MIT Açık Ders Malzemeleri

http://ocw.mit.edu

8.333 İstatistiksel Mekanik I: Parçacıkların İstatistiksel Mekaniği

2007 Güz

VII. İdeal Kuantum Gazları

VII.A Özdeş parçacıkların Hilbert Uzayı

IV. bölümde özdeş parçacıklı gazların karışma entropisi için Gibbs paradoksunu tartışmıştık. Bu zorluğun üstesinden, faz uzayının, N tane özdeş parçacığın permütasyon sayısı olan $N!$'e bölünmesi gerektiğini doğru kabul ederek gelinmişti. Klasik hareket denklemleri, parçacıkları kesin ayrık olarak aldığı için bu çok tatmin edici bir çözüm değildir. Bunun aksine kuantum mekaniğinde parçacıkların özdeşlikleri Hilbert uzayında izin verilen durumlar düzeyinde ortaya çıkmaktadır. Örneğin, $\vec{x}_1$ ve $\vec{x}_2$ konumlarında iki özdeş parçacık bulma olasılığı $|\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|^2$ şeklindedir. 1. ve 2. parçacığın birbirleriyle yer değiştirilmeleri aynı konfigürasyonları vereceği için $|\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|^2 = |\Psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1)|^2$ eşitliğini almalıyız. Tek değerli bir fonksiyon için bu durum iki olasılık doğurur;

$$|\psi(1,2)\rangle = +|\psi(2,1)\rangle, \quad \text{veya} \quad |\psi(1,2)\rangle = -|\psi(2,1)\rangle \quad . \tag{VII.1}$$

Bu nedenle özdeş parçacıkları tanımlamada kullanılan Hilbert uzayı belirli simetrilere uymak zorundadır.

N tane özdeş parçacığın oluşturduğu bir sistem için $N!$ sayıda P permütasyonu bulunur ve bunlar S_N grubunu oluşturur. Bir permütasyonu temsil etmenin bir takım yolları vardır; örneğin, $N = 4$ iken $P(1\ 2\ 3\ 4) = (3\ 2\ 4\ 1)$ permutasyonu şu şekilde de gösterilebilir,

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 4 & 1 \end{pmatrix} . \tag{VII.2}$$

Herhangi bir permütasyon, bir dizi iki parçacık yer değiştirme işlemleri sonucunda elde edilebilir. Örneğin yukarıdaki permütasyon, sırasıyla (1,3) ve (1,4) yer değiştirilmeleri ile elde edilmiştir. Bir permütasyonun *paritesi* şu şekilde tanımlanır:

$$(-1)^P = \begin{cases} +1 & \text{eğer } P \textit{ çift} \text{ sayıda yer değiştirme gerektiriyorsa, örn. } (1\ 2\ 3)\to(2\ 3\ 1) \\ -1 & \text{eğer } P \textit{ tek} \text{ sayıda yer değiştirme gerektiriyorsa, örn. } (1\ 2\ 3)\to(2\ 1\ 3) \end{cases}$$

(Eğer (VII.2) denklemindeki her bir tamsayının başlangıç ile son konumlarını birleştirecek çizgiler çizilirse, parite (-1) üzeri bu çizgilerin kesişme sayısı olur.)

Bir N-parçacıklı kuantum durumuna permütasyonların etkimesi, Hilbert uzayında permütasyon grubunun bir gösterimini oluşturur. Dalga fonksiyonunun tek değerli olması ve parçacık değişimi altında eşit olasılıkların verilmesi gereklilikleri, gösterimi tam olarak ya simetrik ya da antisimetrik olması için kısıtlar. Bu, doğada iki tip özdeş parçacık olmasını sağlar:

(1) **Bozonlar** tam simetrik gösterimle uyumludurlar

$$P|\psi(1,\cdots,N)\rangle = +|\psi(1,\cdots,N)\rangle.$$

(2) **Fermiyonlar** tam anti-simetrik gösterimle uyumludurlar,

$$P|\psi(1,\cdots,N)\rangle = (-1)^{P}|\psi(1,\cdots,N)\rangle.$$

Tabi ki özdeş parçacıklar için Hamiltonyenin kendisi simetrik olmak durumundadır, $P\mathcal{H} = \mathcal{H}$. Ancak, belli bir $\mathcal{H}$ için permütasyonlar altında farklı simetrilere sahip birçok özdurum bulunur. Doğru özdurum kümesini seçmek için kuantum mekaniğinde parçacık istatistiği (bozon veya fermiyon) birbirinden bağımsız olarak belirlenir. Örneğin, V hacimli bir kutuda N sayıda etkileşimsiz parçacığı aşağıdaki Hamiltonyen ile ele alalım

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha=1}^{N}\mathcal{H}_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\alpha}^{2}\right). \tag{VII.3}$$

$\{|\vec{k}\rangle\}$ düzlemsel dalga durumları ve $\mathcal{E}(\vec{k}) = \hbar^2k^2/2m$ ilgili enerjilerle her bir $\mathcal{H}_{\alpha}$ ayrı ayrı köşegenleştirilebilir. Bu bir parçacık durumlarının toplamlarını ve çarpımlarını kullanarak aşağıdaki N-parçacık durumlarını oluşturabiliriz:

(1) *Çarpım* Hilbert uzayı tek-parçacık durumlarının basitçe çarpımından elde edilir,

$$|\vec{k}_1,\cdots,\vec{k}_N\rangle_{\otimes} \equiv |\vec{k}_1\rangle\cdots|\vec{k}_N\rangle. \tag{VII.4}$$

Koordinat gösteriminde,

$$\langle\vec{x}_1,\cdots,\vec{x}_N|\vec{k}_1,\cdots,\vec{k}_N\rangle_{\otimes} = \frac{1}{V^{N/2}}\exp\left(i\sum_{\alpha=1}^{N}\vec{k}_{\alpha}\cdot\vec{x}_{\alpha}\right), \tag{VII.5}$$

ve

$$\mathcal{H}|\vec{k}_1,\cdots,\vec{k}_N\rangle_{\otimes} = \left(\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m}k_{\alpha}^{2}\right)|\vec{k}_1,\cdots,\vec{k}_N\rangle_{\otimes}. \tag{VII.6}$$

Fakat çarpım durumları özdeş parçacıklar için gereksinimleri karşılamakta yeterli değildir ve doğru simetriye sahip *alt uzaylarını* bulmamız gerekir.

(2) *Fermiyonik* alt uzay şu şekilde oluşturulur

$$|\vec{k}_1,\cdots,\vec{k}_N\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{N_-}}\sum_P(-1)^P P|\vec{k}_1,\cdots,\vec{k}_N\rangle_\otimes, \qquad \text{(VII.7)}$$

burada toplam, tüm $N!$ permütasyonların üzerindendir. Açıkça görülüyor ki, herhangi bir tek-parçacık belirteci $\vec{k}$ yukarıdaki listede birden fazla görünürse sonuç sıfırdır ve anti-simetrik durum yoktur. Anti-simetrikleştirme ancak $\vec{k}_\alpha$'nın tüm N değerleri farklı olduğunda gerçekleşir. Bu durumda, yukarıdaki toplamda $N!$ sayıda terim bulunur ve normalleştirmenin sağlanması için $N_- = N!$ olması gerekir. Örneğin, iki parçacıklı anti simetrik durum

$$|\vec{k}_1,\vec{k}_2\rangle_- = \frac{(|\vec{k}_1,\vec{k}_2\rangle - |\vec{k}_2,\vec{k}_1\rangle)}{\sqrt{2}}.$$

(Aksi belirtilmedikçe, $|\vec{k}_1,\ldots,\vec{k}_N\rangle$, çarpım durumunu gösterir)

(3) Benzer şekilde *bozonik* alt uzay da şöyle oluşturulur,

$$|\vec{k}_1,\cdots,\vec{k}_N\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{N_+}}\sum_P P|\vec{k}_1,\cdots,\vec{k}_N\rangle_\otimes. \qquad \text{(VII.8)}$$

Bu durumda, izin verilen $\vec{k}$ değerlerinde hiçbir kısıtlama yoktur. Belirli bir tek parçacık durumu, $\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} = N$ olmak koşuluyla, listede $n_{\vec{k}}$ kez tekrar edilebilir. Kısaca ispatlayacağımız gibi, uygun normalleştirme $N_+ = N!\prod_{\vec{k}} n_{\vec{k}}!$ eşitliğini gerektirir. Örneğin, doğru şekilde normalleştirilmiş 3 parçacıklı bozonik durum iki tane tek-parçacıklı $|\alpha\rangle$ durumundan ve bir tek-parçacıklı $|\beta\rangle$ durumundan ($n_\alpha = 2$, $n_\beta = 1$, ve $N_+ = 3!\,2!\,1! = 12$) şöyle oluşturulur.

$$\begin{aligned}|\alpha\alpha\beta\rangle_+ &= \frac{1}{\sqrt{12}}\left(|\alpha\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\alpha\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\alpha\rangle + |\alpha\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\alpha\rangle + |\alpha\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\alpha\rangle|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\alpha\rangle|\beta\rangle|\alpha\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle|\alpha\rangle\right).\end{aligned}$$

- Aşağıdaki tanımlamayı yaparak bozon ve fermiyonlardan eş zamanlı olarak bahsetmek elverişlidir,

$$|\{\vec{k}\}\rangle_\eta = \frac{1}{\sqrt{N_\eta}}\sum_P \eta^P P|\{\vec{k}\}\rangle, \qquad \eta = \begin{cases} +1 & \text{bosonlar için} \\ -1 & \text{fermiyonlar için}\end{cases} \qquad \text{(VII.9)}$$

Her bir durum, $\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} = N$ olmak koşuluyla, *doluluk sayıları* kümesi $\{n_{\vec{k}}\}$ ile *özgün* olarak belirlenmiştir, ve

(1) Fermiyonlar için $n_{\vec{k}} = 0$ veya 1 değilse $|\{\vec{k}\}\rangle_- = 0$, ve $N_- = N!\prod_k n_{\vec{k}}! = N\,!$.

(2) Bozonlar için her bir $\vec{k}$, $n_{\vec{k}}$ kez tekrar edilebilir ve normalizasyon şöyle hesaplanır,

$$\begin{aligned} {}_{+}\langle\{\vec{k}\}|\{\vec{k}\}\rangle_{+} &= \frac{1}{N_+}\sum_{P,P'}\langle P\{\vec{k}\}|P'\{\vec{k}\}\rangle = \frac{N!}{N_+}\sum_{P}\langle\{\vec{k}\}|P\{\vec{k}\}\rangle \\ &= \frac{N!\prod_{\vec{k}} n_{\vec{k}}!}{N_+} = 1, \quad \Rightarrow \quad N_+ = N!\prod_{k} n_{\vec{k}}! \quad . \end{aligned} \tag{VII.10}$$

(Permüte edilen $\vec{k}$'lar, orijinal kümeye özdeş değilse $\langle\{\vec{k}\}|P\{\vec{k}\}\rangle$ terimi sıfır olur, ki bu durum $\prod_{\vec{k}} n_{\vec{k}}!$ kez gerçekleşir.)