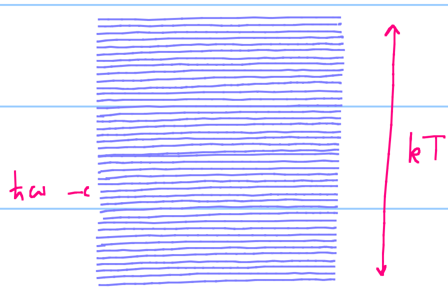
Statistical Physics-11

درس یازدهم: مکانیک آماری کوانتومی

Note Title — 5/25/2009

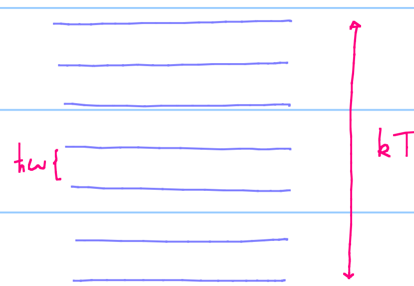
- **مقدمه:**

همه بحث ما تاکنون منحصر به مکانیک آماری سیستم‌های کلاسیک بوده است و خصوصیات کوانتومی دنیای میکروسکوپی را تقریباً نادیده گرفته‌ایم. آیا این کار مجاز است؟ آیا می‌توان در مطالعه مکانیک آماری یک گاز، مولکول‌ها و اتم‌ها را مثل گوی‌های کوچکی در نظر گرفت که تابع قوانین حرکت نیوتن هستند؟ آیا می‌توان در مطالعه مکانیک آماری مجموعه‌ای از نوسانگرها، گسسته بودن سطوح انرژی را نادیده گرفت؟
پاسخ این سوال‌ها هم آری است و هم نه. در واقع استفاده از مکانیک کوانتومی بسته به شرایط دما و فشار و نظایر آن دارد. کافی است که شرایط ماکروسکوپی نظیر چگالی (یا فشار) و دما به گونه‌ای باشد که تقریب کلاسیک برای رفتار ذرات میکروسکوپی تقریب مناسبی باشد. به عنوان مثال یک مجموعه از نوسانگرهای هارمونیک که همگی فرکانس یکسان ω دارند. هرگاه دما چنان باشد که $kT \gg \hbar\omega$ باشد، گسسته بودن سطوح انرژی نوسانگر دیده نمی‌شود و مکانیک آماری کلاسیک در این حد از دما همان نتایجی را به دست می‌دهد که مکانیک آماری کوانتومی.



$kT \gg \hbar\omega$

مکانیک آماری کلاسیک کافی است.



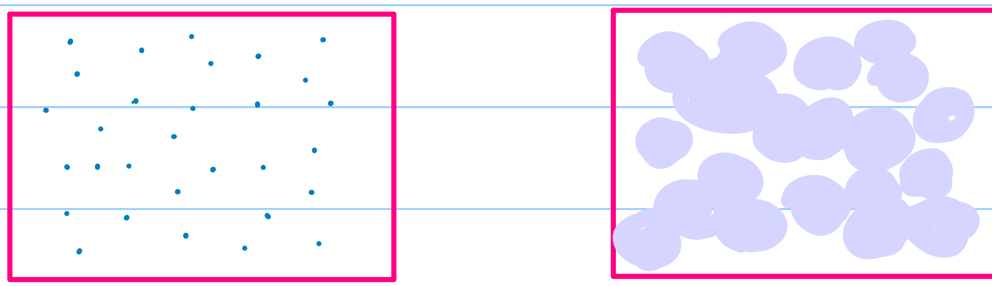
$kT \not\gg \hbar\omega$

مکانیک آماری کوانتومی لازم است.

در بررسی گازها نیز چنین است. تحت شرایطی معین است که مکانیک آماری کلاسیک کافی نیست و باید از مکانیک آماری کوانتومی استفاده کرد.

اگر ذرات گاز دارای جرم m باشند، می‌دانیم که طول موج گرمایی آنها یعنی طول موج دوبروی آنها در دمای T برابر است با $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}$. هرگاه این طول موج از فاصلهٔ بین ذرات بسیار کمتر باشد، می‌توان از اثرات کوانتومی صرف‌نظر کرد. یعنی ذرات را مثل توپ‌های کوچک کلاسیک و جایگزیده در نظر گرفت که تابع موج فضایی آنها هیچ گونه گستردگی فضایی ندارد.

بنابراین ملاکی که تعیین می‌کند آیا رفتار یک گاز کوانتومی است یا کلاسیکی، نسبت فاصلهٔ متوسط بین ذرات (l) به طول موج گرمایی (λ) است. می‌دانیم که $l = n^{-1/3}$ که در آن n چگالی است. بنابراین به ملاک زیر می‌رسیم:



$\lambda^3 n \ll 1$ — رفتار گاز کلاسیک است.

$\lambda^3 n \not\ll 1$ — رفتار گاز کوانتومی است.

• مرور حالات 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 می‌شود. این نقطه با مختصات $(r_1, r_2, \ldots r_N, p_1, p_2, \ldots p_N)$ مشخص می‌شود. در مکانیک آماری کلاسیک و در ترمودینامیک دیده‌ایم که چگالی احتمال این که در حالت تعادل سیستم در این نقطه باشد برابر است با

$$\mathbb{P}(r,p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(r,p)} \qquad 1$$

که در آن H انرژی یک سیستم ایده‌آل است که در آن برهم‌کنش‌های بسیار جزئی بین ذرات در نظر گرفته نشده است. این برهم‌کنش‌های جزئی یا residual interaction عامل‌هایی هستند که باعث رفتار تصادفی سیستم و کنش‌شان

در کل فضای فاز و احتمالاً حالت‌ها ارگودیک می‌شوند. اگر این برهم‌کنش‌های جزئی (برخورد ذرات با همدیگر یا با دیواره ظرف و ....) نبود، سیستم که با هامیلتونی

$H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}$ توصیف می‌شد، سیرش در فضای فاز یک خط راست می‌شد.

به طریق مشابه در یک سیستم کوانتومی مسیر حالت‌ها با ویژه انرژی‌های یک هامیلتونی ایده‌آل توصیف می‌شوند به گونه‌ای که به شکل حالت‌های مانا که

برهم‌کنش‌ها با محیط در آن درنظر گرفته نشده است. اگر این برهم‌کنش‌ها نباشند، سیستمی که با هامیلتونی ایده‌آل H توصیف می‌گردد

حتماً در یک ویژه حالت انرژی H و در هر لحظه در آن ویژه حالت باقی خواهد ماند. اما برهم‌کنش‌ها با محیط باعث می‌شوند

سیستم دائماً بین ویژه حالت‌های H جابجا شود و نهایتاً بین همه ویژه حالت‌ها پخش شده و حالت معینی نداشته باشد.

بنابراین اگر ویژه حالت‌های هامیلتونی H را با $|\psi_i\rangle$ نشان دهیم، در آن i نشان دهنده تمام اعداد کوانتومی لازم برای مشخص کردن ویژه حالت است،

$$H|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle \qquad ۲$$

آنگاه در حالت تعادل و در دمای T، سیستم با احتمال $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$ در حالت $|\psi_i\rangle$ است. در چنین حالتی می‌گوییم سیستم در یک حالت خالص یا pure نیست، بلکه در یک حالت مخلوط یا mixed است. عموماً اگر بخواهیم متوسط کمیتی مثل A را اندازه‌گیری کنیم به ترتیب زیر عمل می‌کنیم:

$$\bar{A} = \sum_i p_i \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle \qquad ۳$$

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 مشاهده‌پذیر A معین نیست. در عبارت بالا بعد از متوسط کوانتومی، متوسط‌گیری آنسامبل گرمایی گرفته شده است. می‌توان عبارت ۳ را به صورت بهتری نوشت. از آنجا که $|\psi_i\rangle$ یک پایه متعامد تشکیل می‌دهند

می‌توانیم بنویسیم:

$$\bar{A} = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle \qquad ۴$$

یا

$$\bar{A} = tr\left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \hat{A} \right) = tr(\hat{\rho} \hat{A}) \qquad ۵$$

که در آن

$$\hat{\rho} := \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \qquad ۶$$

ماتریس چگالی یا Density Matrix خوانده می‌شود. باید دقت کنیم که ماتریس چگالی برای هر توزیع $\{p_i\}$ و برای هر مجموعه پایه $\{|\psi_i\rangle\}$ تعریف می‌شود. (در حالی که خواننده کنجکاو اطلاعات کامل‌تر و دقیق‌تر درباره ماتریس چگالی پیدا کند می‌تواند به درسنامه «مکانیک آماری و چالش‌های کوانتومی» فصل ۱ و ۲ مراجعه کند.) برای آنسامبل کانونیک داریم $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$. بنابراین ماتریس چگالی برابر می‌شود با:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \qquad ۷$$

یا

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} \qquad ۸$$

که در آن

$$\hat{Z} = \sum_i e^{-\beta E_i} = tr(e^{-\beta H}). \qquad ۹$$

- فضای هیلبرت سیستم‌های بس ذره‌ای

در این بخش به اختصار فضای هیلبرت یک سیستم بس ذره‌ای را شرح می‌دهیم. شرح مفصل‌تر را خواننده می‌تواند در درسنامه مکانیک کوانتومی بیابد.

فضای هیلبرت یک ذره را با V نشان می‌دهیم و فضای هیلبرت یک سیستم N ذره‌ای که متشکل از N ذره تمیزپذیر است را با

V_N نشان می‌دهیم. در این صورت بنابر مکانیک کوانتومی، فضای هیلبرت V_N برابر است با:

$$V_N = V\otimes V\otimes V\otimes\cdots\otimes V \equiv V^{\otimes N} \qquad ۱۰$$

که در آن $\otimes$ نشان دهنده ضرب تانسوری فضاها است. هرگاه بردارهای پایه V را با $|e_i\rangle$ نشان دهیم

بردارهای پایه $V^{\otimes N}$ به صورت $|e_{i_1}\rangle\otimes|e_{i_2}\rangle\otimes\cdots|e_{i_N}\rangle$ خواهند بود. هرگاه بعد V

d باشد، بعد $V^{\otimes N}$، d^N خواهد بود.

هرگاه عملگری مثل $\hat{A}$ را به فضای هیلبرت یک ذره تعریف کنیم،

عملگر $\hat{A}_i$ نشان دهنده اثر $\hat{A}$ روی ذره i ام است و به صورت زیر خواهد بود:

$$\hat{A}_i = 1\otimes 1\otimes\cdots\otimes \hat{A}\otimes\cdots\otimes 1. \qquad ۱۱$$

از خواص ضرب تانسوری می‌دانیم که اگر $i\neq j$ باشد، آنگاه $\hat{A}_i\hat{A}_j=\hat{A}_j\hat{A}_i$.

- مثال: ذرات تمیزپذیر

فرض کنید یک سیستم بس‌ذره‌ای داریم که در آن ذرات با یکدیگر برهم‌کنش ندارند. این ذرات البته می‌توانند حرکت یا محیط

خارج برهم‌کنش کنند. در چنین شرایطی هامیلتونی به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\mathcal{H}^{(N)} = \sum_{i=1}^{N} H_i \qquad ۱۲$$

که در آن H_i هامیلتونی مربوط به ذره i ام است. از نظر ریاضی عملگر H_i به شکل زیر است:

$$H_i = 1\otimes 1\otimes\cdots\otimes \underbrace{H}_{i}\otimes\cdots 1\otimes 1 \qquad ۱۳$$

که در آن H در فضای i ام عمل می‌کند و بقیه عملگرهای 1 روی ذرات دیگر عمل می‌کنند.

در این صورت تابع پارش برابر خواهد بود:

$$Z_N = tr\left(e^{-\beta H^{(N)}}\right) = tr\left(e^{-\beta(H_1+H_2+\cdots H_N)}\right) \qquad ١٤$$

از آنجا که H_i ها با هم جابجا می‌شوند خواهیم داشت:

$$Z_N = tr\left(e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} \cdots e^{-\beta H_N}\right) \qquad ١٥$$

اما از طرف دیگر

$$e^{-\beta H_1} = e^{-\beta H} \otimes 1 \otimes 1 \cdots \otimes 1 \qquad ١٦$$

و با استفاده از خواص ضرب تانسوری

$$e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} \cdots e^{-\beta H_N} = e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \otimes \cdots e^{-\beta H} \qquad ١٧$$

در نتیجه

$$Z_N = tr\left(e^{-\beta H} \otimes e^{-\beta H} \otimes \cdots e^{-\beta H}\right) = \left[tr\left(e^{-\beta H}\right)\right]^N \qquad ١٨$$

بنابراین مثل حالت کلاسیک، در این حالت هم تابع پارش N ذره برابر توان N ام تابع پارش یک ذره است یعنی $Z_N = (Z_1)^N$

که در آن $Z_1 = tr(e^{-\beta H})$.

• مثال: ذرات آزاد غیرنسبیتی

باز هم چنین نسبتی داریم $\qquad Z_N = (Z_1)^N \qquad ١٩$

که در آن

$$Z_1 = tr\left(e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}\right) \qquad ٢٠$$

بنابراین باید Z_1 را حساب کرد:

$$Z_1 = \sum_i e^{-\beta E_i}$$ ۲۱

که در آن E_i ها ویژه مقادیر انرژی یک ذره آزاد است و i نشان دهنده اعداد کوانتومی یک ذره است. برای یک ذره که در یک جعبه d بعدی به اندازه L زندگی می‌کند، d تا عدد کوانتومی وجود دارد و انرژی برابر است با:

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_1^2+n_2^2+\cdots n_d^2\right).$$ ۲۲

در شرایط مرزی دیریکله که در جلسه گذشته گفتیم، تابع موج ذره‌ها به چنین ویژه حالتی برابر است:

$$\psi_{\vec{n}} = A \sin\frac{n_1\pi}{L}x_1 \sin\frac{n_2\pi}{L}x_2 \cdots \sin\frac{n_d\pi}{L}x_d$$ ۲۳

که در آن A یک ثابت بهنجارش است.

بنابراین تابع پارش برابر می‌شود با:

$$Z_1 = \sum_{n_1,n_2,\dots n_d} e^{-\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_1^2+n_2^2+\cdots n_d^2\right)} =: q^d$$ ۲۴

که در آن q برابر است با:

$$q = \sum_{n_1=1}^{\infty} e^{-\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2}$$ ۲۵

این جمع را با تقریب بسیار خوبی می‌توان به یک انتگرال گاوسی تبدیل کرد و آن را حساب کرد. اگر متغیر k را به صورت زیر تعریف کنیم

$$k = \frac{\hbar\pi}{L}n$$ ۲۶

توجه می‌کنیم که با توجه به بزرگ بودن L، وقتی که n تغییر می‌کند، تغییرات k بسیار اندک است. بنابراین مطابق شکل زیر می‌توان

جمع را به صورت زیر انجام داد:

$$q = \sum_0^{\infty}\left(\frac{\Delta n}{\Delta k}\right)\Delta k\, e^{-\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}$$ ۲۷

که در آن $\frac{\Delta n}{\Delta k}$ تعداد نقاط درون یک بازه‌ی Δk است. این تعداد با توجه به رابطه‌ی $k = \frac{\pi}{L} n$ به دست آمده. بنابراین

$$\frac{\Delta n}{\Delta k} = \frac{L}{\pi}$$

در نتیجه ←

$$q = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L}{\pi} \Delta k \, e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = \frac{L}{\pi} \int_0^{\infty} dk \, e^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m}$$

$$= \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar^2 \beta}} = \frac{L}{\lambda} \qquad ۲۸$$

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

$$\lambda := \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}} \qquad ۲۹$$

در نتیجه تابع پارش یک ذره یعنی Z_1 برابر می‌شود با:

$$Z_1 = \frac{V}{\lambda^d} \qquad ۳۰$$

تابع پارش گاز N ذره‌ای برابر خواهد شد با:

$$Z_N = Z_1^N = \left(\frac{V}{\lambda^d}\right)^N \qquad ۳۱$$

نکته‌ی قابل توجه در این جا این است که ضریب h که قبلاً در مبحث آنتروپی گاز ایده‌آل در سیستم‌های کلاسیک و برای تبدیل حجم فضای فاز به تعداد وارد شده بود و در آنجا از استدلال‌های شهودی مربوط به اصل عدم قطعیت استفاده کرده بودیم، در این جا به طور طبیعی در تابع پارش وارد می‌شود. اما نباید انتظار داشته باشیم که ضریب $\frac{1}{N!}$ که در آن جا به خاطر تمیزناپذیری ذرات وارد کرده بودیم در این جا ظاهر شود زیرا از حالا ابتدا در این جا نیز فرض کرده‌ایم که ذرات تمیزپذیرند. بنابراین اگر بخواهیم تابع پارش

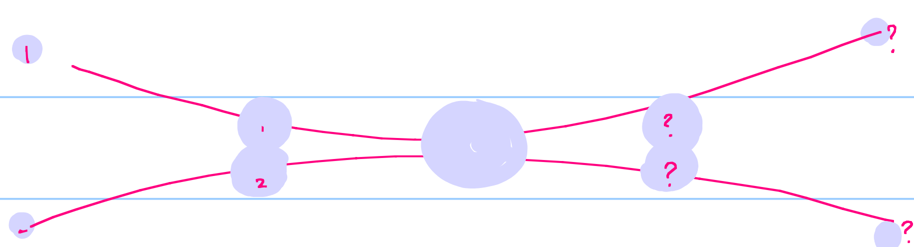
به خاطر بیاوریم که در حالت کلاسیک در هم معتبر باشد، وقتی اثر تمایزناپذیری ذرات را نیز در بر داشته باشد. به همین دلیل ضریب $\frac{1}{N!}$ را این جا خودمان اضافه نمودیم و تابع پارش را به صورت زیر نوشتیم:

$$Z_N = \frac{1}{N!}\left(\frac{V}{\lambda^d}\right)^N . \qquad ۳۲$$

پس از این مقدمات به مفهوم ذرات یکسان می‌پردازیم و آن را از دیدگاه دقیق کوانتومی بررسی می‌کنیم.

• ذرات یکسان در مکانیک کوانتومی.

تابع موج یک سیستم دو ذره‌ای را به صورت $\psi(r_1, r_2)$ می‌نویسیم که در آن r_1 مکان ذره‌ی اول و r_2 مکان ذره‌ی دوم است. این توصیف وقتی درست است که لااقل از نظر ذهنی بتوانیم هویت ذرات ۱ و ۲ را از هم تمیز دهیم. این تشخیص اگرچه در مکانیک کلاسیک که ذرات مثل گوی‌های کوچکی هستند امکان‌پذیر است، ولی در مکانیک کوانتومی که ذرات با تابع موج توصیف می‌شوند هرگز امکان‌پذیر نیست. حتی اگر در یک لحظه ذرات را از هم تمیز دهیم و شماره‌ی آن‌ها را مشخص کنیم در اثر گسترش تابع موج این ذرات پخش شده و در هم فرو می‌روند و بعد از جدا شدن بسته‌های موج دیگر نمی‌دانیم کدام ذره را شناسایی کنیم. شکل زیر



برخورد دو ذره‌ی یکسان را نشان می‌دهد. بعد از برخورد دو ذره، ما واقعاً نمی‌دانیم که کدام ذره، ذره‌ی ۱ و کدام ذره، ذره‌ی ۲ است. بنابراین توصیف درست از یک سیستم دو ذره‌ای می‌بایست توسط تابع موجی داده شود که این تمایزناپذیری ذرات در آن در نظر گرفته شده باشد.

بنابراین یک تابع موج دو ذره‌ای مثل $\psi(r_1,r_2)$ می‌بایست تنها توزیع احتمال وجود یک ذره در نقطهٔ r_1 و یک ذره در نقطهٔ r_2 را معین کند نه این که مشخص کند کدام ذره در کدام نقطه است. در نتیجه می‌بایست داشته باشیم:

$$|\psi(r_1,r_2)|^2=|\psi(r_2,r_1)|^2 \qquad ۳۳$$

که به معنی این است که

$$\psi(r_1,r_2)=e^{i\theta}\,\psi(r_2,r_1). \qquad ۳۴$$

اگر جابجایی بالا را یک بار دیگر تکرار کنیم به این رابطه می‌رسیم که

$$\psi(r_1,r_2)=e^{2i\theta}\,\psi(r_1,r_2) \qquad ۳۵$$

در نتیجه می‌دهد $e^{i\theta}=\pm 1$. یعنی تابع موج دو ذره‌ای می‌بایست به شکل زیر عمل کند:

$$\psi(r_2,r_1)=\pm\,\psi(r_1,r_2). \qquad ۳۶$$

این که تابع موج می‌بایست پادمتقارن باشد یا متقارن بستگی به نوع ذرات دارد. برای فرمیون‌ها (یعنی ذراتی که اسپین آنها نیمه صحیح است مثل الکترون، نوترون، ایزوتوپ هلیوم ۳) تابع موج می‌بایست پادمتقارن و برای بوزون‌ها (یعنی ذراتی که اسپین آنها صحیح است مثل فوتون و ایزوتوپ هلیوم ۴) تابع موج می‌بایست متقارن باشد.

به یک نکته مهم می‌بایست توجه کرد و آن این که متقارن بودن یا پادمتقارن بودن خاصیت کل تابع موج است نه فقط قسمت فضایی تابع موج.

- تابع موج ذرات آزاد

مجموعه‌ای از ۲ ذره یکسان در نظر می‌گیریم که با یکدیگر برهم‌کنش ندارند. حرکت‌ها. ویژه‌حالت‌های انرژی هامیلتونی تک ذره را با u_n نشان می‌دهیم یعنی

$$H_1|u_n\rangle=\epsilon_n|u_n\rangle \qquad ۳۷$$

که در آن n اعداد کوانتومی مربوط به ویژه حالت‌های تک ذره است. آنگاه ویژه حالت‌های انرژی برای ۲ ذره را به طور ساده‌ای می‌توان نوشت. می‌دانیم که با ضرب کردن این ویژه حالت‌ها در هم ویژه حالت‌های هامیلتونی N ذره‌ای به دست می‌آید، یعنی:

$$|\psi_{n_1,n_2}\rangle = |u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle \qquad ۳۸$$

هم ویژه حالت انرژی است به این معنا که:

$$H^{(2)}|\psi_{n_1 n_2}\rangle = (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2})|\psi_{n_1 n_2}\rangle \qquad ۳۹$$

اما ویژه حالت (۳۸) برای ذرات یکسان فرمیونی مربوط به "کاملاً" پادمتقارن و برای ذرات یکسان بوزونی مربوط به "کاملاً" متقارن نیست تا یک ویژه حالت درست برای این گونه سیستم‌ها به دست آید. بنابراین ویژه حالت‌های فرمیونی و بوزونی را به شکل زیر تشکیل می‌دهیم.

برای بوزون‌ها ترکیب می‌دهیم،

$$|\psi^{+}_{n_1 n_2}\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle + |u_{n_2}\rangle \otimes |u_{n_1}\rangle \right) \qquad ۴۰$$

و برای فرمیون‌ها ترکیب می‌دهیم:

$$|\psi^{-}_{n_1 n_2}\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u_{n_1}\rangle \otimes |u_{n_2}\rangle - |u_{n_2}\rangle \otimes |u_{n_1}\rangle \right) \qquad ۴۱$$

رابطه‌های ۴۰ و ۴۱ تنها بیان می‌کنند که یک ذره در تراز انرژی n_1 و یک ذره در تراز انرژی n_2 است و برای فرمیون‌ها این تابع حالت "کاملاً" پادمتقارن و برای بوزون‌ها این تابع حالت "کاملاً" متقارن است. حالا، تابع موج فضایی را هم به دست بیاوریم. کافی است که طرفین رابطه را با $\langle x_1, x_2| := \langle x_1| \otimes \langle x_2|$ ضرب کنیم و به دست بیاوریم:

$$\psi^{\pm}_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u_{n_1}(x_1)\, u_{n_2}(x_2) \pm u_{n_2}(x_1)\, u_{n_1}(x_2) \right). \qquad ۴۲$$

تقارن یا پادتقارن تابع موج اثرات فیزیکی بسیار مهمی دارد. برای فهم این اثرات تحت تابع موج دو ذره‌ای را برای فرمیون‌ها در نظر می‌گیریم؛ از رابطهٔ ۴۲ بدست می‌آوریم:

$$\psi_{n_1n_2}(x,x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(u_{n_1}(x)u_{n_2}(x)-u_{n_2}(x)u_{n_1}(x)\Big)=0. \qquad ۴۳$$

که به این معناست که دو فرمیون تمایلی ندارند که در یک نقطه قرار بگیرند. در حقیقت می‌توان نشان داد که تابع موج $\psi_{n_1n_2}(x_1,x_2)$ با کم شدن $|x_1-x_2|$ کاهش می‌یابد. مثل این که فرمیون‌ها تمایل به دفع یکدیگر دارند. بوزون‌ها برعکس حالت کاملاً متفاوتی دارند. با هم از همان رابطهٔ ۴۲ بدست می‌آید:

$$\psi_{n_1n_2}(x,x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(u_{n_1}(x)u_{n_2}(x)+u_{n_2}(x)u_{n_1}(x)\Big)=\sqrt{2}\,u_{n_1}(x)u_{n_2}(x) \qquad ۴۴$$

و در نتیجه

$$|\psi_{n_1n_2}(x,x)|^2=2\,|u_{n_1}(x)|^2|u_{n_2}(x)|^2 \qquad ۴۵$$

و ضریب ۲ نشان دهندهٔ این است که احتمال وجود دو ذرهٔ بوزون در یک نقطه دو برابر زمانی است که این ذرات تمایز پذیر باشند. بنابراین مثل این است که بوزون‌ها یکدیگر را جذب می‌کنند. این خاصیت یعنی دفع کردن فرمیون‌ها و جذب کردن بوزون‌ها در رفتار ماکروسکوپی سیستم‌های بوزونی و فرمیونی باعث می‌شود که بسیار متفاوت با خواص بسیار جالب خواهد شد.

در پایان این بخش بهتر است که تعمیم رابطهٔ ۴۲ را برای N ذره بنویسیم. برای N ذرهٔ فرمیونی خواهیم داشت:

$$\psi^-_{\hat{n}}(x_1,\dots,x_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-1)^{|P|}u_{n_1}(x_{P(1)})u_{n_2}(x_{P(2)})\cdots u_{n_N}(x_{P(N)}) \qquad ۴۶$$

که در آن جمع روی تمام جایگشت‌های P از N اندیس ۱، ۲، ... N است و $|P|$ برای جایگشت‌های زوج برابر با 0 و برای جایگشت‌های فرد برابر با 1 است. عبارت بالا را به شکل یک دترمینان که آن را Slater determinant

یک گزینه نیز می‌توان نوشت :

$$\psi_{\hat{n}}(x_1, x_2, \ldots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{n_1}(x_1), & u_{n_1}(x_2), & \ldots & u_{n_1}(x_N) \\ u_{n_2}(x_1), & u_{n_2}(x_2), & \ldots & u_{n_2}(x_N) \\ \vdots & & & \\ u_{n_N}(x_1), & u_{n_N}(x_2), & \ldots & u_{n_N}(x_N) \end{vmatrix} . \qquad ۴۷$$

برای بوزون‌ها نیز می‌توان نوشت

$$\psi^{+}_{\hat{n}}(x_1, \ldots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P u_{n_1}(x_{p(1)})\, u_{n_2}(x_{p(2)}) \ldots u_{n_N}(x_{p(N)}) . \qquad ۴۸$$

مشابه با فرمیون‌ها این تابع را نیز می‌توان به صورت فشرده‌تر نوشت. حاصل این چیزی است که در ریاضیات آن را به جای Determinant، Permanent می‌خوانند که شکل آن دست مشابه دترمینان است با این تفاوت که در ترکیب‌ها، در ترکیب هیچ نوع علامت منفی نمی‌گذارد.

- **فضای حالت مربوط به ذرات یکسان**

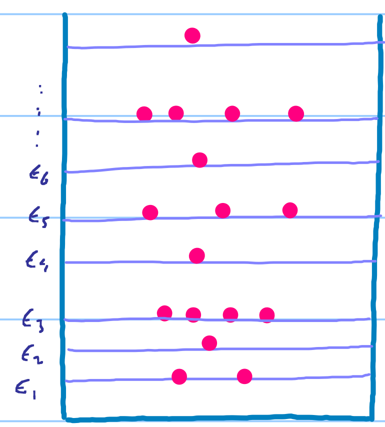
اگر فضای هیلبرت تک ذره را با V نشان دهیم، در بخش بالا دیدیم که فضای هیلبرت یک سیستم N ذره‌ای متشکل از بوزون‌ها یا فرمیون‌ها به صورت ضرب تانسوری $V\otimes V\otimes \cdots V = V^{\otimes N}$ نیست بلکه برای بوزون‌ها تنها قسمت متقارن این فضا و برای فرمیون‌ها تنها قسمت پادمتقارن این فضا، فضای هیلبرت فیزیکی است. حال اگر پایه‌های فضای V را با $|\alpha\rangle$ نشان دهیم، پایه‌های فضای فرمیون‌ها به صورت زیر است:

$$|\alpha_1 \ldots \alpha_N\rangle_- := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P\, |\alpha_{p(1)}\rangle \otimes |\alpha_{p(2)}\rangle \otimes \cdots |\alpha_{p(N)}\rangle \qquad ۴۹$$

و برای پایه فضای هیلبرت بوزون‌ها به صورت زیر است:

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots \alpha_N\rangle_+ := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P |\alpha_{P(1)}\rangle \otimes |\alpha_{P(2)}\rangle \otimes \cdots\cdots |\alpha_{P(N)}\rangle . \qquad ۵۰$$

برای این فضا که گفته شد $Z_N = Z_1^N$ صحیح نیست. یعنی هر تابع پایه N ذره‌ای به تابع پایه تک ذره‌ای کاهش نمی‌یابد. بنابراین باید تابع پایه N ذره‌ای را با در نظر گرفتن توابع موج متقارن یا پادمتقارن حساب کرد. اما معلوم است که چنین کاری از شمردن حالت‌های مربوط به تابع پایه دشوار و غیر مفید است. بنابراین بهتر است در جستجوی یک توصیف ساده‌تر باشیم. این توصیف ساده‌تر چیزی است که آن را نمایش جمعیت یا نمایش عدد اشغال occupation number representation می‌نامند. در این نمایش نمی‌گوییم که کدام ذره در کدام تراز انرژی است، بلکه می‌گوییم در هر تراز انرژی چند تا ذره وجود دارد. (شکل زیر).



این پیکربندی در نمایش جمعیت توسط اعداد

$n_1 = 2,\ n_2 = 1,\ n_3 = 4,\ n_4 = 1,\ \dots$

مشخص می‌شود.

بنابراین در این نمایش هر پیکربندی عبارت است از یک دنباله از اعداد

$$(n_1, n_2, n_3, n_4, \dots\dots\dots n_k) \qquad ۵۱$$

مشخص می‌شود که در آن k تعداد حالت‌های انرژی تک ذره است. البته بسته به نوع طیف تک ذره، مثلاً برای ذره آزاد، k می‌تواند بی‌نهایت باشد. آنچه تفاوت فرمیون‌ها و بوزون‌ها را مشخص می‌کند آن است که برای بوزون‌ها تعداد ذرات در هر تراز انرژی دارای هیچ محدودیتی نیست ولی برای فرمیون‌ها n_i فقط می‌تواند 0 یا 1 باشد.

یعنی مقادیر مجاز n_i برای بوزون‌ها و فرمیون‌ها به ترتیب زیر است.

بوزون‌ها $\qquad 0 \le n_i < \infty$

۵۲

فرمیون‌ها $\qquad n_i = 0, 1$

حال هر مشخصه‌ی حالت از نوع بالا انرژی‌ای برابر است با:

$$E = n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots n_k \epsilon_k . \qquad ۵۳$$

در نتیجه تابع پارش به صورت زیر خواهد بود:

$$Z_N = \sum_{n_1, n_2, \dots n_k}{}' \; e^{-\beta (n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots n_k \epsilon_k)} \qquad ۵۴$$

که در آن Σ' به معنای این است که این جمع یک جمع مقید است به این معنا که جمع روی n_i‌هایی است که به شرط $n_1 + n_2 + \dots + n_k = N$ صدق کنند. این قید محاسبه تابع پارش را بسیار دشوار می‌کند. این جاست که توسل به آنسامبل گراندکانونیک به کمک ما می‌آید و می‌توانیم تابع پارش گراندکانونیک را برای بوزون‌ها و فرمیون‌ها به راحتی حساب کنیم. البته ما بایست برای این سختی‌ها جوابی پیدا کنیم که بعداً به آن توجه خواهیم کرد.

بنابراین می‌نویسیم:

$$Q(z) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_1, n_2 \dots}{}' \; z^{n_1 + n_2 + \dots} e^{-\beta (n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots)} \qquad ۵۵$$

از آنجا که روی تمام مقادیر N نیز جمع می‌زنیم، دیگر هیچ محدودیتی روی n_i وجود ندارد. یعنی Q برابر خواهد بود با

$$Q(z) = \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots} \left(z e^{-\beta \epsilon_1}\right)^{n_1} \left(z e^{-\beta \epsilon_2}\right)^{n_2} \dots \left(z e^{-\beta \epsilon_k}\right)^{n_k} \qquad ۵۶$$

در نتیجه

$$Q(z) = \prod_{i=1}^{K} \sum_{n} \left(z e^{-\beta \epsilon_i}\right)^n \qquad ٥٧$$

و از آنجا با توجه به رابطه ٥٢

$$Q^{+}(z) = \prod_{i=1}^{K} \frac{1}{1 - z e^{-\beta \epsilon_i}} \qquad ٥٨$$

$$Q^{-}(z) = \prod_{i=1}^{K} 1 + z e^{-\beta \epsilon_i} \qquad ٥٩$$

هر دو این توابع پارتیشن در رابطه زیر با هم ترکیب که :

$$Q^{S}(z) = \prod_{i=1}^{K} \left(1 - S z e^{-\beta \epsilon_i}\right)^{-S} \qquad ٦٠$$

که در آن

$$S = \begin{cases} 1 & \text{برای بوزون ها} \\ -1 & \text{برای فرمیون ها.} \end{cases} \qquad ٦١$$

بنابراین خواهیم داشت :

$$\ln Q^{S}(z) = -S \sum_{i=1}^{K} \ln\left(1 - S z e^{-\beta \epsilon_i}\right) \qquad ٦٢$$

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

$$\boxed{N^{S} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} - S}} \qquad ٦٣$$

و با توجه به رابطه: $U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q$

$$\boxed{U^s = \sum_{i=1}^{N} \frac{\epsilon_i}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} - \varsigma}} \qquad ٦٤$$

همچنین از رابطه: $\frac{JX}{kT} = -\ln Q$ بدست می‌آید:

$$\boxed{\frac{JX}{kT} = -\varsigma \sum_{i=1}^{k} \ln\left(1 - \varsigma z e^{-\beta \epsilon_i}\right)} \qquad ٦٥$$

برای یک گاز می‌دانیم، $JX = -PV$ است.

دقت کنید روابط ۶۳، ۶۴ و ۶۵ روابط ترمودینامیکی حاکم بر سیستم ذرات آزاد را بطور ضمنی بیان می‌کنند زیرا همه این روابط به پارامتر $z = e^{\beta\mu}$ که آن را fugacity می‌نامیم بستگی دارد. حذف z بین این روابط، روابط نهایی ترمودینامیکی را بدست می‌دهد. به عبارت دقیق‌تر از روابط ۶۳-۶۵ بدست می‌آوریم:

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

که در آن ..... نشان دهندهٔ بقیه پارامترها مثل حجم (در مورد گاز) است. با جایگذاری z در U و $\frac{PV}{kT}$، عبارات انرژی و معادله حالت بدست می‌آید.

رابطهٔ ۶۳، ۶۴، نشان می‌دهند که تعداد متوسط ذرات در هر تراز انرژی چقدر است. اگر نشانه را با $\bar{n}_i$ نشان می‌دهیم داریم:

$$\boxed{\bar{n}_i = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} - \varsigma}}$$ ۶۶

اگر به رابطه ۵۵ نگاه کنیم متوجه می‌شویم که این رابطه هم چنین از مشتق گیری $\ln Q$ نسبت به $\beta\epsilon_i$ نیز به دست آمده یعنی

$$\bar{n}_i = -\frac{\partial}{\partial(\beta\epsilon_i)} \ln Q^{\varsigma}(z)$$ ۶۷

رابطه ۵۵ هم چنین اجازه می‌دهد که $\overline{n_i^2}$ و در نتیجه افت و خیز جمعیت ذرات در ترازها را نیز محاسبه کنیم:

به سادگی می‌توان فهمید:

$$(\Delta n_i)^2 = \overline{n_i^2} - \bar{n}_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial(\beta\epsilon_i)^2} \ln Q$$ ۶۸

بنابراین

$$(\Delta n_i)^2(\varsigma) = \frac{\partial^2}{\partial(\beta\epsilon_i)^2}\left\{-\varsigma \ln\left(1-\varsigma z e^{-\beta\epsilon_i}\right)\right\}$$ ۶۹

و یا

$$(\Delta n_i)^2(\varsigma) = \frac{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}}{\left(z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} - \varsigma\right)^2} = z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}(\bar{n}_i)^2$$ ۷۰

بنابراین افت و خیز نسبی برابر خواهد شد با:

$$\boxed{\frac{\overline{n_i^2} - \bar{n}_i^2}{\bar{n}_i^2} = z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}}$$ ۷۱

در این جا تذکری به فهم صحیح $\bar{n}_i$ ها برای بوزون‌ها و فرمیون‌ها و حدود آنها درک کنیم.

• فرمیون‌ها: برای فرمیون‌ها داریم:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta \epsilon_i}+1} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i-\mu)}+1} \qquad (72)$$

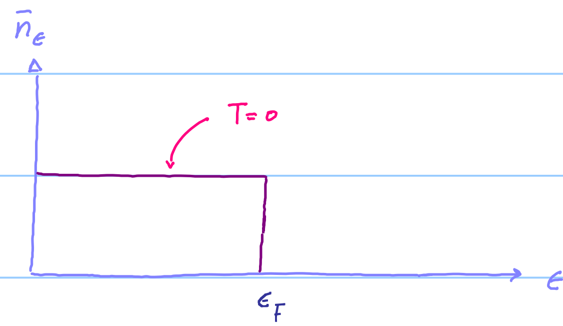
از آنجا که برای فرمیون‌ها $0 \le \bar{n}_i \le 1$، نتیجه می‌گیریم که محدوده تغییرات z برای فرمیون‌ها نامحدود است: $0 \le z < \infty$.

توزیع ۷۲ به توزیع فرمی-دیراک موسوم است.

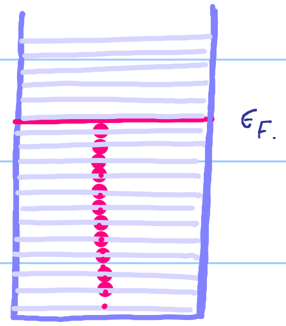
پاولی: ۷۱ هم‌چنین نشان می‌دهد که انرژی متوسط افت و خیز جمعیت برای لایه‌ها کم و به ازای بیشترین افت و خیز برای لایه‌های خالی و پر ابزرگ است.

منحنی تغییرات $\bar{n}$ برحسب ϵ برای فرمیون‌ها در دمای صفر به شکل زیر است که در آن ϵ_F موسوم به انرژی فرمی به صورت زیر تعریف می‌شود:

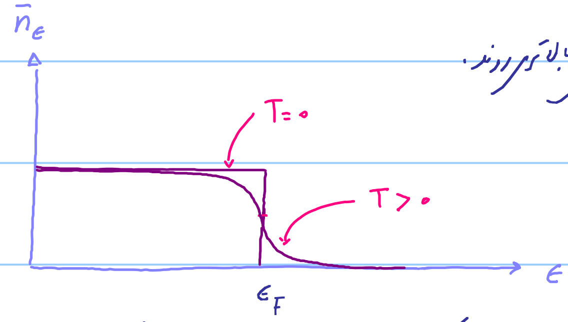
$$\epsilon_F := \mu(T=0).$$



این نمودار نشان می‌دهد که در دمای صفر، تمام لایه‌های زیر سطح فرمی پر و تمام لایه‌های بالای سطح فرمی خالی هستند (شکل زیر).



با افزایش دما توزیع ذرات هموارتر شده و به شکل زیر در می‌آید که به این معناست که ذرات نزدیک سطح فرمی با گرفتن انرژی گرمایی به ترازهای بالاتر می‌روند.



باید دقت کنید که در دمای بالاتر از صفر دیگر μ برابر با ϵ_F نیست، بلکه μ و در نتیجه z کوچکتر شده و جمله‌ی $z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}$ در مقایسه با 1 در عبارت ۷۲ بزرگتر شده و در نتیجه توزیع ذرات به سمت تابع توزیع بولتزمن یعنی $n_i \propto e^{-\beta\epsilon_i}$ میل می‌کنند.

می‌توان یک دما، موسوم به دمای فرمی تعریف کرد که از رابطه‌ی

$$T_F := \frac{\epsilon_F}{k} \qquad ۷۲$$

بدست می‌آید. هرگاه که $T \ll T_F$ باشد معنی فیزیکی این است که انرژی حرارتی قادر نیست که ترازهای پایین انرژی را خالی کند و به بالای سطح فرمی ببرند. بنابراین در این دما تنها جمعیت لایه‌ی نزدیک به سطح فرمی تغییر می‌کند. اما وقتی که $T \sim T_F$ یا $T \gtrsim T_F$ است، انرژی حرارتی آنقدر بزرگ می‌شود که حتی ذرات موجود در لایه‌ی پایین انرژی تحریک شده و به بالای سطح فرمی می‌روند. هر چه که T بزرگتر از T_F باشد، توزیع ذرات به توزیع کلاسیکی بولتزمن نزدیک‌تر و اثرات کوانتومی کمتر می‌شود.

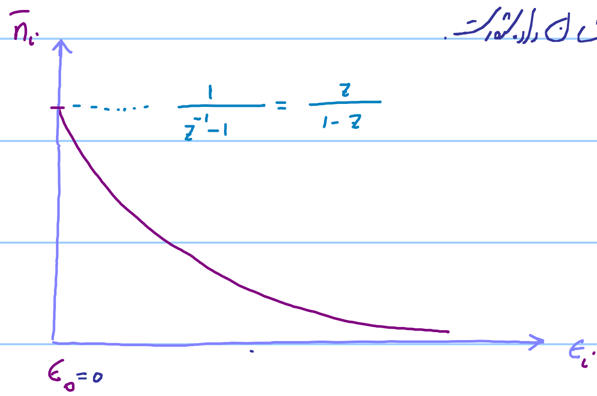
- بوزون‌ها: برای بوزون‌ها داریم:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} - 1} \qquad ۷۳$$

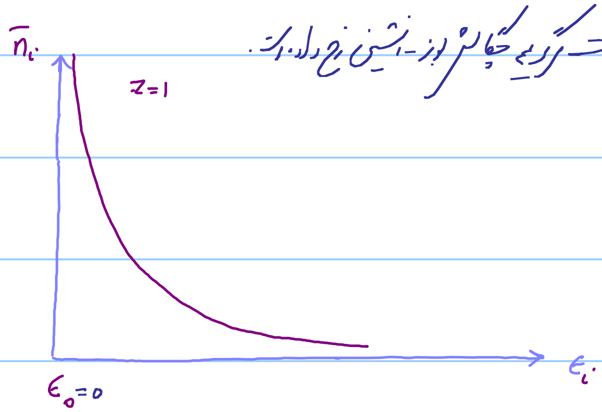
از آنجا که برای بوزون‌ها $0 \le \bar{n}_i < \infty$، نتیجه می‌گیریم که $0 < z < e^{\beta\epsilon_0}$ که در آن ϵ_0 انرژی حالت پایه‌ی یک ذره است.

همواره در تراز بوزون‌ها که هیچ خاصیت فیزیکی را نمی‌پذیرد جداناپذیری به طبیعی ذرات امکان‌پذیر است، به طوری که معادله ۶ برابر با صفر شود. در این صورت محدوده تغییرات z عبارت خواهد بود از $0 \le z \le 1$.

رابطه ۷۳ نشان می‌دهد که در یک دمای معین، هر چه سطح انرژی ϵ_i بیشتر باشد، $\bar{n}_i$ کمتر می‌شود. تغییرات $\bar{n}_i$ بر حسب انرژی برای یک مقدار معین z در شکل زیر نشان داده شده است.



مقدار z از رابطه $z = z(N, T, \ldots)$ نسبت به دما و دیگر پارامترها نظیر حجم وابسته است. بنابراین شکل بالا برای یک z معین رسم شده است. اما تحت شرایطی z می‌تواند مساوی ۱ شود. در این شرایط تعداد ذرات موجود در تراز پایه به سمت بی‌نهایت میل می‌کند و تابع توزیع ذرات به شکل زیر در می‌آید. در این حالت گفته می‌شود چگالش بوز-اینشتین رخ داده است.



آنچه در این فصل گفتیم خصوصیات کلی یک سیستم از ذرات بدون برهم‌کنش با یکدیگر بود. هیچ نوع فرض خاصی درباره سطوح

انرژی پتانسیل در بینی درصد ۲۰ کم می‌کنیم. درک در آینده به ترتیب خصوصیات ترمودینامیکی یک گاز ایده‌آل نزدیک‌تر گاز
ایده‌آل نیز شاید برسیم.