بسم الله الرحمن الرحیم

۱۴۰۱/۷/۱۷ جلسه ۲

نقشه راه درس (۲)

Stochastic processes

* نگاه کلی به: ترمودینامیک، نظریه جنبشی، مکانیک آماری (تعادلی، غیرتعادلی)، پدیده‌های بحرانی

$\boxed{PV \stackrel{?}{=} NKT}$

$\boxed{\text{Statistical Mechan}}$

Phenomenological Description

(۱) ترمودینامیک: ☆ نقطه شروع مطالعه خواص ماکروسکوپیک

☆ مؤثر → توصیف پدیده‌شناختی

Effective Theory

Thermodynamical Equilibrium

علم ترمودینامیک: نظریه مؤثر که در حد ترمودینامیکی و در حالت تعادل از افت و خیز کمیت‌های مشاهده‌پذیر صرف نظر می‌کنیم

افت

fluctuation

observable quantities

Phase Transition

گذار فاز → "Thermodynamics limit"

$$\begin{cases} N \to \infty \\ V \to \infty \end{cases} \qquad \frac{N}{V} \to cte$$

صحبت خواهیم کرد

$$\boxed{\mathcal{O}(N) \sim \mathcal{O}(V)}$$

average

$$\langle f \rangle = \int d\Gamma\, f(\Gamma)\, \rho(\Gamma)$$

ρ_{mc}, ρ_{can}, ρ_{gc}

Variance

$$\sigma_f^2 = \langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle$$

$$= \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$$

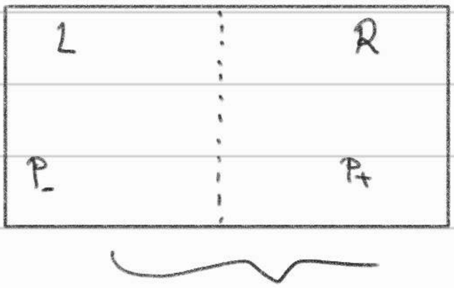
$$\frac{\sigma_f^2}{\langle f \rangle^2} = f \text{ افت و خیز نسبی در کمیت}$$

$$\sigma_T^2 = \langle (T - \langle T \rangle)^2 \rangle$$

$$= \langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2$$

$$\boxed{\text{typical fluctuat} \longrightarrow \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)}$$

Ex1:



ترتیب مهم

$$\boxed{P_+ + P_- = 1}$$

$N = 2^4 = 16 = \#$ of microstate

A = 1 All in Left $\longleftarrow \binom{4}{0} = \frac{4!}{0!\,4!} = 1$

A = 2 All in Right $\longleftarrow \binom{4}{4} = \frac{4!}{4!\,0!} = 1$

A = 3 Half - Half

A = 4 1 — 3

A = 5 3 — 1

Macro state

اصل مطابقت آماری در وضعیت تعادل آن

بزرگ حالتی رخ می‌دهد که بیشترین تعداد ریزحالت را داشته باشد

$$\binom{4}{2} = \frac{4!}{2!\,2!} = 6$$

$$\binom{4}{1} = 4$$

$$\binom{4}{3} = 4$$

$P_{A=1} = \frac{1}{16}$ $\qquad P_{A=3} = \frac{6}{16}$

$P_{A=2} = \frac{1}{16}$ $\qquad P_{A=4} = \frac{4}{16} = P_{A=5}$

$$\frac{6}{16} \sim \frac{4}{16}$$

$$P_{2-2} = \binom{N}{2} p_+^2 \, p_-^2$$

$$P_{n_R} \equiv P_{n_+} = \binom{N}{n_+} p_+^{n_+} \, p_-^{(N-n_+)}$$

Binomial Distribut

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^{2} n_i = N \\ \sum_{i}^{2} p_i = 1 \end{array} \right\}$$

$$\left.\frac{\partial P_{n_R}}{\partial n_R}\right|_{\bar{n}_R} = 0 \qquad \left.\frac{\partial^2 P_{n_R}}{\partial n_R^2}\right|_{n_R = \bar{n}_R}$$

$$\bar{n}_R = \langle n_R \rangle = \sum_{n_R=0}^{N} P_{n_R} \, n_R = N p_+$$

$$\sigma_{n_R}^2 = \langle [n_R - \langle n_R \rangle]^2 \rangle = \langle n_R^2 \rangle - \langle n_R \rangle^2 = N p_+ p_-$$

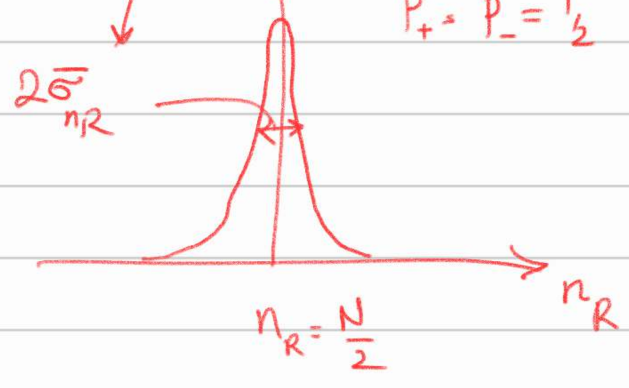
$P_+ \sim P_- \sim \mathcal{O}(1)$

$$(\text{fluctuation})^2 \equiv \frac{\sigma_{n_R}^2}{\langle n_R \rangle^2} = \frac{\cancel{N} \cancel{P_+} P_-}{N^{\cancel{2}} P_+^{\cancel{2}}} = \frac{P_-}{N P_+} \sim \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)$$

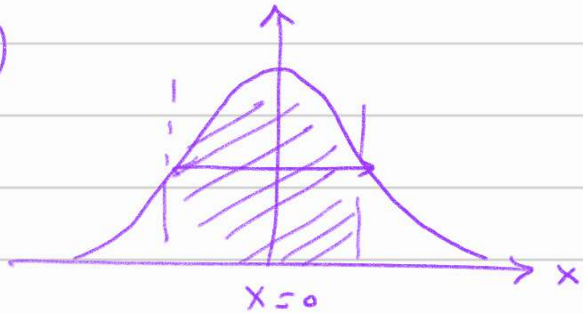
Mean Standard Deviation

$$\lim_{N \to \infty} \text{fluctuation} \sim \lim_{N\to\infty} \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) = 0$$

$P_+ = P_- = \frac{1}{2}$



$$P_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}}\, e^{-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right)}$$



$$100 \times \int_{-\sigma_x}^{+\sigma_x} dx\, P_G(x) = 68.3\%$$

95

Canonical Ensemble $\sigma_E^2 = \langle [\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle]^2 \rangle$

$$\sigma_E^2 = \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \underbrace{\langle \mathcal{H} \rangle}_{U}^2 = K_B T^2 \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial T} = K_B T^2 C$$

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\sigma_E^2}{\langle \mathcal{H} \rangle^2} \rightarrow \frac{\sigma_E}{\langle \mathcal{H} \rangle} \approx \frac{O(\sqrt{C})}{O(N)} \sim \frac{O(\sqrt{N})}{O(N)} = O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \rightarrow 0$$

Grand Canonical Ensemble $\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} Z\, e^{\beta\mu N}$

$$\underbrace{\left(\frac{\sigma_E^2}{\langle \mathcal{H} \rangle^2}\right)}_{\text{Grand Canon}} = \frac{(\sigma_E^2)_{\text{canonic}}}{\langle \mathcal{H} \rangle^2} + \underbrace{\frac{\sigma_N^2}{\langle \mathcal{H} \rangle^2}\left(\frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial N}\right)^2}$$

$$\frac{\sigma_N^2}{\langle N \rangle^2} = \frac{K_B T}{V^2} K_T \rightarrow \text{Isothermal Compersibility}$$

در گذار فاز که می‌تواند بزرگ بشود

$$K_T \equiv \frac{1}{\frac{V}{\langle N \rangle}} \left(\frac{\partial V_v}{\partial p}\right)_T$$

$$\sim \frac{O(N)}{O(N^2)} \sim O\left(\frac{1}{N}\right)$$

(۲) مکانیک آماری:

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + f(t)$$

$= \langle f(t) \rangle = 0$

$= \langle f(t) f(t') \rangle = \delta_D(t-t')$

$$\langle [f - \langle f \rangle]^2 \rangle = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$$

$$= \langle f^2 \rangle - 0 = \sigma_f^2$$

Moment $\quad M_m = \langle f^m \rangle = \int df \, f^m P(f)$

Cumulent $\quad \langle f^m \rangle_c =$

Connected moment

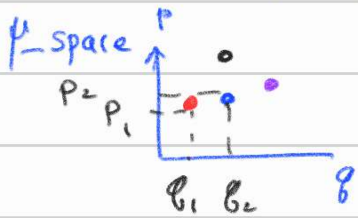
$$\langle f^1 \rangle = \langle f^1 \rangle_c ,$$

$$\langle f^2 \rangle_c = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$$

$$= M_2 - M_1^2$$

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle = \langle E \rangle$$

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \int \frac{d^{3N}_{\;\to D} q \; d^{3N}_{\;\to D} p}{h^{3N}_{\;\to D}} \, \rho(\bar{q}, \bar{p}) \, \mathcal{H}(q, p)$$



N = 3

D = 1

(q_1, p_1) $\quad (q_4, p_4)$

(q_2, p_2)

(q_3, p_3)

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{4} \frac{p_i^2}{2m}$$

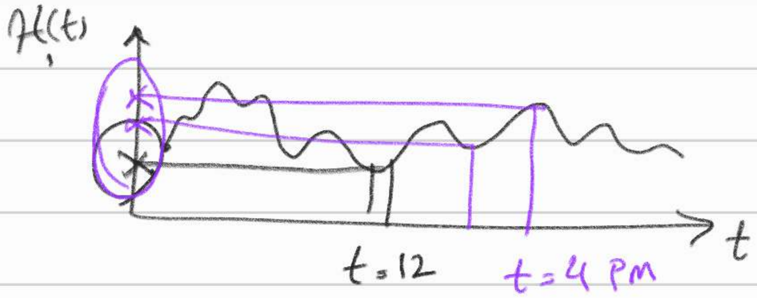
$$\langle \mathcal{H} \rangle_{ens} = \rho(\{q_1^{(1)}, q_2^{(1)}, q_3^{(1)}, q_4^{(1)}; p_1^{(1)}, p_2^{(1)}, p_3^{(1)}, p_4^{(1)}\}) \, \mathcal{H}(p_1^{(1)}, p_2^{(1)}, p_3^{(1)}, p_4^{(1)})$$

$$+ \rho(\{q_1^{(2)}, q_2^{(2)}, q_3^{(2)}, q_4^{(2)}\}) \, \mathcal{H}^{(2)} + \cdots$$

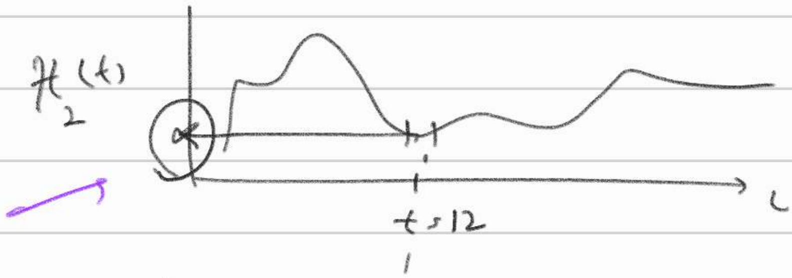
$$\rho \sim e^{-\beta \mathcal{H}}$$

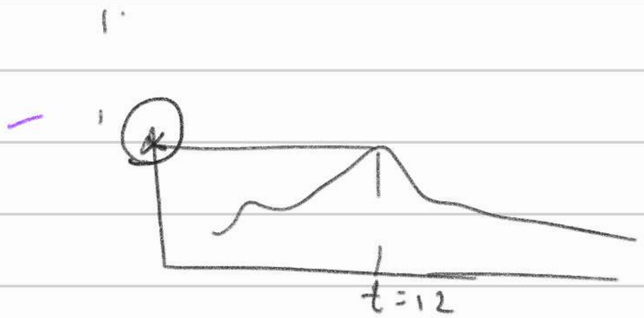
Ensemble_average — متوسط‌گیری هنگردی

Time_average — متوسط‌گیری زمانی



$= \langle \mathcal{H} \rangle_t$





برخلاف ترمودینامیک که فقط، شروع مقیاس ماکروسکوپیک است. در مکانیک آماری نقطه شروع کمیت‌های میکروسکوپیک است و می‌خواهیم به توصیف ماکروسکوپیک برسیم

در مکانیک آماری وجود انرژی ذرات که مورد توجه است

در ترازهای مختلف انرژی احتمال پیدا شدن ذرات چقدر است.

۳) نظریه جنبشی Kinetic Theory

کمک می‌کند برای بررسی خواص ماده که، با در نظر گرفتن تابع توزیع احتمال انرژی کمک کند

* Diffusion
* Brownian Motion , Transport

$$\frac{DP}{Dt} = C[P]$$

"Boltzmann Equation"

Collisional term

۴) چیزهایی که در آمار یاد می‌گیریم

- Processes in Equilibrium (Thermodynamical Equilibrium)
- Thermodynamic's laws , Thermodynamics Potentials
- Relation between Thermodynamics ⟷ Kinetic Theory

Thermodynamics ⟷ statistical mechan

Kinetic Theory → statistical mechan

- Statistical Mechanics (Classic, Quantum)

- Observable Quantities
  - Ensemble average
  - Most Probable Value

$$\langle f \rangle = \int dx\, f(x)\, \rho(x)$$

- Phase space
  - Γ-space → 6N-Dimensional → Pointer
  - μ-space → 6-Dimens

Point cloud

- Various Ensemble
  - Microcanonical Ensem
  - Canonical Ensem
  - Grand Canonical Ensemble

- Classical Statistical Mechanics
  - Harmonic oscillator
  - Magnetic System *
  - Ideal Gas with Internal Degrees of freedom

- Quantum Statistical Mechanics

BE ↔ FD

MB

- BE — Condensation

  Photonic Gas

  Black-Body Radiation

  Lattice Vibration (Phonon)

- FD — Degenerate System

  Fermi Gas

  Pauli Paramagnetism

  Landau Diamagnetism

  Electron Gas in metal

  Thermoionic Emission $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$

  Relativistic Fermi Gas

  Dowarf star → Black-hole

- Intracting System

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$$

Ex 2: $$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{P}_i^{\,2}}{2m} + \sum_{\substack{ij \\ i<j}}' u_{ij}$$

$u_{ij} = u(|r_i - r_j|)$

$$Z(T,V,N) = \frac{1}{N!\,h^{3N}} \int d^{3N}q \, d^{3N}p \; e^{-\beta \mathcal{H}}$$

$$= \frac{1}{N!\,h^{3N}} \int d^{3N}p \; e^{-\beta \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}} \int d^{3N}r \; \underbrace{e^{-\beta \sum_{ij} u(|r_i - r_j|)}}$$

$$= \underbrace{\frac{1}{N!} \left(\frac{1}{\lambda^3} \right)^N}\; \underbrace{\int d^{3N}r \; e^{-\beta \sum_{ij} u_{ij}}}_{Q_N(V,T)} \quad \underbrace{\sim}\; V^N$$

if $u_{ij} = 0 \longrightarrow Z = \frac{1}{N!} \left(\frac{1}{\lambda^3} \right)^N \int d^{3N}r$

$$\boxed{Z = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N}$$

$$Q_N(V,T) \equiv \int d^{3N}r \; e^{-\beta \sum_{ij} u_{ij}} = \int d^{3N}r \prod_{\substack{ij \\ i<j}} e^{-\beta u_{ij}}$$

$u_{ij} \sim 0 \longrightarrow f_{ij} \equiv \underbrace{e^{-\beta u_{ij}}} - 1 \sim 1$

$$\boxed{e^{-\beta u_{ij}} = f_{ij} + 1}$$

$$Q_N(T,V) = \int d^{3N}r \prod_{ij} (f_{ij} + 1)$$

$$= \int d r^{3N} \left\{ 1 + \sum_{ij} f_{ij} + \sum_{\substack{ij \\ kl}} f_{ij} f_{kl} + \cdots \right\}$$

$$= \int d r^{3N} + \int d r^{3N} \sum_{ij} f_{ij}$$

$$= V^N + V^{N-2} \sum_{ij} \int dr_i \, dr_j \, \underbrace{f_{ij}}_{1} + \cdots$$

$$= V^N + V^{N-2} \sum_{ij} \int d^3 r_i \, d^3 r_j \left(e^{-\beta u_{ij}} - 1\right) + \cdots \qquad \frac{R = |r_i - r_j|}{}$$

$$r_i \to R + r_j$$

$$dr_i \, dr_j \to dR \, dr_j$$

$$= V^N + V^{N-1} \underbrace{\binom{N}{2}}_{} \int \underline{d^3 R} \left(e^{-\beta u(\bar{R})} - 1\right) + \cdots$$

$$\frac{N(N-1)}{2} \sim \frac{N^2}{2}$$

$$= V^N + V^{N-1} \frac{N^2}{2} \underbrace{\int d^3 R \left(e^{-\beta u(R)} - 1\right)}_{a(T)} + \cdots$$

$$Q = V^N + V^{N-1} a(T) \frac{N^2}{2} + \cdots$$

$$Z(T, V, N) = \frac{1}{N!} \left(\frac{1}{\lambda^{3N}}\right) \left[V^N + V^{N-1} a(T) \frac{N^2}{2} + \cdots \right]$$

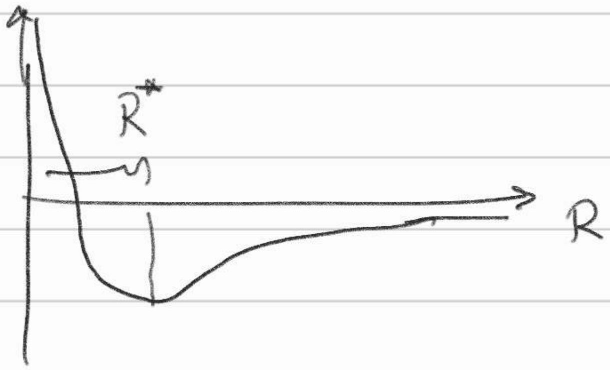
$$F = -k_B T \ln Z \quad \text{—} \quad P = -\frac{\partial F}{\partial V}$$

$$P = \frac{NKT}{V}\left(1 + \frac{a(T)N}{2V} + \cdots\right)$$

Virial Expansion

Mayer – Cluster Expansion Method

$U(R) =$



$U(R)$

Hard – Core

۵ در درس پدیده‌های بحرانی بیشتر به آن خواهیم پرداخت.