

Chapter Eight

دستگاه های N-ذره ای

Many-Particle Systems

بحث دستگاه های تک ذره ای ما به راحتی قابل تعمیم به دستگاه های N ذره ای است.

دستگاه N ذره ای با تابع موج $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ مشخص می شود که در آن این تابع موج به یک نرمالیزه است:

$$\int \int \dots \int dx_1 dx_2 \dots dx_N |\psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)|^2 = 1$$

یعنی:

$$|\Psi(x)|^2$$

تعمیم تعبیر

$$|\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2$$

تعبیر

$$|\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2$$

چگالی احتمال یافتن ذره 1 در x_1 ذره 2 در x_2 و ...

$$\rho(x_1) = N \int \dots \int dx_2 dx_3 \dots dx_N |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2$$

$$x_1 \longrightarrow x$$

که به آن تابع توزیع تک ذره نیز گویند.

$$\rho(x) = N \int \dots \int dx_2 dx_3 \dots dx_N |\Psi(x, x_2, \dots, x_N)|^2$$

تحول زمانی تابع موج سیستم بس ذره ای به صورت زیر توسط معادله شرودینگر وابسته به زمان انجام می شود:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)}{\partial t} = H\psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$$

که دوباره هامیلتونی متناظر با شکل کلاسیکی آن می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$$

$$H = -\hbar^2 \left(\frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{1}{2m_N} \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} \right) + V(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

تمام فرمالیزم قبلی کوانتوم مکانیک برای تک ذره به راحتی قابل تعمیم به حالت N ذره ای است با توجه به این نکته که اپراتورهای مشاهده پذیرهای تک ذره وقتی که به ذرات متفاوت اشاره می کند با هم جابه جا می شوند:

$$[p_i, x_j] = -i\hbar \delta_{ij}$$

اگر میدانهای خارجی وجود نداشته باشد مانند میدان گرانشی یا میدانهای خارجی الکتریکی و مغناطیسی آنگاه انرژی پتانسیل فقط به فاصله نسبی ذرات از یکدیگر بستگی دارد، یعنی

$$V = V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N)$$

زیرا جابه جایی کل دستگاه در غیاب میدان خارجی، که تا حدودی یک مبدا و شاید بهتر از آن یک جهت را هم مشخص می کند، نباید فیزیک مساله را تغییر دهد.

به عبارت دیگر شکل پتانسیل نتیجه ای از ناوردا بودن کمیت های فیزیکی مهم تحت انتقال است:

$$x_i \longrightarrow x_i + a$$

$$V = V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N)$$

که ناورداست.

$$V = V(x_1 + \cancel{a} - x_2 - \cancel{a}, x_1 + \cancel{a} - x_3 - \cancel{a}, \dots, x_{N-1} + \cancel{a} - x_N - \cancel{a})$$

یکی از حالات مهم شکل پتانسیل به شکل زیر است:

$$V = \sum_{\substack{i,j \\ i>j}} V(x_i - x_j)$$



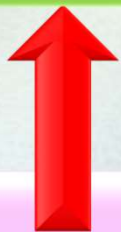
برای جلوگیری از دوباره شماری و شمارش $i=j$

در توصیف الکترونها یک اتم، ما هم پتانسیل کولنی جاذبه بین هسته و الکترونها را داریم و هم پتانسیل کولنی دافعه بین الکترون-الکترون را داریم.

در این حالت هسته یک مبدا را نسبت به نقاط دیگر فضا مشخص می کند.

در این صورت پتانسیل یک اتم شکل تعمیم یافته رابطه زیر است:

$$\sum_{i=1}^N W(x_i) + \sum_{\substack{i,j \\ i>j}} V(x_i - x_j)$$



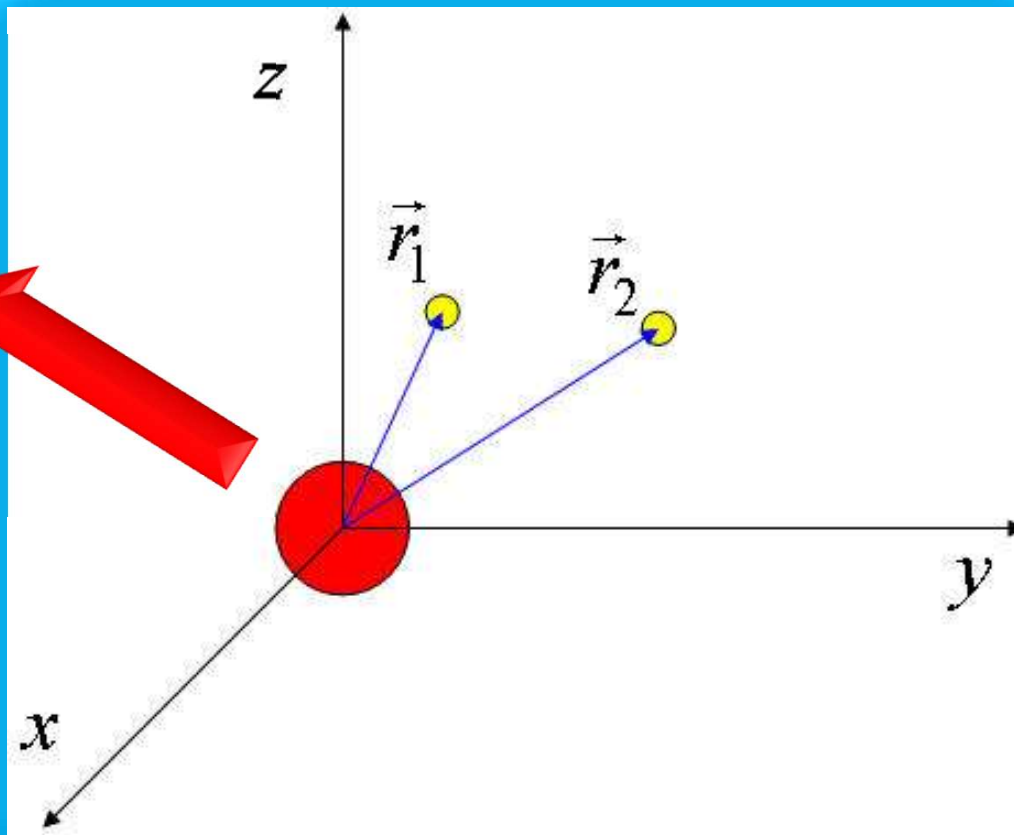
پتانسیل هسته روی الکترونها



پتانسیل دافعه الکترونها

یعنی هسته برای
الکترونها به عنوان
پتانسیل خارجی عمل
می کند و یک مبدا
مشخص می کند

پتانسیل به صورت تفاضل
فاصله نیست



$$\sum_{i=1}^N W(x_i)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_3^2 + \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} + \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\sum_{\substack{i,j \\ i>j}} V(x_i - x_j)$$

$$\sum_{i=1}^N W(x_i) = 0$$

وقتی که نیروی خارجی نداشته باشیم یعنی

آنگاه از مکانیک کلاسیک داریم که ممنتوم کل باید ثابت باشد.

نتیجه فوق در مکانیک کلاسیک از معادلات حرکت ناشی می شود

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = - \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N)$$

$i = 1, 2, \dots, N$



که در آن N تعداد ذرات می باشد که معادل با تعداد معادلات کوپل شده است

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N m_i \frac{dx_i}{dt} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1 - x_2, x_1 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N) = 0$$

چگونه؟

بنا به قانون سوم نیوتن

چرا مجموع فوق صفر می شود؟

$$x_1 - x_2 = x$$

$$\frac{\partial V(x_1 - x_2)}{\partial x_1} = \frac{\partial V(x_1 - x_2)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1} = \frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

$$\frac{\partial V(x_1 - x_2)}{\partial x_2} = \frac{\partial V(x_1 - x_2)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_2} = - \frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

$$\frac{\partial V(x_1 - x_2)}{\partial x_1} = - \frac{\partial V(x_1 - x_2)}{\partial x_2}$$

که همان قانون سوم نیوتن است که می گوید جمع نیروهای داخلی وارد بر یک مجموعه از ذرات همواره برابر صفر است.

$$\frac{\partial}{\partial x_1} V = - \frac{\partial}{\partial x_2} V$$

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N m_i \frac{dx_i}{dt} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N P_i = 0$$

$$\frac{d}{dt} P = 0$$

$$P = \text{cte.}$$

در مکانیک کوانتومی نیز نتیجه یکسانی می توان به دست آورد.

این نتیجه را با استفاده از این امر که پتانسیل تحت انتقال در غیاب نیروهای خارجی ناوردا باقی خواهد ماند به دست می آوریم.

$$Hu_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = Eu_E(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

ناوردایی تحت انتقال ایجاب می کند که اگر:

$$Hu_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) = Eu_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a)$$

آنگاه:

زیرا قبلا گفتیم که پتانسیل جفتی تحت تبدیل $x_i \rightarrow x_i + a$ ناورداست و از طرفی جمله اول H نیز یعنی انرژی جنبشی نیز تحت این تبدیل تغییر نمی کند. پس H ناورداست.

فرض کنید که a در تبدیل $x_i \rightarrow x_i + a$ خیلی کوچک باشد:

$$u_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) \approx u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) + a \frac{\partial}{\partial x_1} u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) + a \frac{\partial}{\partial x_2} u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) + \dots$$

$$u_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) - u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = a \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} u_E(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

$$Hu_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) - Hu_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = Eu_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) - Eu_E(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

$$H(u_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) - u_E(x_1, x_2, \dots, x_N)) = E(u_E(x_1 + a, x_2 + a, \dots, x_N + a) - u_E(x_1, x_2, \dots, x_N))$$

$$Ha \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = Ea \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} u_E(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

$$Ha \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = a \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} Eu_E(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

$$H a \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = a \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} E u_E(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

$$\cancel{H} a \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = \cancel{a} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} H u_E(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

$$p = \frac{\hbar}{i} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_i p_i$$

حال تعریف می کنیم:

$$(H p - p H) u_E(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0$$

و چون همان طور که قبلا گفته ایم هر تابع موج را می توان بر حسب بردارهای پایه بسط داد، بنابراین

$$(H p - p H) \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0$$



$$(H p - p H) = 0$$

$$[H, p] = 0$$

$$[H, p] = \frac{\hbar}{i} \frac{dp}{dt} = 0$$

$$p = \text{cte.}$$

این که اندازه حرکت کل دستگاه یک ثابت حرکت است یک نتیجه بسیار عمیق است از آن چه که طبیعت فضا و تقارن آن به ما می گوید.

یعنی این عبارت که بیان می کند که " مبدا خاصی وجود نداشته باشد که خود معادل ناوردا بودن تحت انتقال است " به یک قانون بقا منجر شد.

مثلا در فیزیک ذرات بنیادی که پتانسیلهایی از نوع کولنی نداریم باز هم قانون بقا را می توانیم از ناوردا بودن پتانسیل تحت انتقال نتیجه بگیریم.

علاقه مندی اصلی ما در این فصل به یک دستگاه دو ذره ی است، که آن را در زیر توصیف می کنیم.

برای یک دستگاه دو ذره ای غیر برهمکنشی هامیلتونی شکل ساده ای به صورت زیر دارد:

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2}$$

ما توقع داریم که چون ذرات به طور کامل با هم همبستگی ندارند، احتمال یافتن یکی در x_1 و دیگری در x_2 حاصل ضرب دو احتمال مستقل به صورت زیر باشد:

$$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_2)$$

بنابراین توقع داریم که جوابهای معادله زیر:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2)$$

به صورت زیر قابل جدا شدن باشند:

$$u(x_1, x_2) = \Phi_1(x_1)\Phi_2(x_2)$$

Silvia Taimay

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Phi_2(x_2) \frac{\partial^2 \Phi_1(x_1)}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Phi_1(x_1) \frac{\partial^2 \Phi_2(x_2)}{\partial x_2^2} \right) = E \Phi_1(x_1) \Phi_2(x_2)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{1}{\Phi_1(x_1)} \frac{\partial^2 \Phi_1(x_1)}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{1}{\Phi_2(x_2)} \frac{\partial^2 \Phi_2(x_2)}{\partial x_2^2} \right) = E = E_1 + E_2 = \text{cte.}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{1}{\Phi_1(x_1)} \frac{\partial^2 \Phi_1(x_1)}{\partial x_1^2} = E_1$$

$$\Phi_1(x_1) = e^{ik_1 x_1}$$

$$k_1^2 = \frac{2m_1 E_1}{\hbar^2}$$

$$u(x_1, x_2) = c e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{1}{\Phi_2(x_2)} \frac{\partial^2 \Phi_2(x_2)}{\partial x_2^2} = E_2$$

$$\Phi_2(x_2) = e^{ik_2 x_2}$$

$$k_2^2 = \frac{2m_2 E_2}{\hbar^2}$$

Ville Laimay

$$u(x_1, x_2) = ce^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)}$$

$$k_1^2 = \frac{2m_1 E_1}{\hbar^2}$$

$$k_2^2 = \frac{2m_2 E_2}{\hbar^2}$$

حال بیاید با تغییر متغیرهای زیر معادله را باز نویسی کنیم:

$$x = x_1 - x_2$$

جدایی
ذرات بین

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

مختصات مرکز
جرم

تمرین: نشان دهید که نمای تابع نمایی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\beta = k_1 + k_2 \equiv K$$

$$u(x_1, x_2) = c e^{ikx} e^{iKX}$$

$$\alpha = \frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_1 + m_2} \equiv k$$

نشان دهنده
حرکت داخلی

نشان دهنده
حرکت مرکز جرم



m_1



m_2

مرکز جرم

یعنی به طور کلاسیکی منظور این است که دو ذره می توانند نسبت به هم جابه جا شوند (جابه جایی داخلی - به عنوان مثال یک حرکت ارتعاشی نسبت به هم) و مرکز جرم آنها نیز یک جا به جایی کلی (مانند یک حرکت انتقالی کل سیستم دو ذره ای) داشته باشد.

تمرین: k_1 و k_2 را بر حسب k و K به دست آورید و نشان دهید که:

$$E = E_1 + E_2 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)$$

انرژی تک ذره ای به جرم $m_1 + m_2$ با ممنتوم $\hbar K$.

انرژی داخلی ناشی از حرکت دو ذره نسبت به مرکز جرم

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

اگر جرم کاهش یافته را به صورت
زیر تعریف کنیم:

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

حال اگر به دستگاه دو ذره ای غیر برهمکنشی یک پتانسیل برهمکنشی که فقط به
فاصله بین دو ذره بستگی داشته باشد را اضافه کنیم، خواهیم داشت:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) u(x_1, x_2) + V(x_1, x_2)u(x_1, x_2) = Eu(x_1, x_2)$$

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

$$x = x_1 - x_2$$

حال با استفاده از تغییر
متغیرهای زیر:

$$= \frac{m_1}{m_1 + m_2} x_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2} x_2$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}$$

Silvia Taimov

$$X = \frac{m_1}{m_1 + m_2} x_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2} x_2$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$X = \frac{\mu}{m_2} x_1 + \frac{\mu}{m_1} x_2$$

$$X = \frac{\mu}{m_2} x_1 + \frac{\mu}{m_1} x_2$$

$$x_1 = X + \frac{\mu}{m_1} x_2$$

$$x = x_1 - x_2$$

$$x_2 = X - \frac{\mu}{m_2} x$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial X}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x}$$

تمرین: با توجه به روابط فوق و رابطه زیر ثابت کنید که:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) u(x, X) = E u(x, X)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) u(x, X) = E u(x, X)$$

که اکنون می توان x و X را در $u(x, X)$ از هم جدا کرد زیرا پتانسیل فقط به x یعنی یکی از آنها بستگی دارد.

$$u(x, X) = e^{iKX} \Phi(x)$$

جواب زیر را امتحان می کنیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} (-K^2) \cancel{e^{iKX}} \Phi(x) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \cancel{e^{iKX}} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} + V(x) \cancel{e^{iKX}} \Phi(x) = E \cancel{e^{iKX}} \Phi(x)$$

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} \Phi(x) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} + V(x) \Phi(x) = E \Phi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} + V(x) \Phi(x) = \left(E - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} \right) \Phi(x) = \varepsilon \Phi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Phi(x) = \left(E - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} \right) \Phi(x) = \varepsilon \Phi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Phi(x) = \varepsilon \Phi(x)$$

$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)}$$

Identical Particles

ذرات یکسان

شواهدی وجود دارند که الکترونها تمایز ناپذیرند.

اگر الکترونها تمایز ناپذیر نبودند، آنگاه طیف مثلاً اتم هلیوم باید از آزمایشی به آزمایشی دیگر تغییر می کرد.

یعنی طیف بستگی به ترتیب الکترونها نسبت به یکدیگر پیدا می کرد، که البته تجربه نشان می دهد که این طور نیست.

یعنی تاکنون چنین چیزی به طور تجربی مشاهده نشده است.

همچنین پروتونها، نوترونها و مزونهاى پاى نيز تميز ناپذيرند.

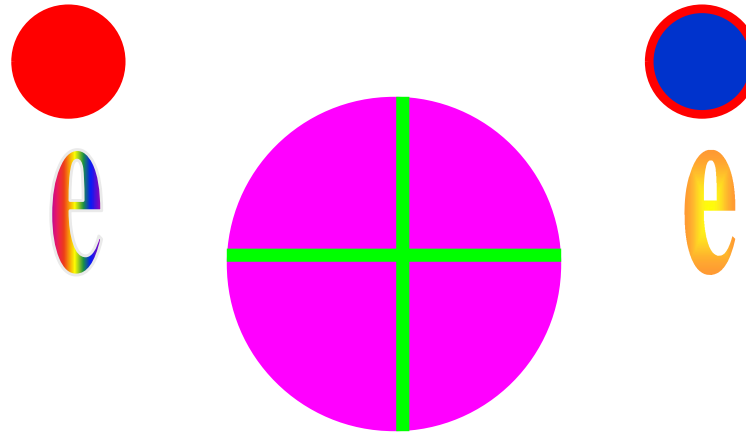
اين يك خاصيت كاملا مكانيك كوانتمى است، زيرا در مكانيك كلاسيك چنين چيزى نداريم.

در مكانيك كلاسيك دنبال كردن مدار ذرات امكان پذير است و بنا بر اين ذرات تمايز پذيرند.

از طرفى بايد بدانيم كه الكترونها با يك عدد كوانتمى به نام اسپين دسته بندى مى شوند.

بنا بر اين بايد در دسته بندى ذرات اسپين آنها را نيز مد نظر قرار داد .

براى اين منظور در حالتهاى ذرات اسپين بايك انديس مشخص مى شود.



$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + V(x_1, x_2)$$

$$H(1, 2) = H(2, 1)$$

$$H(1, 2)\Psi_E(1, 2) = E\Psi_E(1, 2)$$

$$H(2, 1)\Psi_E(2, 1) = E\Psi_E(2, 1)$$

$$P\Psi_E(1, 2) = \Psi_E(2, 1)$$

$$H(1, 2)\Psi_E(2, 1) = E\Psi_E(2, 1)$$

$$H(1, 2)P\Psi_E(1, 2) = EP\Psi_E(1, 2)$$

$$H(1, 2)P\Psi_E(1, 2) = PE\Psi_E(1, 2)$$

$$H(1, 2)P\Psi_E(1, 2) = PH\Psi_E(1, 2)$$

$$HP = PH \Rightarrow [H, P] = 0$$

Permutation is conserved

$$[H, P] = 0$$

P and H have common eigenstates

$$P\Psi(1, 2) = \lambda\Psi(1, 2)$$

$$P^2\Psi(1, 2) = \lambda P\Psi(1, 2)$$

$$\Psi(1, 2) = \lambda^2\Psi(1, 2)$$

$$\lambda = \begin{array}{|c|} \hline + \\ \hline - \\ \hline \end{array} 1$$

Bosons

Fermions

این واقعیت که عملگر جایگشت یک ثابت حرکت است ایجاب می کند که اگر حالتی از ابتدا متقارن باشد آنگاه همواره متقارن باقی بماند و اگر از ابتدا پاد متقارن باشد همواره پاد متقارن باقی بماند.

این یک قانون مهم طبیعت است که: متقارن بودن یا پادمتقارن بودن یک حالت از ذرات تحت تعویض ذرات یکی از از ویژگیهای آن ذرات است و چیزی نیست که ما با مرتب کردن ذرات بتوانیم آن را درست کنیم.

قانونی که توسط پاولی کشف شد بیان می کند که:

1) دستگاه هایی شامل ذرات یکسان با اسپین نصف اعداد صحیح فرد مانند $1/2$, $3/2$, $5/2$, ... با توابع موج پاد متقارن توصیف می شوند.

چنین ذراتی فرمیون نامیده می شوند که از توزیع آماری فرمی-دیراک پیروی می کنند.

۲) دستگاه هایی شامل ذرات یکسان با اسپین صحیح $0, 1, 2, \dots$ با توابع موج متقارن توصیف می شوند.

چنین ذراتی بوزن نامیده می شوند که از توزیع آماری بوز-انشتین پیروی می کنند.



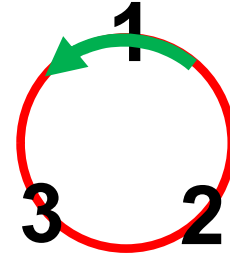
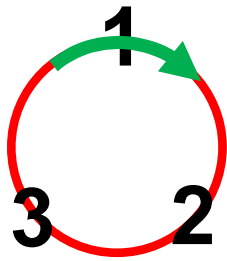
Always we can separate a wavefunction into symmetric and asymmetric parts

For two particles we have

$$\Psi(1, 2) = \frac{1}{2}(\Psi(1, 2) + \Psi(2, 1)) + \frac{1}{2}(\Psi(1, 2) - \Psi(2, 1))$$

$$\Psi(1, 2) = \frac{1}{2}\sqrt{2}\Psi^{(S)}(1, 2) + \frac{1}{2}\sqrt{2}\Psi^{(A)}(1, 2)$$

$$\Psi(1, 2) = \frac{\sqrt{2}}{2} \left\{ \Psi^{(S)}(1, 2) + \Psi^{(A)}(1, 2) \right\}$$



For three particles we can write

$$\Psi^{(S)}(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\Psi(1, 2, 3) + \Psi(2, 3, 1) + \Psi(3, 1, 2) + \Psi(1, 3, 2) + \Psi(3, 2, 1) + \Psi(2, 1, 3)]$$

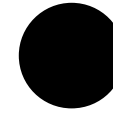
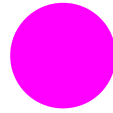
$$\Psi^{(A)}(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\Psi(1, 2, 3) + \Psi(2, 3, 1) + \Psi(3, 1, 2) - \Psi(1, 3, 2) - \Psi(3, 2, 1) - \Psi(2, 1, 3)]$$

For non-interacting particles

$$\Psi^{(A)}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_{\varepsilon_1}(1) \Psi_{\varepsilon_2}(2) - \Psi_{\varepsilon_1}(2) \Psi_{\varepsilon_2}(1) \right]$$

$$\Psi^{(S)}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_{\varepsilon_1}(1) \Psi_{\varepsilon_2}(2) + \Psi_{\varepsilon_1}(2) \Psi_{\varepsilon_2}(1) \right]$$

$$\Psi^{(A)}(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{\varepsilon_1}(1) & \Psi_{\varepsilon_1}(2) & \dots & \Psi_{\varepsilon_1}(N) \\ \Psi_{\varepsilon_2}(1) & \Psi_{\varepsilon_2}(2) & \dots & \Psi_{\varepsilon_2}(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{\varepsilon_N}(1) & \Psi_{\varepsilon_N}(2) & & \Psi_{\varepsilon_N}(N) \end{vmatrix}_{N \times N}$$



$$\Psi^{(A)}(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{\varepsilon_1}(1) & \Psi_{\varepsilon_1}(2) & \dots & \Psi_{\varepsilon_1}(N) \\ \Psi_{\varepsilon_2}(1) & \Psi_{\varepsilon_2}(2) & \dots & \Psi_{\varepsilon_2}(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{\varepsilon_N}(1) & \Psi_{\varepsilon_N}(2) & \dots & \Psi_{\varepsilon_N}(N) \end{vmatrix}_{N \times N}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{\varepsilon_1}(2) & \Psi_{\varepsilon_1}(1) & \dots & \Psi_{\varepsilon_1}(N) \\ \Psi_{\varepsilon_2}(2) & \Psi_{\varepsilon_2}(1) & \dots & \Psi_{\varepsilon_2}(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{\varepsilon_N}(2) & \Psi_{\varepsilon_N}(1) & \dots & \Psi_{\varepsilon_N}(N) \end{vmatrix}_{N \times N}$$

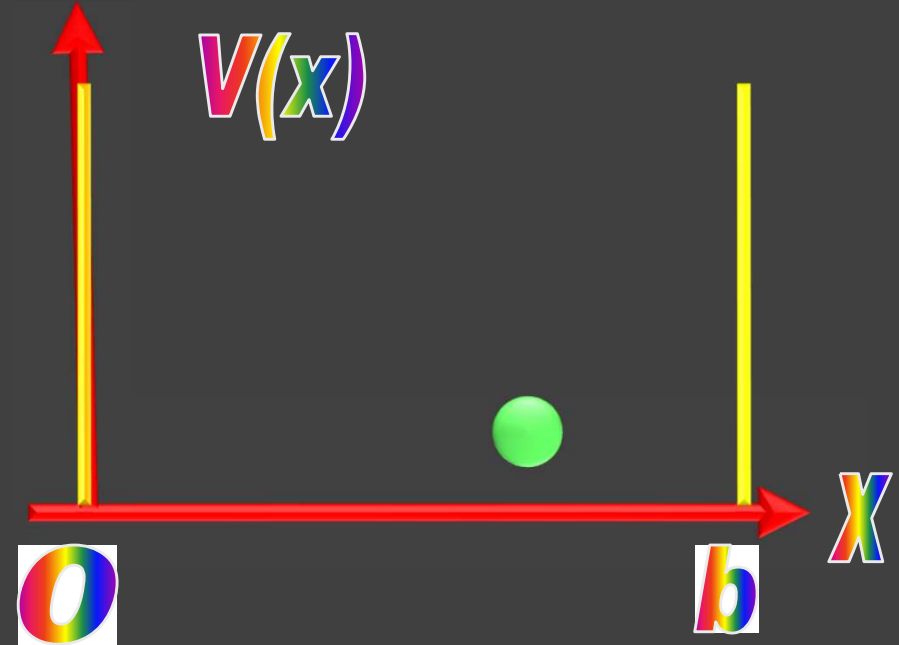
**Antisymmetric
property is
satisfied.**

$$\begin{cases} \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 \Rightarrow \Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} | \quad | = 0 \\ i \longleftrightarrow j \Rightarrow \Psi = -\Psi \end{cases}$$

پس اصل طرد پاولی
رعایت شده است

انرژی حالت پایه N ذره الف (بوزنی و ب) فرمیونی غیر برهمکنشی محبوس در یک پتانسیل یک بعدی

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < b \\ \infty & |x| \geq b \end{cases}$$



$$\forall |x| \geq b \longrightarrow u(x) = 0 \longrightarrow u(0) = u(b) = 0$$

$$u_n(x) \propto \sin \frac{n\pi x}{b}$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$$

انرژی حالت پایه بدون قید اصل طرد پاولی

الف) N بوزن غیر برهمکنشی

$$E = N \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$$

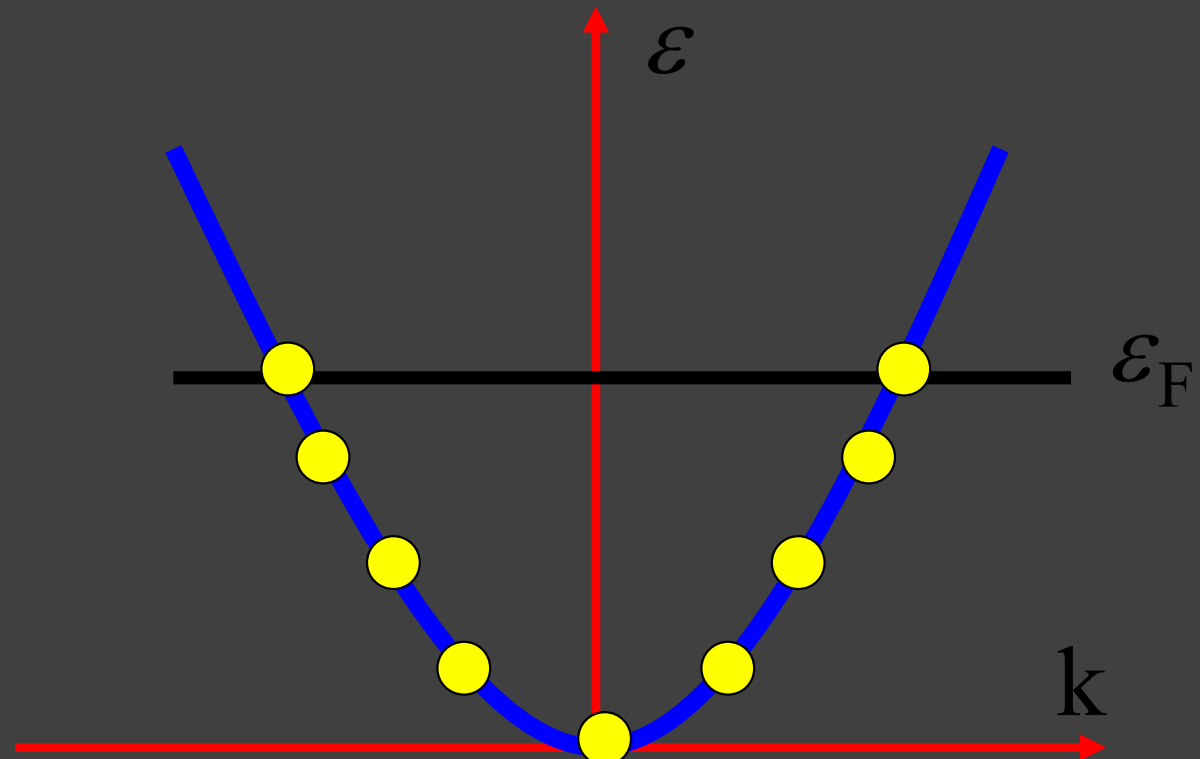
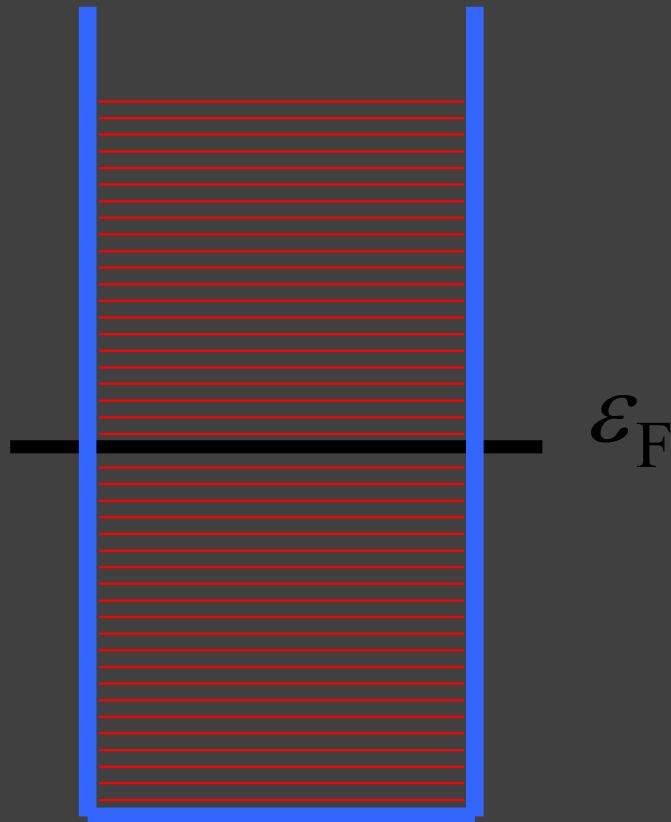
$$E / N = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$$

انرژی حالت پایه با رعایت اصل طرد پاولی

$N/2$ حالت پرمی شود

ب) N فرمیون غیر برهمکنشی

در این حالت فقط دو فرمیون می تواند در یک حالت قرار گیرند



$$E = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$$

به دلیل اسپین

$$\sum_{n=1}^{N/2} n^2 \approx$$

$$\int_1^{N/2} n^2 dn = \left[\frac{1}{3} n^3 \right]_1^{N/2} = \frac{1}{3} \left[(N/2)^3 - (1)^3 \right]$$

$$\approx \frac{1}{3} (N/2)^3$$

$$E = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mb^2} \frac{N^3}{24}$$

$$E / N = \frac{\pi^2 \hbar^2}{24mb^2} N^2$$

صرف نظر کردن از یک معادل این است که بگوییم در تراز آخر نگران آن نیستیم که این تراز آخر با یک الکترون پر شود یا با دو الکترون.

که نشان می دهد انرژی بر واحد ذره با تعداد ذرات به صورت N^2 افزایش پیدا می کند در حالی که در مورد بوزنها E/N ثابت بود.

بوزن

$$E / N = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$$

$$N = \begin{cases} CE \\ C'E^{1/3} \end{cases}$$

$$N \propto \begin{cases} E \\ E^{1/3} \end{cases}$$

$$E / N = \frac{\pi^2 \hbar^2}{24mb^2} N^2$$

فرمیون

در حالت فرمیونی بالاترین تراز می تواند با فرمیونها پر شود حالتی است که در آن $n=N/2$ شود.

$$E(n = N / 2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} (N / 2)^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2 N^2}{8mb^2} = E_F = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \rho^2$$

= چگالی فرمیونها

$$\rho = N / b$$

خلاصه این که اصل طرد پاولی در تعیین ساختار اتمی، ملکولی و جامدات نقش بسیار مهمی ایفا می کند.

What is the lowest energy of a set of 24 electrons in a cubical box? What would it be in the absence of the exclusion principle?

SOLUTION The energy in units of $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ is $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ with $(n_1, n_2, n_3) = 1, 2, 3, \dots$. The energies and the number of electrons for each energy, corresponding to the integers are, in order,

$(1, 1, 1) \rightarrow 3$	2 electrons
$(2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2) \rightarrow 6$	$3 \times 2 = 6$ electrons
$(2, 2, 1), (2, 1, 2), (1, 2, 2) \rightarrow 9$	$3 \times 2 = 6$ electrons
$(3, 1, 1), (1, 3, 1), (1, 1, 3) \rightarrow 11$	$3 \times 2 = 6$ electrons
$(2, 2, 2) \rightarrow 12$	2 electrons
$(3, 2, 1), (3, 1, 2), (2, 3, 1), (2, 1, 3), (1, 2, 3), (1, 3, 2) \rightarrow 14$	12 electrons

We see that energy levels 3, 6, 9, 11, 12 can hold 22 electrons, so that the remaining 2 electrons are in the energy 14 levels. Thus the total energy in our units is $(2 \times 3) + (6 \times 6) + (6 \times 9) + (6 \times 11) + (2 \times 12) + (2 \times 14) = 214$. In the absence of the exclusion principle, all of the electrons would go into the lowest energy state, so that the total energy would be $24 \times 3 = 72$.

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = 1$$

$$E = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

(n_x, n_y, n_z)	$E = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$	Degeneracy	Number of Electrons
(1, 1, 1)	$3 = 1^2 + 1^2 + 1^2$	1	$1 \times 2 = 2$
(2, 1, 1)	$6 = 2^2 + 1^2 + 1^2$	3	$3 \times 2 = 6$
(1, 2, 1)	$6 = 1^2 + 2^2 + 1^2$		
(1, 1, 2)	$6 = 1^2 + 1^2 + 2^2$		
(2, 2, 1)	$9 = 2^2 + 2^2 + 1^2$	3	$3 \times 2 = 6$
(2, 1, 2)	$9 = 2^2 + 1^2 + 2^2$		
(1, 2, 2)	$9 = 1^2 + 2^2 + 2^2$		
(3, 1, 1)	$11 = 3^2 + 1^2 + 1^2$	3	$3 \times 2 = 6$
(1, 3, 1)	$11 = 1^2 + 3^2 + 1^2$		
(1, 1, 3)	$11 = 1^2 + 1^2 + 3^2$		
(2, 2, 2)	$12 = 2^2 + 2^2 + 2^2$	1	$1 \times 2 = 2$

(n_x, n_y, n_z)	$E = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$	Degeneracy	Number of Electrons
$(3, 2, 1)$	$14 = 3^2 + 2^2 + 1^2$	6	$6 \times 2 = 12$
$(3, 1, 2)$	$14 = 3^2 + 1^2 + 2^2$		
$(2, 3, 1)$	$14 = 2^2 + 3^2 + 1^2$		
$(2, 1, 3)$	$14 = 2^2 + 1^2 + 3^2$		
$(1, 2, 3)$	$14 = 1^2 + 2^2 + 3^2$		
$(1, 3, 2)$	$14 = 1^2 + 3^2 + 2^2$		

(6)

$$E = 14$$



$$N = 22 + 2 = 24, E = 186 + 28 = 214$$

$$E = 2 \times 14 = 28$$

(1)

$$E = 12$$



$$N = 22, E = 186$$

$$E = 2 \times 1 = 24$$

(3)

$$E = 11$$



$$N = 14 + 6 = 20, E = 96 + 66 = 162$$

$$E = 6 \times 11 = 66$$

(3)

$$E = 9$$



$$N = 8 + 6 = 14, E = 42 + 54 = 96$$

$$E = 6 \times 9 = 54$$

(3)

$$E = 6$$



$$N = 2 + 6 = 8, E = 6 + 36 = 42$$

$$E = 6 \times 6 = 36$$

(1)

$$E = 3$$



$$N = 2, E = 6$$

$$E = 2 \times 3 = 6$$

$$E = 214 \times \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{107 \hbar^2 \pi^2}{mL^2}$$

انرژی در حضور اصل طرد پاولی:

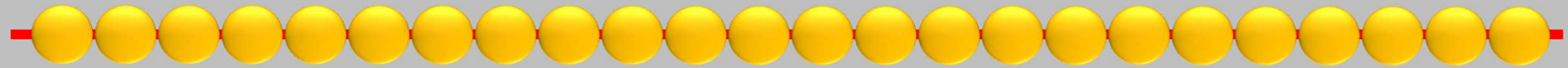
(1)

انرژی در غیاب اصل طرد:

$$E = 3$$

$$N = 24, E = 3 \times 24 = 72$$

$$E = 72 \times \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{36 \hbar^2 \pi^2}{mL^2}$$



در فصلهای بعد خواهیم دید که یک مجموعه کامل از مشاهده پذیرهای جابه جا شونده برای الکترونها شامل یک مشاهده پذیر دو مقداره اضافی مربوط به اسپینها وجود دارد.

بنابراین یک حالت با انرژی معین، اندازه حرکت زاویه ای، پاریته و غیره می تواند با دو الکترون (با اسپینهای متفاوت بالا و پایین) اما نه با بیشتر از دو الکترون اشغال شود. این بیانی از اصل طرد پاولی است.

عبارت "دو الکترون نمی تواند در یک حالت کوانتومی باشد" توجه ما را به ماهیت کلی آن جلب می کند.

فرض کنید که یک هیدروژن روی زمین و هیدروژن دیگری در روی کره ماه داشته باشیم که هریک در حالت زمینه خود باشند.

آیا باید طبق اصل طرد پاولی اسپین الکترونها متفاوت باشد؟

پاسخ این است که روی هم افتادگی توابع موج (پیوند) به طور
نمایی با فاصله اتمها از یکدیگر کاهش می یابد (اصل طرد: پتانسیل
دافعه در لینارد جونز $\exp(-\rho R)$ یا σ/R^{12})

بنابراین اصل طرد فقط وقتی باید رعایت شود که فاصله اتمها از یکدیگر به اندازه
ای باشد که روی هم افتادگی داشته باشیم.

مثلا برای دو اتم که به فاصله یک متر از یکدیگر قرار گرفته اند به رعایت اصل
طرد نیازی نیست.

نکته: حالت پایه یک دستگاه فرمیونی با یک دستگاه بوزنی متفاوت است.

تست 1: یک سیستم فیزیکی متشکل از پنج ذره مشابه غیر برهمکنشی به جرم m و اسپین $1/2$ را در نظر بگیرید. این ذرات تحت تاثیر پتانسیل هماهنگ ساده یک بعدی قرار دارند. این سیستم در حالت پایه خود می باشد. به جای این پنج ذره چه تعداد ذره بوزونی مشابه با همان جرم m و تحت تاثیر همان پتانسیل دارای حالت پایه ای با همان انرژی حالت پایه سیستم اولیه می باشند؟

4) 25

3) 17

2) 13

1) 5

$$E_F = 2(1 / 2\hbar\omega) + 2(3 / 2\hbar\omega) + 5 / 2\hbar\omega = 13 / 2\hbar\omega$$

$$E_B = B(1 / 2\hbar\omega)$$

$$E_B = E_F$$

$$B(1 / 2\hbar\omega) = 13 / 2\hbar\omega$$

$$B = 13$$

تست 2: چهار ذره یکسان با اسپین $1/2$ که اسپین کل آنها در راستای z برابر $2\hbar$ است در پتانسیل نوسانگر هارمونیک ساده یک بعدی قرار دارند. انرژی پایه این سیستم چقدر است؟

4) $8\hbar\omega$

3) $12\hbar\omega$

2) $4\hbar\omega$

1) $2\hbar\omega$

$$S_1 = 1/2\hbar$$

اسپین هر الکترون

$$S = 2\hbar$$

اسپین کل

$$1/2\hbar + 1/2\hbar + 1/2\hbar + 1/2\hbar = 2\hbar$$

یعنی همه الکترونها اسپین بالا هستند

بنابراین طبق اصل طرد نمی توانند در یک تراز قرار گیرند.

$$E = 1/2\hbar\omega + 3/2\hbar\omega + 5/2\hbar\omega + 7/2\hbar\omega = 8\hbar\omega$$

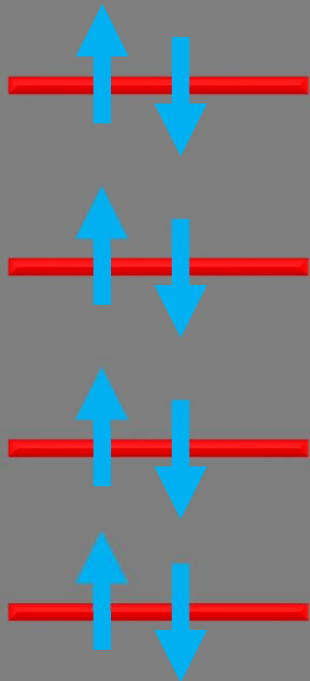
تست 3: درون یک چاه پتانسیل متقارن یک بعدی غیر قابل نفوذ به طول L تعداد 8 الکترون قرار دارد. بالاترین تراز انرژی پر شده در این چاه کدام است؟

4) $\frac{2h^2}{m_e L^2}$

3) $\frac{\hbar^2}{4m_e L^2}$

2) $\frac{\hbar^2}{2m_e L^2}$

1) $\frac{4\hbar^2}{m_e L^2}$



$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2}$$

$$n = 4$$

$$E_F = \frac{2h^2}{m_e L^2}$$

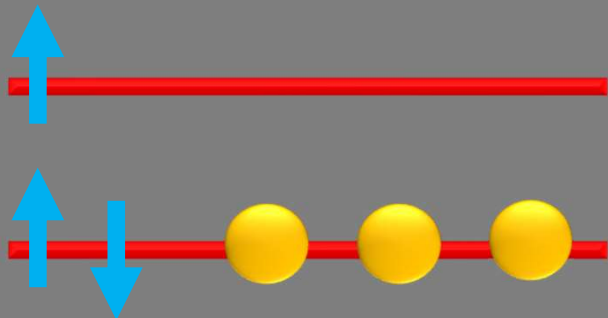
تست 4: یک ذره به جرم m در چاه پتانسیل بینهایت یک بعدی به طول a را در نظر بگیرید. در صورتی که این چاه حاوی سه ذره فرمیونی یکسان با اسپین $1/2$ و جرم m_f و سه ذره بوزونی یکسان به جرم m_b باشد، انرژی حالت پایه این سیستم چقدر است؟ (ذرات با یکدیگر برهمکنش نمی کنند)

$$2) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2} \left(\frac{6}{m_b} + \frac{3}{m_f} \right)$$

$$1) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2} \left(\frac{3}{m_b} + \frac{17}{m_f} \right)$$

$$4) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2} \left(\frac{3}{m_b} + \frac{3}{m_f} \right)$$

$$3) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2} \left(\frac{3}{m_b} + \frac{6}{m_f} \right)$$



$$E = 3 \times \frac{1^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_b a^2} + 2 \times \frac{1^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_f a^2} + 1 \times \frac{2^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_f a^2}$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2} \left(\frac{3}{m_b} + \frac{6}{m_f} \right)$$