

مکانیک آماری کوانتومی - بخش اول: ذرات یکسان

وحید کریمی پور - دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شریف

۱۰ اردیبهشت ۱۴۰۴

۱ مقدمه

تا کنون نمونه هایی از دستگاه های کوانتومی را هم در آزمایش میکروکانونیک و هم در آزمایش کانونیک مطالعه کرده ایم. به عنوان مثال در محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه جامدات، طیف نوسانگرها را مطابق مکانیک کوانتومی به صورت گسسته در نظر گرفتیم و توانستیم نشان دهیم که دقیقاً به دلیل این گسسته بودن سطوح انرژی، رفتار ظرفیت گرمایی جامدات مطابق در دماهای کم با مشاهدات تجربی تطابق دارد. هم چنین در مطالعه گاز ایده آل گسسته بودن سطوح انرژی را در نظر گرفته ایم. در محاسبه تابع پارش گاز ایده آل نیز ویژه حالت های انرژی یک ذره را با حل معادله شرودینگر در نظر گرفتیم و روی همه ویژه حالت ها جمع زدیم. پس چه چیز باعث شده است که نام این فصل را مکانیک آماری کوانتومی بگذاریم؟ چه ویژگی جدید کوانتومی ای را می خواهیم بررسی کنیم که قبلاً در نظر نگرفته ایم؟

پاسخ اش این است که در این فصل اصل طرد پاولی را در نظر می گیریم و همین امر باعث می شود که هم از نظر محاسباتی و هم از نظر پدیده شناسی با نتایج کاملاً نوبنی در مطالعه دستگاه های متشکل از ذرات یکسان مواجه شویم. اما پیش از آغاز درس یک سوال را می بایست پاسخ دهیم. مگر نه این است که همواره ذرات تشکیل دهنده یک گاز یا جامد یا مایع را یکسان گرفته ایم؟ پس چرا در عنوان این فصل بر یکسان بودن ذرات تاکید می کنیم؟ پاسخ اش این است که اگر چه ذرات یک گاز یکسان هستند، اما از لحاظ نظری و البته تحت شرایطی می توانیم هویت تک تک ذرات را معین کنیم و آنها را از هم تمیز بدهیم ولی شرایطی هم وجود دارد که این تمیز بین ذرات مختلف امکان پذیر نیست. این شرایط

ویژه وقتی پیش می آید که طول موج دوبروی ذرات از فاصله میانگین آنها بیشتر شود یا با آن قابل مقایسه شود. طول موج دوبروی ذرات در یک دمای معین برابر است با

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}},$$

و فاصله میانگین دو ذره نیز برابر است با

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}} = n^{-\frac{1}{3}}. \quad (1)$$

بنابراین پارامتری که تمیزناپذیری ذرات را تعیین می کند برابر است با:

$$n\lambda^3. \quad (2)$$

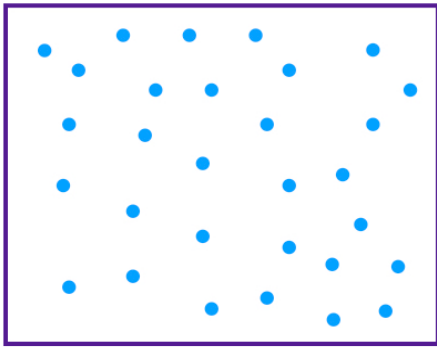
در این شرایط هویت تک تک ذرات قابل تعیین نیست و ذرات عملاً تمیز ناپذیرند. این وضعیت در سمت راست شکل (۱) نشان داده شده است. وقتی که ذرات تمیز پذیرند اصطلاحاً می گوییم در محدوده کلاسیک یا غیر واگن^۱ هستیم و وقتی که ذرات تمیز ناپذیرند می گوییم که در محدوده کوانتومی و واگن^۲ هستیم. بنابراین به طور کیفی وضعیت های زیر را داریم:

■ وقتی که $n\lambda^3 \ll 1$ است، ذرات را می توان تمیز پذیر گرفت و مکانیک آماری کلاسیک به خوبی توصیف کننده رفتار گاز است.

■ وقتی که $n\lambda^3 \gtrsim 1$ است، ذرات را تمیز پذیر نیستند، اصل طرد پاولی رفتار گاز را تغییر می دهد و مکانیک آماری کوانتومی توصیف کننده رفتار گاز است.

از آنجا که یک گاز وقتی واگن می شود، آثار اصل طرد پاولی که یک اثر کوانتومی است در آن اهمیت پیدا می کند به جای محدوده غیرواگن و واگن بعضی اوقات از اصطلاحات کلاسیک و کوانتومی نیز استفاده می شود. این که مبانی نظری مکانیک آماری کلاسیک چه فرق عمده ای با مکانیک آماری کوانتومی دارد در بخش بعدی توضیح داده می شود. همین مبانی اصلی و نظری است که باعث می شود گاز کوانتومی رفتار کاملاً متفاوتی از گاز کلاسیک از خود نشان دهد.

Non-degenerate^۱
Degenerate^۲



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



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

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 غیرواگن و گاز دوم واگن است.

۲ میکروحالت های کوانتومی

اما این تمیز پذیری یا تمیزناپذیری چه چیزی را در مکانیک آماری تغییر می دهد؟ آیا اصل اساسی مکانیک آماری یا نوع آنزامل را تغییر می دهد؟ پاسخ این است که هیچ کدام از اصول اساسی یا فرمالیزم مکانیک آماری تغییر نمی کنند. تنها چیزی که تغییر می کند نحوه تعریف و تعیین میکروحالت هاست. در محدوده غیرواگن اگر بخواهیم موقعیت هر ذره را در فضای فاز نشان دهیم یک میکروحالت به صورت

$$(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N)$$

نشان داده می شود که در آن $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ موقعیت ذره i ام در فضای فاز است. اگر هم بخواهیم موقعیت یک ذره را با حالت کوانتومی اش نشان دهیم، یک میکروحالت با

$$(\epsilon_1, \dots, \epsilon_N)$$

نشان می دهیم که در آن ϵ_i نشان دهنده انرژی یا همه اعداد کوانتومی ذره i ام است. آنچه که مهم است این است که هر ذره یک برجسب فرضی دارد که موقعیت آن را مشخص می کند و می توانیم به لحاظ نظری بگوییم که هر ذره کجای فضای فاز است یا در کدام حالت کوانتومی است.

اما در محدوده واگن که طبیعتاً موقعیت هر ذره را می بایست با اعداد کوانتومی اش نشان دهیم دیگر توصیف یک میکروحالت به صورت قبل نیست بلکه تنها می توانیم بگوییم که در هر حالت کوانتومی چه تعداد ذره وجود دارد. بنابراین میکروحالت های یک سیستم واگن به صورت زیر نشان داده می شوند:

$$(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots)$$

که در آن n_i تعداد ذراتی است که در حالت i ام هستند. همین نحوه تعریف میکروحالت هاست که باعث تفاوت اساسی در مکانیک آماری یک گاز واگن (کلاسیک) و یک گاز غیرواگن (کوانتومی) می شود و اثرات عمیق خود را در تابع پارش و نهایتاً در خواص ترمودینامیکی گاز باقی می گذارد.

■ **نکته یک:** تنها در مطالعه گازها و مایعات است که تمیزناپذیری ذرات و اصل طرد پاولی و به تبع آن مکانیک آماری کوانتومی به شکلی که در این درس یاد خواهیم گرفت اهمیت پیدا می کند، چرا که در جامدات هسته اتم ها همگی در جای خود جایگزیده هستند و با همان جای خود تمیز داده می شوند. این موضوع وقتی مثلاً خواص مغناطیسی ناشی از هسته ها را بررسی می کنیم در نظر گرفته می شود. اما باز هم برای جامدات وقتی رفتار گاز الکترونی درون جامد را مطالعه می کنیم تمیزناپذیری ذرات اهمیت دارد.

■ **نکته دو:** ممکن است خواننده سوال کند اگر در مکانیک آماری کوانتومی فرمیون ها و بوزون ها را بررسی می کنیم، چرا درجه آزادی اسپینی آنها را در نظر نمی گیریم. در واقع این کار برای سادگی است به این معنا که فرض کرده ایم درجه آزادی اسپینی این ذرات به اصطلاح یخ زده است. مثلاً می توانیم فرض کنیم که یک میدان مغناطیسی خیلی قوی وجود دارد که همه اسپین ها را هم جهت کرده و در نتیجه درجه آزادی اسپین حرکتی ندارد. در شرایطی غیر از این می بایست درجه آزادی اسپین را نیز در نظر گرفت. به عنوان مثال اگر میدان مغناطیسی خارجی انرژی ذرات اسپین بالا و اسپین پایین را از هم جدا کرده باشد، انگاه به جای n_k از $n_{k,\uparrow}$ و $n_{k,\downarrow}$ نام خواهیم برد که اولی تعداد ذرات با تکانه k و اسپین بالا و دومی تعداد ذرات با تکانه k و اسپین پایین است. انرژی این دو حالت نیز می تواند متفاوت

بوده و به ترتیب $\epsilon_{k,\uparrow}$ و $\epsilon_{k,\downarrow}$ باشد.

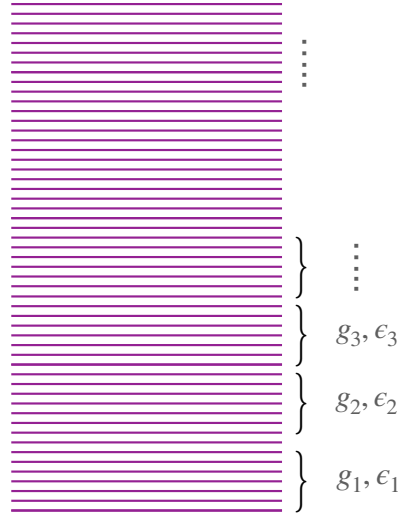
۳ مکانیک آماری ذرات یکسان در آنزامل میکروکانونیک

اولین تماس ما با مکانیک آماری از طریق آنزامل میکروکانونیک بوده است که سیستم های با حجم، تعداد ذرات و انرژی ثابت را در نظر گرفته و به عنوان اصل موضوع بیان می کند تمام میکروحالت های چنین سیستمی با احتمال یکسان اشغال می شوند. البته هر دستگاهی را می توان با هر کدام از آنزامل های سه گانه مطالعه کرد. در این بخش سعی می کنیم که مکانیک آماری ذرات یکسان را نخست با استفاده از آنزامل میکروکانونیک بفهمیم. در بخش بعدی به مطالعه همین دستگاه در آنزامل کانونیک خواهیم پرداخت. در این درس هدف ما فقط فرمول بندی کلی مکانیک آماری ذرات یکسان است. در درس آینده به مطالعه نتایج این فرمول بندی خواهیم پرداخت.

در آنزامل میکروکانونیک، انرژی مقدار ثابتی دارد و تمام میکروحالت ها نیز با احتمال مساوی اشغال می شوند. بنابراین کافی است تعداد کل میکروحالت های در دسترس را بشماریم و سپس آنتروپی را حساب کنیم تا بقیه خواص ترمودینامیکی را بتوانیم تعیین کنیم. معمولاً شمارش تعداد کل میکروحالت ها برای یک سیستم بس ذره ای که دارای برهم کنش است بسیار دشوار است اما ما در اینجا با سیستمی بس ذره ای سروکار داریم که برهم کنشی بین ذرات آن وجود ندارد و تنها قید ناشی از اصل طرد پاولی یک نوع برهمکنش موثر بین آنها ایجاد می کند. با این وجود می توان همچنان تعداد کل میکروحالت را تعیین کرد. از آنجا که با یک گاز ایده آل سروکار داریم نخست می بایست ویژه حالت های انرژی یک ذره را تعیین کنیم. در حد ترمودینامیک وقتی که حجم بسیار بزرگ می شود، این ویژه حالت های انرژی به هم فشرده می شوند و مثل شکل (۲) به یک پیوستار تبدیل می شوند.

■ **تمرین:** برای الکترون هایی که در یک فلز با ابعاد یک سانتی متری قرار دارند، اندازه انرژی ها در چه حدودی است؟ اگر انرژی کل برابر با ۱۰۰ الکترون ولت باشد، آیا این سطوح انرژی را می توانیم خیلی نزدیک به هم و مطابق با شکل (۲؟) در نظر بگیریم؟

مسئله شمارش تعداد میکروحالت ها برای یک پیوستار از حالت ها را می توان به شکل زیر حل کرد. کل ویژه حالت ها را به گروه هایی که انرژی نزدیک به هم دارند تقسیم می کنیم. یک گروه را با اندیس $i = 1, 2, 3, \dots$ نشان می دهیم. در هر گروه مثل i ، g_i تا ویژه حالت وجود دارد که همه انرژی نزدیک به هم دارند. انرژی حالت های گروه i ام را با ϵ_i نشان می دهیم. یک هیئت را در نظر بگیرید که در آن هر سلول مثل



شکل ۲: در مقایسه با انرژی های ماکروسکوپی (به کوچکی چند ده یا چند صد الکترون ولت) حالت های انرژی یک تک ذره تقریباً به هم پیوسته هستند. بنابراین برای حل یک مسئله ترکیبیاتی برای آزمایش میکروکانونیک یعنی دانستن این که N ذره در چه تعداد آرایش می توانند در این سطوح انرژی قرار بگیرند، سطوح انرژی را به گروه های کوچکی تقسیم می کنیم که هر کدام یک انرژی متوسط دارند و هر گروه را یک سلول یا خانه می نامیم. یک سلول مثل سلول i ام، دارای g_i تراز است که انرژی همه آنها ϵ_i است.

i تعداد n_i ذره را در خود جای داده است. برای هر هیئتی مثل این، قیود زیر برقرارند:

$$\begin{aligned} n_1 + n_2 + \dots &= N \\ n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots &= U. \end{aligned} \quad (۳)$$

اما این هیئت خاص خود متناظر با تعداد زیادی میکروحالت است، زیرا ذرات درون هرکدام از سلول ها می توانند به طرق مختلفی در ترازهای انرژی آن سلول قرار بگیرند. تعداد میکروحالت های وابسته به این هیئت را با

$$\Omega(n_1, n_2, \dots)$$

نشان می دهیم. بنابراین تعداد کل میکروحالت ها برابر است با:

$$\Omega(U, V, N) = \sum_{n_1, n_2, \dots}^I \Omega(n_1, n_2, \dots) \quad (۴)$$

که در آن نماد $\sum'$ به معنای جمع روی تمام هیئت هایی است که قیدهای (۳) را رعایت می کنند. اما نکته این است که $\Omega(n_1, n_2, \dots)$ تابعی است که نسبت به متغیرهایش به شدت تغییر می کند و به همین سبب جمع بالا را می توان با تقریب بسیار خوب (تقریبی که در حد ترمودینامیک دقیق می شود) با بزرگترین جمله طرف راست جایگزین کرد و نوشت:

$$\Omega(U, V, N) = \Omega(\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots) \quad (۵)$$

که در آن $\bar{n}_i$ ها اعدادی هستند که عبارت $\Omega(n_1, n_2, \dots)$ به ازای آنها بیشترین مقدار خود را دارد. به این ترتیب عبارت آنترپی برابر خواهد شد با:

$$S(U, V, N) = k \ln \Omega(\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots) \quad (۶)$$

بنابراین مسئله ای که با آن روبرو هستیم این است که برای هر نوع ذره ای که داریم (فرمیون، بوزون یا ذره بولتزمن) عبارت $\Omega(n_1, n_2, \dots)$ را حساب کنیم و سپس با توجه به قیود (۳) مقدار ماکزیمم آن را حساب کنیم. به این ترتیب آنترپی و بقیه کمیت های ترمودینامیک را بدست خواهیم آورد. از جمله بدست می آوریم که در حالت تعادل در هر سلول چه تعداد ذره جای گرفته است. اما عبارت $\Omega(n_1, n_2, \dots)$ را چگونه باید حساب کنیم؟ راه ساده ای وجود دارد. به یک گروه مثل i با g_i تراز انرژی توجه می کنیم که در آن n_i تا ذره وجود دارد. تعداد میکروحالت ها (یعنی تعداد روش هایی که می توان n_i تا ذره را در g_i تا تراز پخش کرد) را با $\omega(g_i, n_i)$ نشان می دهیم. در این صورت خواهیم داشت:

$$\Omega(n_1, n_2, \dots) = \omega(g_1, n_1) \omega(g_2, n_2) \dots = \prod_i \omega(g_i, n_i). \quad (۷)$$

و در نتیجه

$$S(U, V, N) = k \ln \Omega(\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots) = k \sum_i \ln \omega(g_i, \bar{n}_i). \quad (۸)$$

تا اینجا راجع به نوع ذرات و اینکه این ذرات فرمیون، بوزون یا ذرات بولتزمن هستند حرفی نزده ایم. فعلا هم نیازی به این کار نداریم و می خواهیم این تجزیه تحلیل را تا جاییکه ممکن است به صورت کلی پیش ببریم. برای ماکزیمم کردن $\Omega(n_1, n_2, \dots)$ با توجه به قیود (۳) از روش لاگرانژ^۳ استفاده می کنیم و تابع زیر را تعریف می کنیم:

$$F(n_1, n_2, \dots) = \ln \Omega(n_1, n_2, \dots) + \beta \mu (n_1 + n_2 + \dots) - \beta (\epsilon_1 n_1 + \epsilon_2 n_2 + \dots)$$

^۳ روش لاگرانژ چند سطر بعد توضیح داده شده است.

$$= \sum_i \ln \omega(g_i, n_i) - \beta(\epsilon_i - \mu)n_i. \quad (9)$$

پارامترهای β و $\beta\mu$ ضرایب لاگرانژ هستند. نام این پارامترها را با پیش دستی و برای سادگی چنین انتخاب کرده ایم. (می توانستیم آنها را به سادگی λ_1 و λ_2 بنامیم. در این صورت در انتهای محاسبه و با مشاهده تابع احتمال متوجه می شدیم که نام مناسب برای این پارامترها همین هایی است که اکنون انتخاب کرده ایم.)

■ یک توضیح کوتاه در باره روش لاگرانژ: هرگاه بخواهیم نقطه اکسترمم تابعی مثل

$$f(x, y, \dots)$$

را با در نظر گرفتن قیدهایی مثل

$$\phi_i(x, y, \dots) = 0, \quad i = 1, \dots, K$$

پیدا کنیم، قضیه لاگرانژ بیان می کند که به جای آن می توانیم تابعی مثل

$$F(x, y, \dots, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_K) := f(x, y, \dots) - \sum_{i=1}^K \lambda_i \phi_i(x, y, \dots)$$

را که در آن همه متغیرها اکنون مستقل و آزاد هستند، در نظر گرفته و مشتق این تابع را نسبت به همه متغیرها برابر با صفر قرار دهیم.

در این صورت از رابطه $\frac{\partial F}{\partial n_i} = 0$ بدست می آوریم:

$$\left. \frac{\partial \ln \omega(g_i, n_i)}{\partial n_i} \right|_{n_i = \bar{n}_i} = \beta(\epsilon_i - \mu) \quad \forall i. \quad (10)$$

این رابطه n_i ها را در حال تعادل به دست می دهد که آن ها را با $\bar{n}_i$ نشان می دهیم. تا اینجا همه چیز را به صورت کلی گفتیم. حال وقت آن رسیده است که عبارت $\omega(g_i, n_i)$ را پیدا کنیم و این عبارت البته بستگی به نوع ذرات دارد و در بخش های زیر برای هر سه نوع ذره این عبارت را حساب می کنیم و با استفاده از (10) $\bar{n}_i$ ها را حساب می کنیم.

۱.۳ فرمیون ها

فرمیون ها دارای این خاصیت اند که در هر تراز صفر یا یک ذره قرار می گیرد. بنابراین اگر n تا ذره داشته باشیم که بخواهیم آن ها را در g تراز قرار دهیم تعداد راه های این کار برابر است با:

$$\omega_f(g, n) = \frac{g!}{(g-n)!(n)!}. \quad (۱۱)$$

در نتیجه با استفاده از رابطه (۱۰) و تقریب استرلینگ بدست می آوریم:

$$\ln \omega_f(g, n) = g \ln g - (g-n) \ln(g-n) - n \ln n \quad (۱۲)$$

و از آنجا

$$\frac{\partial \ln \omega_f(g, n)}{\partial n} = \ln\left(\frac{g-n}{n}\right), \quad (۱۳)$$

و بنابراین با توجه به رابطه (۱۰)

$$\ln\left(\frac{g_i - \bar{n}_i}{\bar{n}_i}\right) = \beta(\epsilon_i - \mu). \quad (۱۴)$$

در نتیجه براحتی معلوم می شود که

$$\bar{n}_i = \frac{g_i}{1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}. \quad (۱۵)$$

با در نظر گرفتن پیوستگی انرژی ها بدست می آوریم:

$$N = \int d\epsilon \frac{g(\epsilon)}{1 + z^{-1} e^{\beta\epsilon}} \quad (۱۶)$$

و

$$U = \int d\epsilon \frac{g(\epsilon)\epsilon}{1 + z^{-1} e^{\beta\epsilon}} \quad (۱۷)$$

که در آن $z = e^{\beta\mu}$ و $g(\epsilon)$ تابع چگالی حالت هاست. در درسهای بعدی تابع چگالی حالت ها را تعیین کرده و این توابع را به طور دقیق محاسبه می کنیم. در حالی که این روابط کلی هستند، تابع چگالی انرژی یعنی $g(\epsilon)$ وابسته به بعد است. جایگذاری تابع چگالی انرژی با جزییاتی که در باره حجم و جرم و ثابت های دیگر مثل ثابت پلانک و نظایر آن دارد، قیافه این انتگرال ها را کمی پیچیده می کند. ولی اگر به همین شکل به آنها نگاه کنیم متوجه ساختار ساده آنها می شویم.

در آنزامل میکروکانیک کمیت اصلی که باید محاسبه کنیم آنتروپی به عنوان تابعی از تعداد ذرات، حجم و انرژی است. با توجه به رابطه (۱۱) و هم چنین با استفاده از تقریب استرلینگ می نویسیم:

$$\begin{aligned} S &= k \ln \Omega = k \sum_i \ln \omega(g_i, \bar{n}_i) = k \sum_i (g_i \ln g_i - (g_i - \bar{n}_i) \ln(g_i - \bar{n}_i) + \bar{n}_i \ln \bar{n}_i) \\ &= k \sum_i \left(g_i \ln \frac{g_i}{g_i - \bar{n}_i} + \bar{n}_i \ln \frac{g_i - \bar{n}_i}{\bar{n}_i} \right) \end{aligned} \quad (18)$$

در طرف راست را لگاریتم ها را چنان بازنویسی کرده ایم که بتوانیم از روابطی که قبلا بدست آورده ایم استفاده کنیم. این روابط این ها بودند:

$$\frac{g_i}{g_i - \bar{n}_i} = 1 + ze^{-\beta\epsilon_i} \quad (19)$$

$$\ln \frac{g_i - \bar{n}_i}{\bar{n}_i} = \beta(\epsilon_i - \mu) \quad (20)$$

بنابراین آنتروپی برابر می شود با:

$$\begin{aligned} S &= k \sum_i [g_i \ln(1 + ze^{-\beta\epsilon_i}) + \beta \bar{n}_i (\epsilon_i - \mu)] \\ &= k \sum_i [g_i \ln(1 + ze^{-\beta\epsilon_i})] + k\beta U - k\beta \mu N. \end{aligned} \quad (21)$$

در حد پیوسته این رابطه تبدیل می شود به:

$$S = k \int d\epsilon g(\epsilon) \ln(1 + ze^{-\beta\epsilon}) + k\beta U - k\beta \mu N. \quad (22)$$

به یاد بیاوریم که در آنزامل میکروکانونیک آنتروپی به عنوان تابعی از N, U, V که پارامترهای معین سیستم ترمودینامیکی هستند داده می شود. سپس از تابع آنتروپی بقیه مشخصات ترمودینامیکی سیستم مثل فشار و دما و نظایر آن بدست می آید. در این مورد توانسته ایم که این بستگی را به صورت ضمنی نشان دهیم به این معنا که تعداد کل ذرات، انرژی و آنتروپی همه به عنوان تابعی از پارامتر $z = e^{\beta\mu}$ نوشته شده اند. یعنی بدست

آورده ایم:

$$\begin{aligned} N &= N(z, V, T) \\ U &= U(z, V, T) \\ S &= S(z, V, T). \end{aligned} \quad (23)$$

با حذف کردن پارامتر z بین این سه عبارت می توانیم همه چیز را بر حسب مشخصات ترمودینامیکی ماکروسکوپیک بدست آوریم. این کاری است که در درس آینده انجام خواهیم داد.

۲.۳ بوزون ها

اگر به شکل (۳) نگاه کنیم، متوجه می شویم که تعداد راه هایی که می توانیم n تا ذره بوزونی را در g خانه یک تراز انرژی جای دهیم، برابر است با:

$$\omega_b(g, n) = \frac{(n + g - 1)!}{n!(g - 1)!}. \quad (24)$$

با محاسبه لگاریتم $\omega_b(g, n)$ می توانیم مقدار ماکزیمم n_i را حساب کرد:

$$\ln \omega_b(g, n) = (n + g - 1) \ln(n + g - 1) - n \ln n - (g - 1) \ln(g - 1) \quad (25)$$

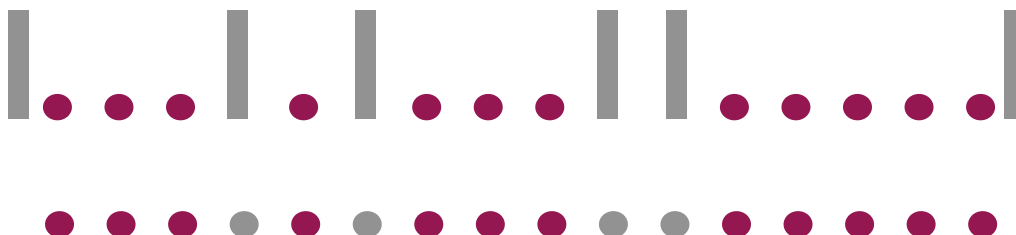
و در نتیجه

$$\frac{\partial \ln \omega_b(g, n)}{\partial n} = \ln\left(\frac{n + g - 1}{n}\right) \approx \ln\left(\frac{n + g}{n}\right). \quad (26)$$

در تساوی آخر از این تقریب استفاده کرده ایم که g_i ها خیلی بزرگتر از 1 هستند. بنابراین با استفاده از رابطه (۱۰) بدست می آوریم

$$\bar{n}_i = \frac{g_i}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} - 1} \quad (27)$$

از آنجا که انرژی ها پیوسته هستند و با توجه به آنچه که در مورد استشنا بودن حالت پایه گفتیم تعداد کل ذرات برابر می شود با:



$$g = 5, n = 12$$

$$(3, 1, 3, 0, 5)$$

شکل ۳: تعداد راه های قرار دادن n گوی در g خانه برابر است با تعداد راه هایی که می توان $g - 1$ گوی را از میان $n + g - 1$ گوی انتخاب کرد و آنها را به عنوان مکان دیواره های سلول ها انتخاب کرد. اعداد داخل پرانتز نشان دهنده تعداد گوی ها در هرکدام از سلول ها در این آرایش خاص است.

$$N = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_0} - 1} + \int d\epsilon \frac{g(\epsilon)}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1} \quad (28)$$

و انرژی کل نیز برابر می شود با:

$$U = \frac{\epsilon_0}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_0} - 1} + \int d\epsilon \frac{g(\epsilon)\epsilon}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} - 1}. \quad (29)$$

■ **تمرین:** عبارت آنتروپی را برای یک گاز بوزونی ایده آل بر حسب z بنویسید.

بازهم یادآوری می کنیم که در آنزامل میکروکانونیک آنتروپی به عنوان تابعی از N, U, V که پارامترهای معین سیستم ترمودینامیکی هستند داده می شود. سپس از تابع آنتروپی بقیه مشخصات ترمودینامیکی سیستم مثل فشار و دما و نظایر آن بدست می آید. در این مورد توانسته ایم که این بستگی را به صورت ضمنی نشان دهیم به این معنا که تعداد کل ذرات، انرژی و آنتروپی همه به عنوان توابعی از پارامتر $z = e^{\beta\mu}$ نوشته شده اند. بین این سه عبارت می توانیم همه چیز را بر حسب مشخصات ترمودینامیکی ماکروسکوپیک بدست آوریم. این کاری است که در درس آینده انجام

خواهیم داد.

۳.۳ ذرات ماکسول-بولتزمن

نخست باید توجه کنیم که در طبیعت ذره ای به نام ذره ماکسول-بولتزمن وجود ندارد. ذرات یا بوزون هستند یا فرمیون. پس منظور ما از ذرات ماکسول-بولتزمن چیست؟ منظور ما همان ذرات یکسان بوزونی یا فرمیونی ولی در دماهای بالا یا چگالی های کم است. در این شرایط یعنی وقتی که

$$g_i \gg n_i \quad \forall i$$

است، حالت حدی زیر پیش می آید:

$$\omega_b(g, n) \equiv \frac{(n+g-1)!}{n!(g-1)!} = \frac{(n+g-1)(n+g-2) \cdots (g)}{n!} \approx \frac{g^n}{n!}. \quad (30)$$

بنابراین اگر این عبارت های جدید را با $\omega_0(g, n)$ نشان دهیم خواهیم داشت:

$$\omega_0(g, n) = \frac{g^n}{n!}. \quad (31)$$

بنابراین مقداری از n که این عبارت را ماکزیمم می کند از رابطه زیر بدست می آید:

$$\frac{\partial \ln \omega_0(g, \bar{n})}{\partial \bar{n}} = \ln\left(\frac{g}{\bar{n}}\right) \quad (32)$$

و یا

$$\bar{n}_i = g_i e^{\beta(\mu - \epsilon_i)}. \quad (33)$$

اگر تعداد کل ذرات را با N نشان دهیم، از این رابطه احتمال اشغال حالت های با انرژی ϵ_i را بدست می آوریم:

$$p_i := \frac{\bar{n}_i}{N} = \frac{1}{Z} g_i e^{-\beta \epsilon_i} \quad (34)$$

که در آن Z یک ثابت بهنجارش است و طبیعتا برابر است با:

$$Z = \sum_i g_i e^{-\beta \epsilon_i} \quad (35)$$

که همان چیزی است که از درس های گذشته آموخته ایم. به این ترتیب درمی یابیم که نتایجی که بدست می آوریم چگونه در دماهای بالا با نتایج قبلی مطابقت دارند.

۴ مکانیک آماری ذرات یکسان در آنزامل کانونیک

در بخش گذشته یک گاز متشکل از ذرات یکسان را با استفاده از آنزامل میکروکانونیک بررسی کردیم. در این بخش همان سیستم را با استفاده از آنزامل کانونیک مطالعه می کنیم. می دانیم که میکروحالت های یک گاز از ذرات یکسان در محدوده واگن یا کوانتومی با اعداد اشغال^۴ مشخص می شوند. در این نمایش نمی گوییم که کدام ذره در کدام تراز انرژی است بلکه می گوییم در هر تراز انرژی چند تا ذره وجود دارد. شکل (۴). بنابراین در این نمایش هر میکروحالت با یک دنباله از اعداد

$$(n_1, n_2, n_3, \dots, n_K) \quad (36)$$

مشخص می شود که در آن K تعداد حالت های انرژی یک ذره است. البته بسته به نوع طیف یک ذره مثلاً برای ذره آزاد K می تواند متناهی یا نامتناهی باشد. آنچه که تفاوت فرمion 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 فرمion ها هر عدد n_i تنها می تواند 0 یا 1 باشد. بنابراین داریم:

$$\begin{array}{ll} \text{for bosons} & 0 \leq n_i < \infty \\ \text{for fermions} & n_i = 0, 1. \end{array} \quad (37)$$

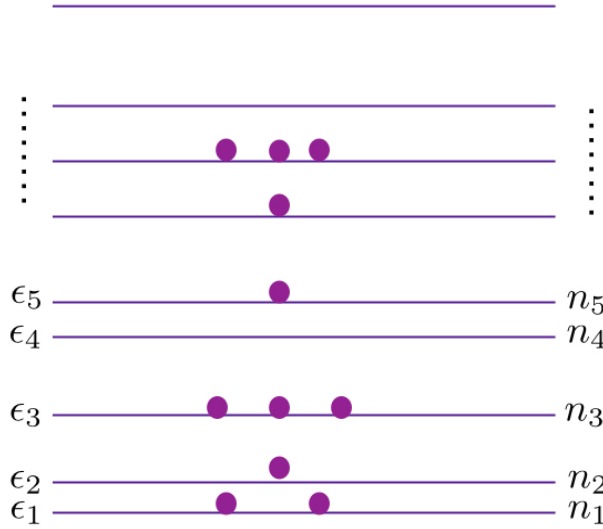
حال هر میکروحالت از نوع بالا انرژی اش برابر است با:

$$E = n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots + n_k \epsilon_K. \quad (38)$$

در نتیجه تابع پارش به صورت زیر خواهد بود:

$$Z_N = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_k} e^{-\beta(n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots + n_k \epsilon_K)} \quad (39)$$

Occupation Numbers^۴



شکل ۴: 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 آزنابل 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:

$$\begin{aligned} Q(z) &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} Z_N = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_1, n_2, \dots, n_K} z^{n_1 + n_2 + \dots + n_K} e^{-\beta(n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots + n_K \epsilon_K)} \end{aligned} \quad (40)$$

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:

$$Q(z) = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_K} (ze^{-\beta \epsilon_1})^{n_1} (ze^{-\beta \epsilon_2})^{n_2} \dots (ze^{-\beta \epsilon_K})^{n_K} \quad (41)$$

و در نتیجه

$$Q(z) = \prod_{i=1}^K \sum_n (ze^{-\beta\epsilon_i})^n \quad (42)$$

و از آنجا با توجه به قیدی که روی اعداد n_i برای بوزون ها و فرمیون ها وجود دارد توابع پارش بوزنی و فرمیونی را به ترتیب زیر بدست می آوریم:

$$Q^+(z) = \prod_{i=1}^K \frac{1}{1 - ze^{-\beta\epsilon_i}} \quad \text{Bosons} \quad (43)$$

و

$$Q^-(z) = \prod_{i=1}^K (1 + ze^{-\beta\epsilon_i}) \quad \text{Fermions.} \quad (44)$$

به این ترتیب تابع پارش گراندکانونیک برای فرمیون ها و بوزون ها براحتی محاسبه می شود. از آنجا که همه کمیت ها از لگاریتم این تابع پارش بدست می آید بهتر است که لگاریتم این توابع را بنویسیم:

■ برای فرمیون ها:

$$\ln Q(z) = \sum_{i=1}^K \ln(1 + ze^{-\beta\epsilon_i}) \quad (45)$$

■ برای بوزون ها:

$$\ln Q(z) = - \sum_{i=1}^K \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon_i}) \quad (46)$$

به این ترتیب می بینیم که در آنزامل کانونیک هم برای محاسبه مجبور شده ایم یک پارامتر ضمنی مثل z را وارد کنیم و عملاً گاز را در آنزامل گراندکانونیک مطالعه کنیم. می دانیم که در آنزامل گراندکانونیک، با داشتن تابع پارش Q می توانیم بقیه خواص ترمودینامیکی را به صورت زیر بدست آوریم:

$$\begin{aligned} N &= \frac{z}{\partial z} \ln Q \\ U &= - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q \end{aligned}$$

$$\frac{PV}{kT} = \ln Q. \quad (47)$$

به این ترتیب بازهم کمیت های ترمودینامیکی را می توانیم به عنوان توابعی ضمنی از پارامتر z بدست آوریم. با حذف کردن z بین این کمیت ها می توانیم همه خواص ترمودینامیکی را بر حسب پارامترهای ماکروسکوپی و اندازه پذیر محاسبه کنیم.

در درس آینده این کار را انجام خواهیم داد و برای راحتی خود را به آزمابل کانونیک یعنی مطالعه همین سه رابطه آخر محدود می کنیم. نیازی نیست که این مطالعه را در آزمابل میکروکانونیک هم انجام دهیم. این مطالعه هم یک مطالعه محدود خواهد بود و مطالعه کامل تر را به درس های آینده موکول می کنیم.

۵ مسئله ها

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

$$H = -\gamma \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (48)$$

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 انتروپی آن را مشخص کنید.

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

$$H = -\gamma (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{B} + \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{B}) \quad (49)$$

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.

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

$$H = -\gamma(\sigma_1 \cdot B + \sigma_2 \cdot B) - J\sigma_{z,1}\sigma_{z,2} \quad (50)$$

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.

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

$$H = -\gamma(\sigma_1 \cdot B + \sigma_2 \cdot B) - J\sigma_1 \cdot \sigma_2 \quad (51)$$

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.

■ 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 ϵ 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؟

■ 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 ϵ 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 و بوزونی در نظر بگیریم، انرژی متوسط این سیستم بس ذره ای در دمای T چقدر است؟

■ 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 ϵ 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.

■ سیستمی متشکل از N نوسانگر هارمونیک یکسان با فرکانس ω_0 در نظر بگیرید. تابع پارش گراند کانونیک را برای دو حالت زیر حساب کنید:

الف: وقتی که نوسانگرها از امار بولتزمن تبعیت می کنند.

ب: وقتی که نوسانگرها از آمار بوز-اینشتین تبعیت می کنند.

■ متوسط تعداد ذرات را در هر لایه انرژی ϵ_k با $\langle n_k \rangle$ نشان می دهیم. میزان افت و خیز این کمیت را برای یک سیستم دلخواه حساب کنید. منظور کمیت زیر است:

$$\langle n_k^2 \rangle - \langle n_k \rangle^2.$$

به طور مشخص میزان این افت و خیز را برای یک گاز بوزونی بدست آورید.

■ از رابطه (۲۲) استفاده کنید و تابع انرژی آزاد هلمهولتز را برای فرمیون های آزاد حساب کنید و نشان دهید عبارتی که بدست می آورید با آنچه که از روش آنزامل گراندکانونیک بدست آوردید یکسان است.

۶ ضمیمه: اصل طرد پاوولی چگونه ما را ناگزیر می کند که میکرواحالت ها را به شکل

متفاوتی در نظر بگیریم؟

در این ضمیمه می خواهیم به سوال فوق پاسخ دهیم و پاسخ خود را نه بر اساس شهود فیزیکی بلکه بر اساس یک تحلیل دقیق ریاضی و فیزیکی قرار دهیم. نخست 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. 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 بنابر مکانیک کوانتومی فضای هیلبرت V_N برابر است با:

$$V_N = V \otimes V \otimes V \cdots V \equiv V^{\otimes N} \quad (۵۲)$$

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 باشد، بعد $V^{\otimes N}$ 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:

$$\hat{A}_i = I \otimes I \otimes \dots \otimes \hat{A} \otimes \dots \otimes I, \quad (53)$$

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

■ 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:

$$H^{(N)} = \sum_{i=1}^N H_i \quad (54)$$

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:

$$Z_N = \text{tr}(e^{-\beta H^{(N)}}) = \text{tr}(e^{-\beta(H_1 + H_2 + \dots + H_N)}). \quad (55)$$

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

$$Z_N = \text{tr}(e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} \dots e^{-\beta H_N}). \quad (56)$$

اما براحتی می توان دید که

$$e^{-\beta H_1} = e^{-\beta H} \otimes I \otimes I \dots \otimes I, \quad (57)$$

و با استفاده از خواص ضرب تانسوری :

$$e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} \dots e^{-\beta H_N} = e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \dots e^{-\beta H}. \quad (58)$$

در نتیجه

$$Z_N = \text{tr}(e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \dots e^{-\beta H}) = \text{tr}(e^{-\beta H})^N. \quad (59)$$

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:

$$Z_N = Z_1^N \quad (۶۰)$$

که در آن

$$Z_1 = \text{tr}(e^{-\beta \frac{P^2}{2m}}) \quad (۶۱)$$

بنابر رابطه بالا Z_1 برابر است با:

$$Z_1 = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (۶۲)$$

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، d تا عدد کوانتومی وجود دارد و انرژی برابر است با:

$$E_{\mathbf{n}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + \dots + n_d^2) \quad (۶۳)$$

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

$$\psi_{\mathbf{n}} = A \sin \frac{n_1 \pi}{L} x_1 \sin \frac{n_2 \pi}{L} x_2 \dots \sin \frac{n_d \pi}{L} x_d, \quad (۶۴)$$

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

$$Z_1 = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_d} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + \dots + n_d^2)} := Q^d \quad (۶۵)$$

که در آن Q برابر است با:

$$Q = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2} \quad (۶۶)$$

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:

$$k = \frac{\hbar \pi}{L} n, \quad (۶۷)$$

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:

$$Q = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\Delta n}{\Delta k} \right) \Delta k e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}, \quad (68)$$

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

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L}{\pi} \Delta k e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = \frac{L}{\pi} \int_0^{\infty} dk e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \\ &= \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar^2 \beta}} = \frac{L}{\lambda}, \end{aligned} \quad (69)$$

که در آن λ طول موج گرمایی است که بنابر تعریف برابر است با :

$$\lambda := \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}}. \quad (70)$$

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

$$Z_1 = \frac{V}{\lambda^d} \quad (71)$$

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

$$Z_N = \left(\frac{V}{\lambda^d} \right)^N. \quad (72)$$

نکته قابل توجه در این جا این است که ضریب h که قبلا در بررسی آنرا مبل 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 پذیرند. 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:

$$Z_N = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^d} \right)^N. \quad (73)$$

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

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:

$$|\psi(r_1, r_2)|^2 = |\psi(r_2, r_1)|^2 \quad (74)$$

که به معنای این است که

$$\psi(r_2, r_1) = e^{i\theta} \psi(r_1, r_2). \quad (75)$$

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

$$\psi(r_1, r_2) = e^{2i\theta} \psi(r_1, r_2) \quad (76)$$

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

$$\psi(r_2, r_1) = \pm \psi(r_1, r_2). \quad (77)$$

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

$$H^{(1)}|u_n\rangle = \epsilon_n|u_n\rangle \quad (۷۸)$$

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 هامیلتونی N ذره ای بدست می آید. یعنی

$$|\psi_{n_1, n_2}\rangle = |u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle \quad (۷۹)$$

یک ویژه حالت انرژی است به این معنا که :

$$H^{(2)}|\psi_{n_1, n_2}\rangle = (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2})|\psi_{n_1, n_2}\rangle. \quad (۸۰)$$

اما ویژه حالت (۳۸) برای ذرات یکسان فرمیونی می بایست کاملاً پادمتقارن و برای ذرات یکسان بوزونی می بایست کاملاً 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:

$$|\psi_{n_1, n_2}^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle + |u_{n_2}\rangle \otimes |u_{n_1}\rangle), \quad (۸۱)$$

برای فرمیون ها:

$$|\psi_{n_1, n_2}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle - |u_{n_2}\rangle \otimes |u_{n_1}\rangle). \quad (۸۲)$$

رابطه (۴۰) و (۴۱) 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 $\langle x_1| \otimes \langle x_2|$ ضرب کنیم و بدست بیاوریم:

$$\psi_{n_1, n_2}^\pm(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_{n_1}(x_1)u_{n_2}(x_2) \pm u_{n_2}(x_1)u_{n_1}(x_2)). \quad (۸۳)$$

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 ۴۲ بدست می آوریم:

$$\psi_{n_1, n_2}(x, x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_{n_1}(x)u_{n_2}(x) - u_{n_2}(x)u_{n_1}(x)) = 0, \quad (۸۴)$$

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 ۴۲ بدست می آوریم:

$$\psi_{n_1, n_2}(x, x) = \frac{1}{\sqrt{2}} ((u_{n_1}(x)u_{n_2}(x) + u_{n_2}(x)u_{n_1}(x))) = \sqrt{2}u_{n_1}(x)u_{n_2}(x) \quad (۸۵)$$

و در نتیجه

$$|\psi_{n_1, n_2}(x, x)|^2 = 2 |u_{n_1}(x)|^2 |u_{n_2}(x)|^2 \quad (۸۶)$$

و ضریب ۲ 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 بهتراست که تعمیم رابطه ۴۲ را برای N ذره بنویسیم. برای N ذره فرمیونی خواهیم داشت:

$$\Psi_{\mathbf{n}}^- = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^{|P|} u_{n_1}(x_{P(1)}) u_{n_2}(x_{P(2)}) \cdots u_{n_N}(x_{P(N)}) \quad (۸۷)$$

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 ۰ و برای جایگشت های فرد برابر با ۱ است. عبارت بالا را به شکل یک دترمینان که آن را دترمینان اسلیتر^۵ می گویند نیز می توان نوشت:

$$\Psi_{\tilde{n}}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{n_1}(x_1) & u_{n_1}(x_2) & \cdots & u_{n_1}(x_N) \\ u_{n_2}(x_1) & u_{n_2}(x_2) & \cdots & u_{n_2}(x_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ u_{n_N}(x_1) & u_{n_N}(x_2) & \cdots & u_{n_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (۸۸)$$

Slater Determinant^۵

برای بوزون ها نیز می توان نوشت

$$\Psi_{\mathbf{n}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P u_{n_1}(x_{P(1)}) u_{n_2}(x_{P(2)}) \cdots u_{n_N}(x_{P(N)}) \quad (۸۹)$$

مشابه با فرمیون ها این تابع را نیز می توان به صورت فشرده تر نوشت. حاصل آن چیزی است که در ریاضیات پرماننت^۶ 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.

طبیعی است که محاسبه تابع پارش به همان روش قبلی یعنی با توصیف ویژه حالت ها به شکل (۸۸) دیگر امکان پذیر نیست و می بایست هر ویژه حالتی را تنها با تعیین اینکه چه تعداد ذره در یک حالت انرژی معین هستند تعریف کنیم. این همان کاری است که در متن درس انجام داده ایم.
