جلسه ۵ مرداد ۱۴۰۰ بخش دوم

بسم الله الرحمن الرحیم

Chapter 5 : formulation of Quantum Statistics

classical statistics $\longrightarrow$ Quantum Statistics

(A) Operators (B) Wave function

(C) Discrete in Energy

(1) classical Regime $K_B T \gg \Delta E$

$n\lambda^3 \ll 1 \longrightarrow$ localized particle

$$\left\{ \begin{array}{l} n\lambda^3 > 1 \longrightarrow \text{Quantum Regim} \\ K_B T \lesssim \Delta E \end{array} \right.$$

(2) Observable Quantities $\longrightarrow$ Operator $\downarrow$ Expectation Value $\longrightarrow$ Observable Quantities

(3) Many-Body بس‌ذره‌ای

Wave function many-Body system

Well-Defined Symmetric wave function

$\psi_{Boson} = \psi^{Symmetric} \longleftarrow$ متقارن

$\underset{\text{Fermion}}{\Psi} \equiv \Psi$ Anti-symmetric ← پادمتقارن

classical system $\Psi_N = \prod_{i=1}^{N} \varphi_i$

خوش تعریف

تابع موج تک ذره‌ای

④ <u>Non-localized</u> <u>Wave function</u>,

⑤ Coordinate Representat $(\vec{q}, \vec{p}) \longrightarrow \rho(\vec{q}, \vec{p})$

Density of States $g_N(E)$

ذره اول در چه فضایی است

Occupation Number Representation $|K_1 \ldots K_N\rangle$

تابع موج N ذره‌ای

قید ذرات $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$

$$\underbrace{\{n_1, n_2, n_3, \ldots\}}_{\text{مشخص می‌کند چه تعداد ذره نشسته است}} + \underbrace{g(n_k)}_{\text{تبهگنی حالت}} \equiv |K_1, \ldots K_N\rangle$$

ذره اول

ذره Nام

کدام ذره در کدام تراز است

~~کدام ذره در کدام تراز است~~

K_1 ذره اول

K_{10} ذره ۱۰

<u>تفکیک آماری</u>

⑥ "Classical statistics"

$$f(\vec{q}, \vec{p}) \quad - \quad \langle f \rangle = \int d\Gamma \, f \, \rho$$

ρ_{micro}

ρ_{canon}

ρ_{grand}

تعادل ترمودینامیکی

$$0 = \frac{d\langle f \rangle}{dt} \longrightarrow \rho(\mathcal{H}) \, , \quad \boxed{\{\mathcal{H}, \rho\} = 0}$$

⑦ Quantum statistical mechanics

Microstate — $|\psi_E^{(i)}(t)\rangle$

که حالت های دسترسی پذیر سیستم با انرژی E است در زمان t

حول $(\vec{q}, \vec{p})$ در فضای فاز

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_E^{(i)}(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi_E^{(i)}(t)\rangle$$

$$f(\vec{q}, \vec{p}) \longrightarrow \hat{f} \quad \text{(operators)}$$

$$\downarrow \qquad\qquad\qquad \downarrow$$

$$\langle f \rangle_{en} \longrightarrow \langle \hat{f} \rangle : \text{expectation}$$

$$\underbrace{|\psi_E^{(i)}(t)\rangle}_{\text{در اینجا}} = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{a_n^{(i)}(t)}\ \underbrace{|\phi_n\rangle}_{\text{orthogonal.}}$$

مفهوم احتمال کوانتومی

احتمال اینکه ذره‌ای در $\left| a_n^{(i)}(t) \right|^2$

با $|\phi_n\rangle$ دیده شود.

مفهوم احتمال در مکانیک کوانتومی

- ماهیت آماری ← کلاسیک هم داریم. → $\boxed{w_i = ct}$
- ماهیت کوانتومی ← کلاسیک وجود ندارد $|a_n^{(i)}(t)\rangle$

⑧ classical statistical mechanics.

$$\begin{cases} \langle f\rangle_{ens} = \int d\Gamma\ \rho F \\ \quad = \sum_N \int d\Gamma\ \rho F \\ \quad = \sum_N \int dE\ g_N(E)\ \rho F \end{cases}$$

⑨ $$\langle \hat{F}\rangle = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \underbrace{\rho_{ij}}\ \langle \psi_{E_i}^{(i)}(t) | \hat{F} | \psi_{E_j}^{(j)}\rangle$$

$\boxed{\rho_{ii}\,\delta_{ij}}$

$\rho_{ii} = w_i = ct$ ← ماهیت آماری

$\rho_{ii} =$ احتمال اینکه ذره‌ای در تابع

$|\psi_{E_i}^{(i)}(t)\rangle$ تصویر شده باشد.

$$\underbrace{\langle \hat{F} \rangle} = \sum_{i=1}^{N} \rho_i \langle \psi_E^{(i)}(t) | \hat{F} | \psi_E^{(i)}(t) \rangle$$

احتمال اینکه زیرسیستم iام انتخاب شود.

تحول مستقل هر زیرسیستم iام

$$|\psi_E^{(i)}(t)\rangle = \sum_n a_n^{(i)}(t) |\phi_n\rangle$$

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_{i=1}^{N} \rho_i \sum_{nm} a_n^{*(i)}(t)\, a_m^{(i)}(t) \langle \phi_n | \hat{F} | \phi_m \rangle$$

$$= \sum_{nm} \underbrace{\sum_i \rho_i\, a_n^{*(i)}(t)\, a_m^{(i)}(t)} \langle \phi_n | \hat{F} | \phi_m \rangle$$

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_{nm} \underbrace{\rho_{mn}} \langle \phi_n | \hat{F} | \phi_m \rangle$$

آماری

کوانتومی

$$\rho_{mn} \equiv \sum_{i=1}^{N} \rho_i\, a_n^{*(i)} a_m^{(i)}$$

← ماتریس

المان m و n ام

احتمال آماری.

equal apriori probability

$$|a_n^{(i)}(t)|^2 =$$ احتمال اینکه زیرسیستم iام

در راستای $|\phi_n\rangle$ تصویر شده باشد

$$\langle \phi_n | \hat{F} | \phi_m \rangle$$

احتمال اینکه عنصر $\langle \phi_n | \hat{F} | \phi_m \rangle$ در مقدار متوسط $\langle F \rangle$ نقش داشته باشد.

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{\mathcal{H}} \psi(t)}$$

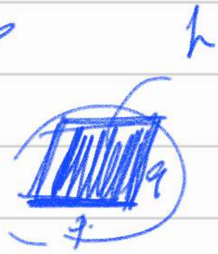
$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\phi_n\rangle$$

$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \checkmark$ $\qquad \Delta E \, \Delta t > \hbar$

وضعیت تعادل هسته $\leftarrow E(t)$

عدم تعیین در تعیین مقدار دقیق انرژی.

$\Delta p \Delta q$



$$\frac{dq\,dp}{h}$$

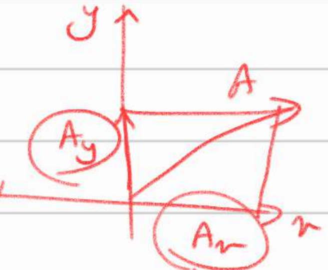
$\langle \mathcal{H} \rangle + \Delta E \cancel{\to 0}$

حد ترمودینامیک

$$\lim_{\substack{N\to\infty \\ V\to\infty}} \frac{\Delta E}{\langle \mathcal{H} \rangle} \to 0$$

$$\langle \phi_m | \psi^{(i)}(t) \rangle = \sum_n a_n(t) \langle \phi_m | \phi_n \rangle \qquad \delta_{mn}$$

$$= a_n \delta_{mn}$$



تصویر شد

ψ در راستای ϕ_n اطلاعاتیم $|a_n(t)|^2$

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi_n | \psi_E(t) \rangle$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_E(t)\rangle = \mathcal{H} |\psi_E(t)\rangle}$$

$|\psi\rangle$ ——— $\qquad |\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\phi_n\rangle$

حالت

حالت

$a(t)$

کوانتوم $\langle \hat{f} \rangle = \sum_{mn} \rho_{mn}(t) \langle \phi_n | \hat{f} | \phi_m \rangle$

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

حالا

$\rho_{mn}(t) = \ldots \longrightarrow \rho_{mn} = ?$

Initial Condit. $\longrightarrow$ Propagat (t)

$t = t_0$ ——— t

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \mathcal{H} \Psi \\ \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \end{array} \right.$$

$\hat{\mathcal{H}} \phi_n = E_n \phi_n$

از حل مقادیر ویژه

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum a_n \phi_n(x) \, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}$$

شرایط اولیه شکل مو — تحول زمانی

$$\boxed{a_n = \int dx \, \phi_n(x) \Psi(x,0)}$$