بسم الله الرحمن الرحیم

جلسه ۱۴ / ۱۰ / ۱۴۰۰

$p^2/2m$ Interaction Term

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{Kinetic} + \cancel{\hat{\mathcal{H}}_{Interaction}}$$

خلاصه جلسات قبلی: انرژی سیستم بدون برهمکنش

Ⓐ Operators form — شکل های عملگری را درنظر گرفتیم

$$\langle \hat{f} \rangle = Tr(\hat{\rho}\hat{f})$$

$$\hat{\rho}_{mc} = \frac{\delta_D(\hat{\mathcal{H}} - E\hat{1})}{Tr(\delta_D(\hat{\mathcal{H}} - E\hat{1}))}$$

$$\hat{\rho}_c = \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}}{Tr(e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}})} \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

$$\hat{\rho}_{gc} = \frac{e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{N})}}{Tr(e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{N})})} \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

$$Z = Tr(\hat{\rho})$$

توابع موج تک ذره

هیچ تقارنی ندارد

Ⓑ

$$\Psi_E^{MB} \equiv \prod_{i=1}^{N} \phi_{k_i}(\vec{r}_i)$$

ذره تمیزپذیر

n_{k_i} = تعداد ذرات در حالت k_i $= \{\emptyset \text{ or } 1\}$ فرض

ذرات تمیزناپذیر

متقارن

$$\Psi_E^{S} \cong \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P |k_{P_1} \dots k_{P_N}\rangle$$

پادمتقارن

$$\Psi_E^{A.S} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P |k_{P_1} \dots k_{P_N}\rangle$$

(c) $N=2$

$$\psi_E^{S} = \frac{1}{\sqrt{2!}}\left[\phi_{k_1}(r_1)\,\phi_{k_2}(r_2) + \phi_{k_2}(r_1)\,\phi_{k_1}(r_2)\right]$$

$$\psi_E^{A.S} = \frac{1}{\sqrt{2!}}\left[\phi_{k_1}(r_1)\,\phi_{k_2}(r_2) - \phi_{k_2}(r_1)\,\phi_{k_1}(r_2)\right]$$

دترمینان اسلیتر هم قابل نوشتن نیست

هیچ ردپایی از تقارن ندارد

$$\psi^{MB} = \phi_{k_1}(r_1)\,\phi_{k_2}(r_2)$$

Ex1 $|\psi_E\rangle^{A.S.\ or\ S.}$ - is normalized

$$|\psi_E\rangle^{A.S.\ or\ S.} = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\{P\}} \delta_P\, |k_{P_1} \ldots k_{P_N}\rangle$$

$$\delta_P \equiv (\pm 1)^P$$

Symmetric case

Anti-Symmetric case

(1) $\langle \psi_E^{A.S.\ or\ S.} | \psi_E^{A.S.\ or\ S.} \rangle \overset{?}{=} 1$

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\{P\}}\underbrace{\sum_{\{P'\}}}_{N!}(\pm 1)^P(\pm 1)^{P'}\langle k_{P_1}\ldots k_{P_N} | k_{P'_1}\ldots k_{P'_N}\rangle$$

تعداد

$$= \sum_{\{P\}}(\pm 1)^P \langle k_{P_1}\ldots k_{P_N} | k_{P'_1} \quad \underbrace{k_{P'_N}\rangle}_{\langle k_{P_N}|k_{P'_N}\rangle}$$

$$= \sum_{\{P\}}(\pm 1)^P\, \delta_D(k_{P_1}-k_{P'_1}) \ldots \delta_D(k_{P_N}-k_{P'_N})$$

$$= 1$$

کمی کشید مجدداً $\underline{N=2}$

② $Z(T,V,N) = Tr(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}})$

ذرات تمیز ناپذیر

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\{k_1 \dots k_N\}} {}^{A.S.}\langle k_1 \dots k_N | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | k_1 \dots k_N \rangle^{A.S.}$$

در توزیع تابع پارش حساب شده بریم

$\underline{N=2}$ for indistinguishable Particles. (e.g. Anti-Symmetric case)

$Z(T,V,2) = ?$

$$\psi^{A.S.}(r_1,r_2) = |k_1,k_2\rangle^{A.S} = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_{\{P\}} (-1)^P |k_{p_1} k_{p_2}\rangle$$

انجار کند

$$= \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[|k_1 k_2\rangle - |k_2 k_1\rangle \right]$$

هستند پشیم

$$= \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[\phi_{k_1}(r_1) \phi_{k_2}(r_2) - \phi_{k_2}(r_1) \phi_{k_1}(r_2) \right]$$

$$Z^{A.S.}(T,V,N=2) = \frac{1}{2!} \sum_{\{k_1,k_2\}=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[\langle k_1 k_2| - \langle k_2 k_1| \right] e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[|k_1 k_2\rangle - |k_2 k_1\rangle \right]$$

$k_1=1$ $k_1=2$
$k_2=1$ $k_2=2$

تکرار بندی حالت تکراری لازم

$$= \frac{1}{2!}\frac{1}{2!} \Big[\underbrace{\{ \langle k_1 k_2| - \langle k_2 k_1| \} e^{-\beta \mathcal{H}} \{ |k_1 k_2\rangle - |k_2 k_1\rangle \}}_{k_1 k_2}$$

$$+ \underbrace{\{ \langle k_2 k_1| - \langle k_1 k_2| \} e^{-\beta \mathcal{H}} \{ |k_2 k_1\rangle - |k_1 k_2\rangle \}}_{k_2 k_1} \Big]$$

$$= \frac{1}{2!} e^{-\frac{\beta\hbar^2}{2m}(k_1^2+k_2^2)} \left[1 \underset{\text{A.S.}}{\overset{\text{Symmet}}{\pm}} \delta_D(k_1 - k_2) \right]$$

$$Z^{\text{A.S. or S.}}(T,V,2) = \frac{1}{2!} \sum_{k_1=0}^{\infty} \sum_{k_2=0}^{\infty} e^{-\frac{\beta\hbar^2}{2m}(k_1^2+k_2^2)} \left(1 \pm \delta_D(k_1 - k_2)\right)$$

$V \to \infty$

$$\sum_k \to \int \frac{d^3k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

$$Z(T,V,2) = \frac{1}{2!} \left(\frac{V}{(2\pi)^3}\right)^2 \int d^3k_1 \int d^3k_2 \, e^{-\frac{\beta\hbar^2}{2m}(k_1^2+k_2^2)} \left(1 \pm \delta_D(k_1 - k_2)\right)$$

$$Z^{\text{A.S. or S.}}(T,V,2) = \frac{1}{2!} \frac{V^2}{\lambda^6} \left(1 \pm \frac{1}{2^{3/2}} \frac{\lambda^3}{V}\right)$$

$V \to \infty$

$\lambda \to 0$

Recall $Z^{\text{class}}(T,V,2) = \left(\frac{V}{\lambda^3}\right)^2 \times \frac{1}{2!}$

Gibbs Correct

$$\frac{\Delta Z}{Z^{\text{cl}}} = \frac{Z^{S.} - Z^{\text{class}}}{Z^{\text{class}}} = \frac{\cancel{\frac{1}{2!}\left(\frac{V}{\lambda^3}\right)^2} \left(\frac{1}{2^{3/2}} \frac{\lambda^3}{V}\right)}{\cancel{\frac{1}{2}\left(\frac{V}{\lambda^3}\right)^2}}$$

$$\lim \frac{\Delta Z}{Z^{\text{cl}}} \cong \frac{\lambda^3}{V} \longrightarrow 0$$

جمله دوم پیدا شده صرفاً ماهیت کوانتومی دارد

$V \to \infty$

$\lambda \to 0 \leftarrow$ localized partic

مفهوم جمع افزایی در این حالت چیست؟

مطالعه $\hat{\rho}$ در فضای مختصات

$N=2$

$$ {}^{A,S}\left\langle r_1' \, r_2' \right| \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}}{Z} \left| r_1 \; r_2 \right\rangle^{A,S} = \left[f(r_1'-r_1)\, f(r_2'-r_2) \pm f(r_1'-r_2)\, f(r_2'-r_1) \right] $$

متقارن

یادآوری $\quad f(r'-r) = \langle r' | e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} | r \rangle = \dfrac{1}{\lambda^3}\, e^{-\frac{\pi}{\lambda^2}(r'-r)^2}$ $\quad$ که قبلاً دیدیم

پادمتقارن

$N=1$

$$ \rho(r_1, r_2) = {}^{A,S}\langle r_1\, r_2 | \hat{\rho} | r_1\, r_2 \rangle^{A,S} $$

$$ \boxed{\rho(r_1, r_2) = \frac{1}{Z^{A,S}(T,V,2)} \, \frac{1}{\lambda^6} \left[1 \pm e^{-\frac{2\pi}{\lambda^2}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)^2} \right]} $$

احتمال اینکه ذره اول در r_1 باشد و ذره دوم در r_2 باشد

$\dfrac{V^2}{\lambda^6} + \mathcal{O}$

رژیم کاملاً کلاسیک

$\boxed{\mathcal{H} = P^2/2m \quad \text{وقتی}}$

ذره آزاد:

$$ \rho(r_1) = \frac{1}{V} \quad , \quad \rho_{\text{class.}}(r_1, r_2) = \frac{1}{V}\,\frac{1}{V} = \left(\frac{1}{V^2}\right) $$

تابعی r_1

$$ \rho(r_1, r_2) = \frac{1}{\lambda^6}\, \frac{1}{\frac{V^2}{\lambda^6}\left[1 + \frac{1}{2^{3/2}} \frac{\lambda^3}{V}\right]} \left[1 \pm e^{-\frac{2\pi}{\lambda^2}(r_1 - r_2)^2} \right] $$

$$ = \frac{1}{\cancel{\lambda^6}}\, \frac{\cancel{\lambda^6}}{V^2}\left[1 - \mathcal{O}(\lambda^3/V)\right] \left[1 \pm e^{-\frac{2\pi}{\lambda^2}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)^2} \right] $$

$$= \frac{1}{V^2}\left[1 \pm e^{-\frac{2\pi}{\lambda^2}(\bar{r}_1-\bar{r}_2)^2} + \mathcal{O}\left(\lambda^3/V\right)\right]$$

① $$\rightarrow \underline{\rho(r_1,r_2)} \simeq \frac{1}{V^2}\left[1 \pm e^{-\frac{2\pi}{\lambda^2}(\bar{r}_1-\bar{r}_2)^2}\right]$$

حالت کلاسیک

همبستگی بین دو ذره را نشان می‌دهد.

حالت کوانتومی

$|\bar{r}_1-\bar{r}_2|$, r_1, r_2, 1, 2

② $$\boxed{\rho(r_1,r_2) \equiv e^{-\beta \mathcal{U}(\bar{r}_1,r_2)}}$$

صرفاً یک تعریف است همین

فقط داریم یک مدل سازی انجام می‌دهیم.

متقارن

$$\mathcal{U}(\bar{r}_1,\bar{r}_2) = -K_BT \ln\left[1 \pm e^{-\frac{2\pi}{\lambda^2}(\bar{r}_1-\bar{r}_2)^2}\right]$$

پادمتقارن

نقش یک شبه پتانسیل را بازی می‌کند

Psudo-Intracting potential

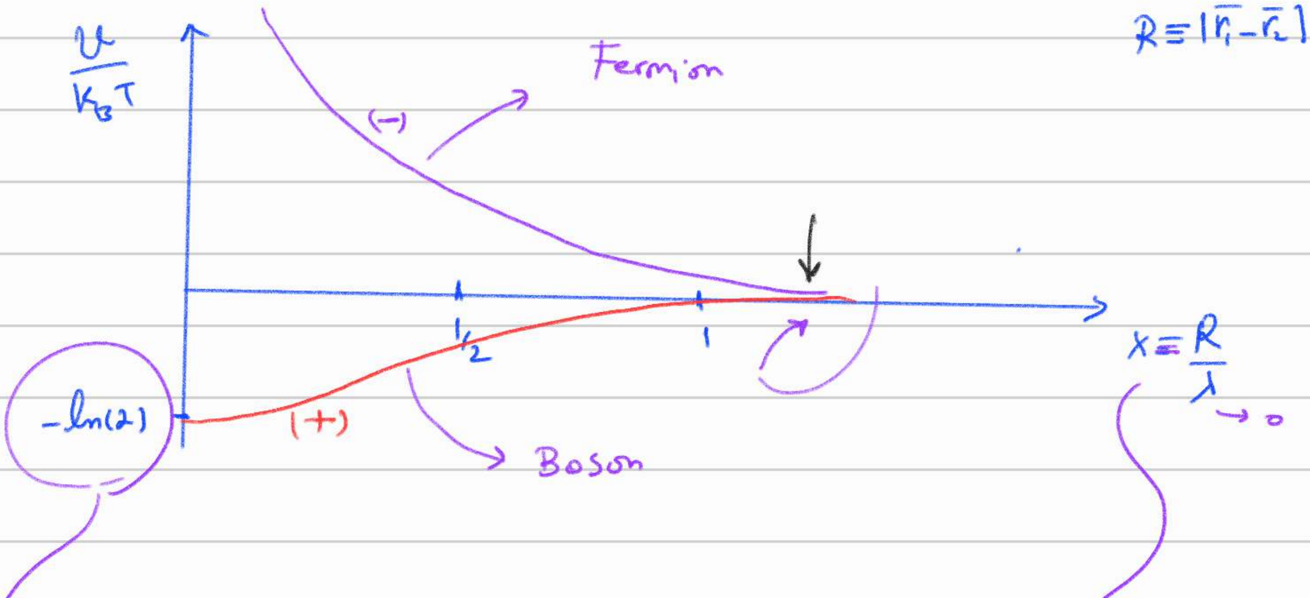
$$\boxed{\frac{\mathcal{U}}{K_BT} = -\ln\left[1 \pm e^{-2\pi x^2}\right] \qquad x = \frac{R}{\lambda}}$$

فرمیون ← اثر دافعی دارند ← پادمتقارن

بوزون‌ها ← اثر جاذبه دارند ← متقارن

یادآوری کوانتوم

$R \equiv |\bar{r}_1-\bar{r}_2|$



For Boson: $\frac{\mathcal{U}^{(S)}}{k_B T} = -\ln\left[1 + e^{-2\pi x^2/\lambda^2}\right]$

$$\frac{\mathcal{U}^{(S)}}{k_B T}(x = 0^+) = -\ln\left[1 + 1^-\right] = -\ln 2^- \to -\ln 2 < 0$$

مفهوم جاذبه نشان می‌دهد.

جاذب

$$\frac{\mathcal{U}^{(S)}}{k_B T}(x = \infty^-) = -\ln\left[1 + e^{-\infty^-}\right] = -\ln\left[1^+\right] = 0^-$$

For Fermions: $\frac{\mathcal{U}^{(A)}}{k_B T} = -\ln\left[1 - e^{-2\pi x^2/\lambda^2}\right]$

$$\frac{\mathcal{U}^{(A)}}{k_B T}(x = 0^+) = -\ln\left[1 - 1^-\right] = -\ln\left[0^+\right] \to \infty^+$$

مفهوم دافعه

$$\frac{\mathcal{U}^{(A)}}{k_B T}(x \to \infty^-) = -\ln\left[1^-\right] = 0^+$$

شبه پتانسیل ← در شبیه‌سازی‌ها وقتی می‌خواهیم ادعا کنیم که ذرات را می‌خواهیم شبیه‌سازی کنیم که ماهیت فرمیونی (یا بوزونی) داشته باشند

آزاد

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{p}^2/2m \longrightarrow \bar{\hat{\mathcal{H}}} = \hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{U}})$$

Psudo-Poten

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{Kin} + \mathcal{U}$$

ذرات کوانتومی آزاد ← فرمیونی / بوزونی

Bose-Einstein Condensed

خواص BE

For Bosonic System ← Bose_Enhancement

$\mathcal{U}$ ← به طور مؤثر به منزله نیروی جاذبه می‌شود ←

For Fermionic System ← Pauli_Blocking

اثر طرد پائولی → به طور مؤثر باعث ایجاد یک نیروی دافعه مؤثر می‌شود ← حل ✓

در فصل ۵ ☆ ابتدا جبر ماتریسی (عملگری) ← کلاسیک ← حالت عملگری.

Operators

Matrix Algebra

☆ Many Body System ← Well-Defined Symmetric Many Body Wavefunct

☆ Bose Enhancement

Pauli Blockings

فصل ۶ و ۷ و ۸

← حل مسائل ان‌جسمی ← سیستم‌های فرمیونی

← سیستم بوزونی

تصویر عدد اشغال Occupation No.
