که به معنای این است که

$$\psi(r_2, r_1) = e^{i\theta} \psi(r_1, r_2). \quad (33)$$

اگر جایگشت بالا را یک بار دیگر تکرار کنیم به این رابطه می رسیم که

$$\psi(r_1, r_2) = e^{2i\theta} \psi(r_1, r_2) \quad (34)$$

که نتیجه می دهد  $e^{i\theta} = \pm 1$  یعنی تابع موج دو ذره ای می بایست در شرایط زیر صدق کند:

$$\psi(r_2, r_1) = \pm \psi(r_1, r_2). \quad (35)$$

این که تابع موج می بایست متقارن یا پادمتقارن باشد بستگی به نوع ذرات دارد. برای فرمیون ها ( یعنی ذراتی که اسپین آنها نیمه صحیح است مثل الکترون، نوترون، ایزوتوپ هلیوم ۳ ) تابع موج می بایست پادمتقارن و برای بوزون ها ( یعنی ذراتی که اسپین آنها صحیح است مثل فوتونها و ایزوتوپ هلیوم ۴ ) تابع موج می بایست متقارن باشد. به یک نکته مهم می بایست توجه کرد و آن این که متقارن یا پادمتقارن بودن خاصیت کل تابع موج است نه فقط قسمت فضایی تابع موج.

■ دو ذره یکسان در نظر می گیریم که با یکدیگر برهم کنش ندارند. هرگاه ویژه حالت های انرژی را برای یک ذره با  $u_n$  نشان دهیم یعنی

$$H^{(1)}|u_n\rangle = \epsilon_n|u_n\rangle \quad (36)$$

که در آن  $n$  اعداد کوانتومی مربوط به ویژه حالت های یک ذره است، آنگاه ویژه حالت های انرژی برای ۲ ذره را به طریق ساده ای می توان ساخت. می دانیم که با ضرب کردن این ویژه حالت ها در یکدیگر ویژه حالت های  $N$  ذره ای بدست می آید. یعنی

$$|\psi_{n_1, n_2}\rangle = |u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle \quad (37)$$

یک ویژه حالت انرژی است به این معنا که :

$$H^{(2)}|\psi_{n_1, n_2}\rangle = (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2})|\psi_{n_1, n_2}\rangle. \quad (38)$$

اما ویژه حالت (۳۸) برای ذرات یکسان فرمیونی می بایست کاملا پادمتقارن و برای ذرات یکسان بوزونی می بایست کاملا متقارن باشد تا یک ویژه حالت درست برای این گونه سیستم ها بدست آید. بنابراین ویژه حالت های بوزونی و فرمیونی را به شکل زیر قرار می دهیم.

برای بوزون ها:

$$|\psi_{n_1, n_2}^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle + |u_{n_2}\rangle \otimes |u_{n_1}\rangle), \quad (39)$$

برای فرمیون ها:

$$|\psi_{n_1, n_2}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle - |u_{n_2}\rangle \otimes |u_{n_1}\rangle). \quad (40)$$

رابطه (40) و (41) تنها بیان می کنند که یک ذره در تراز انرژی  $n_1$  و یک ذره در تراز انرژی  $n_2$  است و نمی گویند که کدام ذره در کدام تراز انرژی است. هرگاه بخواهیم تابع موج فضایی را بدست بیاوریم کافی است که طرفین رابطه های بالا را در  $\langle x_1, x_2 | := \langle x_1 | \otimes \langle x_2 |$  ضرب کنیم و بدست بیاوریم:

$$\psi_{n_1, n_2}^\pm(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_{n_1}(x_1)u_{n_2}(x_2) \pm u_{n_2}(x_1)u_{n_1}(x_2)). \quad (41)$$

تقارن یا پادتقارن تابع موج اثرات فیزیکی بسیار مهمی دارد. برای فهم این اثرات نخست تابع موج دو ذره ای را برای فرمیون ها در نظر می گیریم. از رابطه 42 بدست می آوریم:

$$\psi_{n_1, n_2}(x, x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_{n_1}(x)u_{n_2}(x) - u_{n_2}(x)u_{n_1}(x)) = 0, \quad (42)$$

که به این معناست که دو فرمیون تمایل ندارند که در یک نقطه قرار بگیرند. در حقیقت می توان نشان داد که تابع موج  $\psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2)$  با کم شدن  $|x_1 - x_2|$  کاهش می یابد. مثل این است که فرمیون ها تمایل به دفع یکدیگر دارند. بوزون ها برعکس رفتار کاملاً متفاوتی دارند. بازهم از همان رابطه 42 بدست می آوریم:

$$\psi_{n_1, n_2}(x, x) = \frac{1}{\sqrt{2}} ((u_{n_1}(x)u_{n_2}(x) + u_{n_2}(x)u_{n_1}(x)) = \sqrt{2}u_{n_1}(x)u_{n_2}(x) \quad (43)$$

و در نتیجه

$$|\psi_{n_1, n_2}(x, x)|^2 = 2 |u_{n_1}(x)|^2 |u_{n_2}(x)|^2 \quad (44)$$

و ضریب 2 نشان دهنده ی این است که احتمال وجود دو ذره بوزون در یک نقطه دو برابر وقتی است که این ذرات یکسان نبوندند. بنابراین مثل این است که بوزون ها یکدیگر را جذب می کنند. این دو خاصیت یعنی دفع کردن فرمیون ها و جذب کردن بوزون ها در

رفتار ماکروسکوپی سیستم های فرمیونی و بوزونی باعث پدیده های بسیار متفاوت با خواص خیلی جالب خواهد شد. در پایان این بخش بهتر است که تعمیم رابطه ۴۲ را برای  $N$  ذره بنویسیم. برای  $N$  ذره فرمیونی خواهیم داشت:

$$\Psi_{\mathbf{n}}^{-} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^{|P|} u_{n_1}(x_{P(1)}) u_{n_2}(x_{P(2)}) \cdots u_{n_N}(x_{P(N)}) \quad (45)$$

که در آن جمع روی تمام جایگشت های  $P$  از  $N$  شاخص  $1, 2, \dots, N$  است و  $|P|$  برای جایگشت های زوج برابر با 0 و برای جایگشت های فرد برابر با 1 است. عبارت بالا را به شکل یک دترمینان که آن را دترمینان اسلیتر<sup>۵</sup> می گویند نیز می توان نوشت:

$$\Psi_{\mathbf{n}}^{-}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{n_1}(x_1) & u_{n_1}(x_2) & \cdots & u_{n_1}(x_N) \\ u_{n_2}(x_1) & u_{n_2}(x_2) & \cdots & u_{n_2}(x_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ u_{n_N}(x_1) & u_{n_N}(x_2) & \cdots & u_{n_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (46)$$

برای بوزون ها نیز می توان نوشت

$$\Psi_{\mathbf{n}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P u_{n_1}(x_{P(1)}) u_{n_2}(x_{P(2)}) \cdots u_{n_N}(x_{P(N)}) \quad (47)$$

مشابه با فرمیون ها این تابع را نیز می توان به صورت فشرده تر نوشت. حاصل آن چیزی است که در ریاضیات پرماننت<sup>۶</sup> خوانده می شود. ساختمان آن درست مثل دترمینان است با این تفاوت که در ترکیب درایه های ماتریس هیچ نوع علامت منفی به کار نمی رود.

## ۵ میکرو حالت های مربوط به ذرات یکسان

دیدیم که اگر فضای هیلبرت یک ذره را با  $V$  نشان دهیم، فضای هیلبرت یک سیستم  $N$  ذره ای متشکل از بوزون ها یا فرمیون ها فضای ضرب تانسوری  $V \otimes V \otimes \cdots \otimes V$  نیست بلکه برای بوزون ها تنها قسمت متقارن این فضا و برای فرمیون ها تنها قسمت پادمتقارن این فضا فضای هیلبرت

<sup>۵</sup>Slater Determinant  
<sup>۶</sup>Permanent

فیزیکی است. هرگاه بردارهای پایه فضای  $V$  را با  $|\alpha\rangle$  نشان دهیم بردارهای پایه فضا برای فرمیون ها به صورت زیر است:

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_- := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^{|P|} |\alpha_{P(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_{P(N)}\rangle \quad (48)$$

و بردارهای پایه ی فضای هیلبرت بوزون ها به صورت زیر است:

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_+ := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P |\alpha_{P(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_{P(N)}\rangle. \quad (49)$$

برای این فضاها دیگر رابطه ی  $Z_N = Z_1^N$  صحیح نیست. یعنی محاسبه تابع پارش  $N$  ذره ای به تابع پارش یک ذره ای کاهش نمی یابد. بنابراین می بایست تابع پارش  $N$  ذره ای را با در نظر گرفتن توابع موج متقارن یا پادمتقارن محاسبه کرد. اما معلوم است که چنین توصیفی از میکرواحالت ها برای محاسبه تابع پارش دشوار و غیر مفید است. بنابراین بهتر است در جستجوی یک توصیف ساده تر باشیم. این توصیف ساده تر چیزی است که آن را نمایش عدد جمعیت یا نمایش عدد اشغال<sup>۷</sup> می نامند. در این نمایش نمی گوئیم که کدام ذره در کدام تراز انرژی است بلکه می گوئیم در هر تراز انرژی چند تا ذره وجود دارد. شکل (۲).

بنابراین در این نمایش هر میکرواحالت با یک دنباله از اعداد

$$(n_1, n_2, n_3, \dots, n_K) \quad (50)$$

مشخص می شود که در آن  $K$  تعداد حالت های انرژی یک ذره است. البته بسته به نوع طیف یک ذره مثلا برای ذره آزاد  $K$  می تواند متناهی یا نامتناهی باشد. آنچه که تفاوت فرمیون ها و بوزون ها را مشخص می کند آن است که برای بوزون ها تعداد ذرات درون هر لایه انرژی دارای هیچ محدودیتی نیست یعنی  $n_i$  از صفر تا بی نهایت تغییر می کند ولی برای فرمیون ها هر عدد  $n_i$  تنها می تواند 0 یا 1 باشد. بنابراین داریم:

$$\begin{array}{ll} \text{for bosons} & 0 \leq n_i < \infty \\ \text{for fermions} & n_i = 0, 1. \end{array} \quad (51)$$

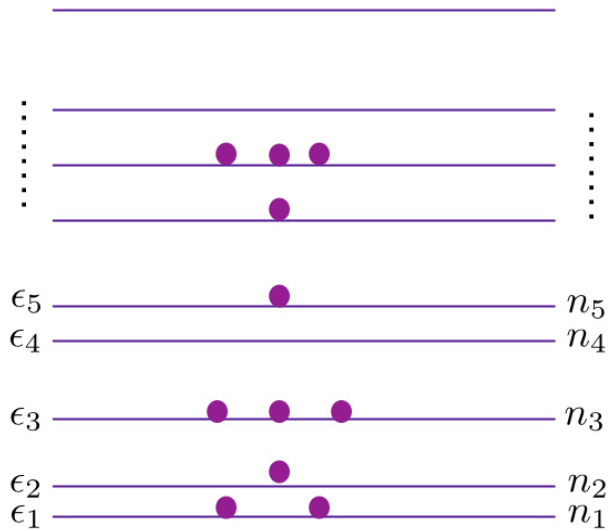
حال هر میکرواحالت از نوع بالا انرژی اش برابر است با:

$$E = n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots + n_k \epsilon_k. \quad (52)$$

در نتیجه تابع پارش به صورت زیر خواهد بود:

$$Z_N = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_k} e^{-\beta(n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots + n_k \epsilon_k)} \quad (53)$$

<sup>۷</sup>Occupation Number Representation



شکل ۲: روش صحیح تعیین میکروحالت ها برای یک گاز کوانتومی: چه تعداد ذره در هر تراز انرژی قرار دارد.

که در آن  $\sum$  به معنای این است که این جمع یک جمع مقید است به این معنا که جمع روی تمام مقادیری است که در شرط  $n_1 + n_2 + \dots + n_K = N$  صدق می کنند. این قید محاسبه تابع پارش را با دشواری مواجه می کند. این جاست که توسل به آنزامل گراند کانونیک به کمک ما می آید و ما می توانیم تابع پارش گراند کانونیک را برای بوزون ها و فرمیون ها براحتی حساب کنیم. البته می بایست برای این سادگی بهایی پرداخت کنیم که بعداً به آن توجه خواهیم کرد. بنابراین می نویسیم:

$$\begin{aligned}
 Q(z) &= \sum_{N=0}^{\infty} Z_N \\
 &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_1, n_2, \dots, n_K} z^{n_1 + n_2 + \dots + n_K} e^{-\beta(n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots + n_K \epsilon_K)}
 \end{aligned} \tag{54}$$

از آنجا که روی مقادیر  $N$  نیز جمع می زنیم، دیگر هیچ محدودیتی روی  $n_i$  ها وجود ندارد، یعنی  $Q$  برابر خواهد بود با:

$$Q(z) = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_K} (ze^{-\beta \epsilon_1})^{n_1} (ze^{-\beta \epsilon_2})^{n_2} \dots (ze^{-\beta \epsilon_K})^{n_K} \tag{55}$$

و در نتیجه

$$Q(z) = \prod_{i=1}^K \sum_n (ze^{-\beta\epsilon_i})^n \quad (56)$$

و از آنجا با توجه به رابطه ۵۲

$$Q^+(z) = \prod_{i=1}^K \frac{1}{1 - ze^{-\beta\epsilon_i}} \quad (57)$$

و

$$Q^-(z) = \prod_{i=1}^K (1 + ze^{-\beta\epsilon_i}). \quad (58)$$

هر دوی این توابع را می توان در رابطه زیر با هم ترکیب کرد:

$$Q^a(z) = \prod_{i=1}^K (1 + aze^{-\beta\epsilon_i})^a \quad (59)$$

که در آن

$$a = -1 \text{ for bosons} \quad a = 1 \text{ for fermions.} \quad (60)$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$\ln(Q^a(z)) = a \sum_{i=1}^K \ln(1 + aze^{-\beta\epsilon_i}) \quad (61)$$

و از آنجا با توجه به رابطه ی  $N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln Q$

$$N^a = \sum_{i=1}^K \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} + a}. \quad (62)$$

هم چنین با توجه به رابطه ی  $U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q$

$$U^a = \sum_{i=1}^K \frac{\epsilon_i}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} + a}. \quad (63)$$

و سرانجام از رابطه  $\frac{JX}{kT} = -\ln Q$  بدست می آوریم:

$$\frac{JX}{kT} = a \sum_{i=1}^K \sum_{i=1}^K \ln(1 + aze^{-\beta\epsilon_i}) \quad (64)$$

برای یک گاز کامل می دانیم که  $JX = -PV$ . دقت کنید که روابط ۶۳، ۶۴، و ۶۵ روابط ترمودینامیکی حاکم بر یک سیستم ذرات آزاد را به طور ضمنی بیان می کنند زیرا همه این روابط به پارامتر  $z = e^{\beta\mu}$  بستگی دارند. حذف این پارامتر بین این روابط، روابط نهایی ترمودینامیکی را بدست می دهد. به عبارت دقیق تر از روابط ۶۳ تا ۶۵ بدست می آوریم:

$$z = z(N, T, \dots), \quad U = U(z, T, \dots), \quad \frac{PV}{kT} = f(z, T, \dots) \quad (65)$$

که در آن ... نشان دهنده بقیه پارامترها مثل حجم (در مورد گازهاست). با جایگذاری  $z$  در  $U$  و عبارت انرژی و معادله حالت بدست می آیند. رابطه های ۶۳ و ۶۴ نشان می دهند که تعداد متوسط ذرات در هر تراز انرژی چقدر است. این مقدار را با  $\bar{n}_i$  نشان می دهیم و برابر است با:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} + a} \quad (66)$$

اگر به رابطه ۵۵ نگاه کنیم متوجه می شویم که این رابطه هم چنین از مشتق گیری  $\ln(Q)$  نسبت به  $\beta\epsilon_i$  نیز به دست می آید. یعنی

$$\bar{n}_i = -\frac{\partial}{\partial(\beta\epsilon_i)} \ln Q^a(z). \quad (67)$$

رابطه ۵۵ هم چنین اجازه می دهد که  $\overline{n_i^2}$  و در نتیجه افت و خیز جمعی ذرات را در تراز های انرژی حساب کنیم. به سادگی می توان فهمید که

$$(\Delta n_i)^2 = \overline{n_i^2} - \bar{n}_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial(\beta\epsilon_i)^2} \ln Q \quad (68)$$

بنابر این

$$(\Delta n_i)^2(a) = \frac{\partial^2}{\partial(\beta\epsilon_i)^2} (a \ln(1 + a z e^{-\beta\epsilon_i})) \quad (69)$$

و یا

$$(\Delta n_i)^2(a) = \frac{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}}{(z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} + a)^2} = z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} \bar{n}_i^2. \quad (70)$$

بنابراین افت و خیز نسبی برابر است با:

$$\frac{\overline{n_i^2} - \bar{n}_i^2}{\bar{n}_i^2} = z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}. \quad (71)$$

از این به بعد بهتر است که فرم صریح  $\bar{n}_i$  را برای فرم یون ها و بوزون ها جداگانه حساب کنیم.

fugacity^

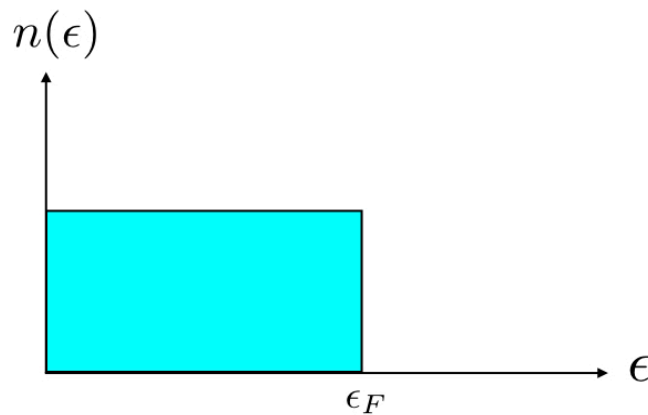
## ۱.۵ فرمیون ها

برای فرمیون ها داریم:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} + 1} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1} \quad (۷۲)$$

از آنجا که برای فرمیون ها  $0 \leq \bar{n}_i \leq 1$  نتیجه می گیریم که محدوده تغییرات  $z$  برای فرمیون ها ناحیه  $0 \leq z < \infty$  است. توزیع ۷۲ به توزیع فرمی-دیراک موسوم است. رابطه ۷۱ هم چنین نشان می دهد که کمترین مقدار افت و خیز جمعیت برای لایه های پر و کم انرژی و بیشترین افت و خیز برای لایه های خالی و پرانرژی است. منحنی تغییرات  $\bar{n}_i$  بر حسب  $\epsilon$  برای فرمیون ها در دمای صفر به صورت نشان داده شده در شکل (۳) است که در آن انرژی فرمی نامیده می شود و به شکل زیر تعریف می شود:

$$\epsilon_F := \mu(T = 0).$$

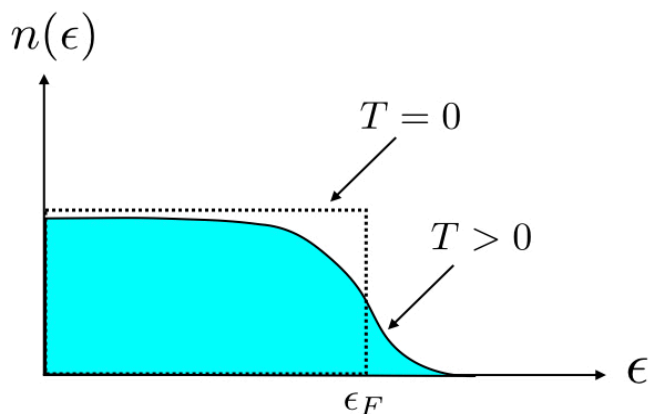


شکل ۳: توزیع فرمی دیراک در دمای صفر: تمام ترازهای زیر سطح فرمی پر و بالای سطح فرمی خالی هستند.

در شکل (۳) دیده می شود که در دمای صفر تمام لایه های زیر سطح فرمی پر و تمام لایه های بالای آن خالی هستند. با افزایش دما توزیع



ذرات هموارتر شده و به شکل زیر در می آید که به این معناست که ذرات نزدیک سطح فرمی در اثر گرفتن انرژی گرمایی به ترازهای بالاتر می روند. شکل (۴).



شکل ۴: توزیع فرمی دیراک در دمای کمی بالاتر از صفر: ذرات لایه های نزدیک و زیر سطح فرمی را ترک کرده و به لایه های بالای سطح فرمی می روند.

باید دقت کنید که در دمای بالاتر از صفر دیگر  $\mu$  برابر با  $\epsilon_F$  نیست، بلکه  $\mu$  و در نتیجه  $z$  کوچک تر می شود و جمله  $z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}$  در مقایسه با ۱ در عبارت ۷۲ بزرگ تر می شود و در نتیجه توزیع ذرات به سمت تابع توزیع بولتزمن یعنی  $n_i \propto e^{-\beta\epsilon_i}$  میل می کند. می توان یک دما موسوم به دمای فرمی تعریف کرد که از رابطه

$$T_F := \frac{\epsilon_F}{k} \quad (۷۳)$$

بدست می آید. هرگاه که  $T \leq T_F$  باشد، معنی اش این است که افت و خیزهای حرارتی قادر نیستند که ترازهای پایین انرژی را خالی کنند و به بالای سطح فرمی ببرند. بنا براین در این دما تنها جمعیت لایه های نزدیک سطح فرمی تغییر می کند. اما وقتی که  $T \approx T_F$  یا  $T \gtrsim T_F$  است، انرژی حرارتی آنقدر بزرگ می شود که حتی ذرات موجود در لایه های پایین انرژی تحریک شده و به بالای سطح فرمی می روند. هرچه که  $T$

بزرگتر از  $T_F$  باشد، توزیع ذرات به توزیع کلاسیکی بولتزمن نزدیک و اثرات کوانتومی کمتر می شود.

## ۲.۵ بوزون ها

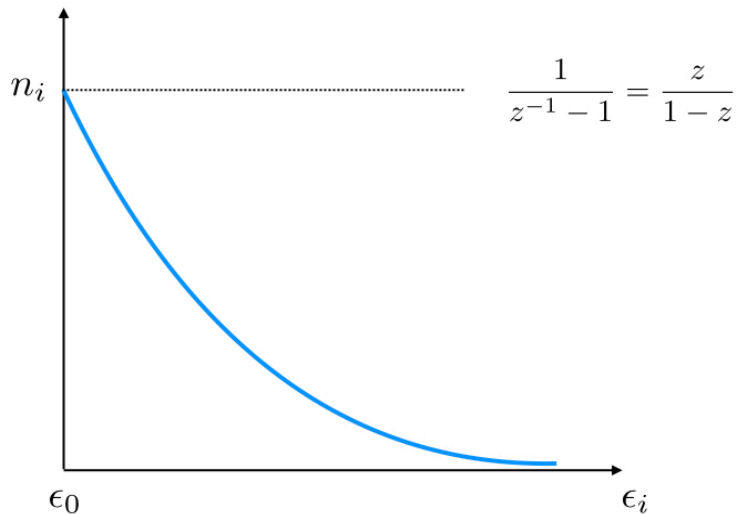
برای بوزون ها داریم:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} - 1}. \quad (۷۴)$$

از آنجا که برای بوزون ها  $0 < z < e^{\beta\epsilon_0}$  که در آن انرژی حالت پایه یک ذره است، همواره می توان بدون اینکه هیچ خاصیت فیزیکی را تغییر دهیم جمله ثابتی را به هامیلتونی ذره اضافه کنیم به طوری که مقدار  $\epsilon_0$  برابر با صفر شود. در این صورت محدوده تغییرات  $z$  عبارت خواهد بود از  $0 \leq z \leq 1$ .

رابطه ۷۳ نشان می دهد که در یک دمای معین هر چه که انرژی  $\epsilon_i$  بیشتر باشد،  $\bar{n}_i$  کمتر می شود.

تغییرات  $\bar{n}_i$  بر حسب انرژی برای یک مقدار معین  $z$  در شکل (۵) نشان داده شده است.



شکل ۵: متغیر  $z$  بر حسب انرژی.

مقدار  $z$  از رابطه  $z = z(N, T, \dots)$  بستگی به دما و دیگر پارامترها نظیر چگالی دارد. بنابراین شکل (۵) برای یک  $z$  عمومی رسم شده است. تحت شرایطی  $z$  می تواند مساوی یک شود. در این شرایط تعداد ذرات موجود در تراز پایه به سمت بی نهایت میل می کند. در این حالت می گوئیم چگالش بوز - اینشتین رخ داده است. آنچه که در این فصل گفتیم خصوصیات کلی یک سیستم از ذرات یکسان بدون برهم کنش با یکدیگر بود. هیچ نوع فرض خاصی در باره سطوح انرژی یک ذره یعنی  $\epsilon_i$  ها نکردیم. در درس های آینده به ترتیب خصوصیات ترمودینامیکی یک گاز ایده آل فرمیونی و یک گاز ایده آل بوزونی را بررسی می کنیم.

## ۶ مسئله ها

### ■ مسئله اول

یک ذره اسپین یک دوم در میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = B\hat{n}$  قرار دارد. هامیلتونی برهم کنش این ذره برابر است با:

$$H = -\gamma \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (۷۵)$$

ذره در دمای  $T$  به تعادل رسیده است.

الف- ماتریس چگالی این ذره را تعیین کنید.

ب- تابع پارش ذره را بدست آورید.

پ- متوسط انرژی ذره و هم چنین انترپی آن را مشخص کنید.

### ■ مسئله دوم

دو ذره اسپین یک دوم در میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = B\hat{n}$  قرار دارند. هامیلتونی برهم کنش این ذرات برابر است با:

$$H = -\gamma (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{B} + \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{B}) \quad (۷۶)$$

این دو ذره در دمای  $T$  به تعادل رسیده اند.

الف- ماتریس چگالی این سیستم دو ذره ای را تعیین کنید.

ب- تابع پارش این سیستم را بدست آورید.

پ- متوسط انرژی سیستم و هم چنین انتروپی آن را مشخص کنید.

■ مسئله سوم

دو ذره اسپین یک دوم در میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = B\hat{x}$  قرار دارند. هامیلتونی برهم کنش این ذرات برابر است با:

$$H = -\gamma(\sigma_1 \cdot \mathbf{B} + \sigma_2 \cdot \mathbf{B}) - J\sigma_{z,1}\sigma_{z,2} \quad (77)$$

این دو ذره در دمای  $T$  به تعادل رسیده اند.

الف- ماتریس چگالی این سیستم دو ذره ای را تعیین کنید.

ب- تابع پارش این سیستم را بدست آورید.

پ- متوسط انرژی سیستم و هم چنین انتروپی آن را مشخص کنید.

■ مسئله چهارم

دو ذره اسپین یک دوم در میدان مغناطیسی  $\mathbf{B} = B\hat{n}$  قرار دارند. هامیلتونی برهم کنش این ذرات برابر است با:

$$H = -\gamma(\sigma_1 \cdot \mathbf{B} + \sigma_2 \cdot \mathbf{B}) - J\sigma_1 \cdot \sigma_2 \quad (78)$$

این دو ذره در دمای  $T$  به تعادل رسیده اند.

الف- ماتریس چگالی این سیستم دو ذره ای را تعیین کنید.

ب- تابع پارش این سیستم را بدست آورید.

پ- متوسط انرژی سیستم و هم چنین انتروپی آن را مشخص کنید.

#### ■ مسئله پنجم

یک مسئله خیالی ولی آموزنده: برای سادگی سیستمی متشکل از ۳ ذره در نظر بگیرید که در یک چاه پتانسیل قرار دارند. این چاه دارای سه تراز انرژی

$$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$$

با انرژی های

$$E_0 = 0, \quad E_1 = \epsilon, \quad E_2 = 2\epsilon$$

است که در آن  $\epsilon$  یک پارامتر انرژی است. ذرات با هم برهم کنش نمی کنند.

الف- اگر این ذرات را ذرات کلاسیک بگیریم، انرژی متوسط این سیستم سه ذره ای در دمای  $T$  چقدر است؟

ب- گر این ذرات را ذرات کوانتومی بگیریم، انرژی متوسط این سیستم سه ذره ای در دمای  $T$  چقدر است؟

#### ■ مسئله ششم

یک مسئله خیالی دیگر: برای سادگی سیستمی متشکل از  $N$  ذره در نظر بگیرید که در یک چاه پتانسیل قرار دارند. این چاه دارای دو تراز

انرژی

$$|0\rangle, |1\rangle$$

با انرژی های

$$E_0 = 0, \quad E_1 = \epsilon,$$

است که در آن  $\epsilon$  یک پارامتر انرژی است. این ذرات باهم برهم کنش نمی کنند.

الف- اگر این ذرات را ذرات کلاسیک بگیریم، انرژی متوسط این سیستم بس ذره ای در دمای  $T$  چقدر است؟

ب- گر این ذرات را ذرات کوانتومی بگیریم، انرژی متوسط این سیستم بس ذره ای در دمای  $T$  چقدر است؟

#### ■ مسئله ششم

یک مسئله خیالی دیگر: برای سادگی سیستمی متشکل از 3 ذره فرمیون بدون اسپین در نظر بگیرید که در یک چاه پتانسیل قرار دارند. این

چاه دارای 4 تراز انرژی

$$|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |4\rangle$$

با انرژی های

$$E_1 = \epsilon, \quad E_2 = 2\epsilon, \quad \dots, \quad E_3 = 3\epsilon, \quad E_4 = 4\epsilon$$

است که در آن  $\epsilon$  یک پارامتر انرژی است. این ذرات باهم برهم کنش نمی کنند.

الف- اگر این ذرات را ذرات کلاسیک بگیریم، انرژی متوسط این سیستم بس ذره ای در دمای  $T$  چقدر است؟

ب- گر این ذرات را ذرات کوانتومی بگیریم، انرژی متوسط این سیستم بس ذره ای در دمای  $T$  را حساب کنید.

پ- در دمای صفر و در دماهای بسیار زیاد مقدار انرژی متوسط را بدست آورید.