X1-057 (2009/01/08)

ترمودینامیک ِ برهم‌کن‌ش‌ها یِ تک‌ذره‌ای

محمد خرمی mamwad@mailaps.org

ترمودینامیک ِ سیستم‌ها یی بررس‌ی می‌شود که شامل ِ ذره‌ها یی اند که با هم برهم‌کن‌ش ن‌دارند اما با یک میدان ِ بیرون‌ی برهم‌کن‌ش دارند.

1 انرژی و تابع ِ پارش

سیستم ی را در نظر ب‌گیرید شامل ِ ذره‌ها یی تشخیص‌ناپذیر که با هم برهم‌کن‌ش ندارند اما با یک میدان ِ بیرون‌ی برهم‌کن‌ش دارند. انرژی یِ چن‌ین‌سیستم ی را می‌شود نوشت

$$E = \sum_I \mathcal{E}_I, \tag{1}$$

که $\mathcal{E}_I$ انرژی یِ ذره یِ I است. این ذره‌ها را تشخیص‌ناپذیر می‌گیریم. در این صورت رابطه یِ بالا می‌شود

$$E = \sum_i \mathcal{N}_i\, \varepsilon_i, \tag{2}$$

که ε_i انرژی یِ یک ذره در حالت ِ i، و $\mathcal{N}_i$ تعداد ِ ذره‌ها در حالت ِ i است. تابع ِ پارش ِ کانونیک برا یِ سیستم ی شامل ِ N ذره از این نوع می‌شود

$$Q_N = \sum_{\mathcal{N}}{}' \left(\prod_i \mathcal{D}_{\mathcal{N}_i}\right) \exp\left(-\beta \sum_i \mathcal{N}_i\, \varepsilon_i\right), \tag{3}$$

که پریم در جمع‌بندی یعنی جمع‌بندی رو یِ $\mathcal{N}$ ها يِ مقید به

$$\sum_i \mathcal{N}_i = N. \tag{4}$$

هم‌چن‌ین،

$$\beta := \frac{1}{k_{\mathrm{B}}\, T}, \tag{5}$$

که T دما يِ مطلق و k_{B} ثابت ِ بُلتس‌مان [a]، و $\mathcal{D}_{\mathcal{N}_i}$ چندگان‌ه‌گی يِ پیکربندی يِ شامل ِ $\mathcal{N}_i$ ذره در حالت ِ i است. $\mathcal{D}_{\mathcal{N}_i}$ با آمار ِ ذره‌ها مشخص می‌شود. برا يِ بزون‌ها،

$$\mathcal{D}^{\mathrm{B}}_x = 1; \tag{6}$$

برا يِ فرمی‌ون‌ها،

$$\mathcal{D}^{\mathrm{F}}_x = \begin{cases} 1, & x \le 1, \\ 0, & x > 1 \end{cases}; \tag{7}$$

و برا يِ ذره‌ها يِ (غیرِواقعی يِ) با آمار ِ کلاسیک (کلاسیک‌ون‌ها)،

$$\mathcal{D}^{\mathrm{C}}_x = \frac{1}{x!}. \tag{8}$$

محاسبه يِ طرف ِ راست ِ (3) دشوار است، مگر برا يِ کلاسیک‌ون‌ها. به جا يِ آن سراغ ِ تابع ِ پارش ِ گراندکانونیک ($\mathcal{Q}$) می‌رویم. متغیر ِ این تابع به جا يِ تعداد ِ ذره‌ها (N) گریزنده‌گی (z) است.

$$\mathcal{Q}(z) := \sum_N z^N\, Q_N. \tag{9}$$

از این‌جا معلوم می‌شود

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(z) &= \sum_{\mathcal{N}} z^N \left(\prod_i \mathcal{D}_{\mathcal{N}_i}\right) \exp\left(-\beta \sum_i \mathcal{N}_i\, \varepsilon_i\right), \\ &= \prod_i \left[\sum_{\mathcal{N}_i} z^{\mathcal{N}_i}\, \mathcal{D}_{\mathcal{N}_i}\, \exp(-\beta\, \mathcal{N}_i\, \varepsilon_i)\right]. \end{aligned} \tag{10}$$

جمع‌بندی یِ طرف ِ راست را هم می‌شود در هرسه‌حالت انجام داد. نتیجه می‌شود

$$\mathcal{Q}(z) = \prod_i [1 - s\, z\, \exp(-\beta\, \varepsilon_i)]^{-1/s}, \tag{11}$$

که s به آماربسته‌گی دارد:

$$\begin{aligned} s^{\mathrm{B}} &= 1, \\ s^{\mathrm{F}} &= -1, \\ s^{\mathrm{C}} &= 0. \end{aligned} \tag{12}$$

این‌ها را می‌شود (از جمله) در [1] یافت.

جز $\mathcal{Q}$ می‌شود یک تابعِ‌مولد ِ دیگر هم تعریف کرد که با مشتق‌گیری از آن نسبت به متغیرها یَش $\mathcal{N}_i$ ها به دست آیند. $\mathcal{Z}$ را چن‌ین تعریف می‌کن‌یم.

$$\mathcal{Z}(\zeta) := \sum_{\mathcal{N}} \left(\prod_i \zeta_i^{\mathcal{N}_i}\right) \left(\prod_i \mathcal{D}_{\mathcal{N}_i}\right) \exp\left(-\beta \sum_i \mathcal{N}_i\, \varepsilon_i\right). \tag{13}$$

این تابعِ‌مولد را هم می‌شود ساده‌تر کرد:

$$\mathcal{Z}(\zeta) = \prod_i [1 - s\, \zeta_i\, \exp(-\beta\, \varepsilon_i)]^{-1/s}. \tag{14}$$

دیده می‌شود $\mathcal{Z}$ هم‌ان $\mathcal{Q}$ است، به شرط ِ این که همه یِ ζ_i ها با z برابر باش‌ند.

2 تعداد ِ ذره‌ها

مقدار ِ چشم‌داشت‌ی یِ تعداد ِ ذره‌ها یی که در حالت ِ i اند، می‌شود

$$\langle \mathcal{N}_i \rangle = \frac{z}{\mathcal{Q}} \sum_{\mathcal{N}} \mathcal{N}_i\, z^N \left(\prod_i \mathcal{D}_{\mathcal{N}_i}\right) \exp\left(-\beta \sum_i \mathcal{N}_i\, \varepsilon_i\right). \tag{15}$$

این را می‌شود بر حسب ِ $\mathcal{Z}$ نوشت:

$$\langle \mathcal{N}_i \rangle = \left(\frac{\zeta_i}{\mathcal{Z}}\, \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \zeta_i}\right)_{\forall j\,:\, \zeta_j = z}, \tag{16}$$

که در آن i شاخص ِ آزاد است (رو یِ آن جمع‌بندی نشده است). با استفاده از (14) و (16)،

$$\langle \mathcal{N}_i \rangle = \frac{z\,\exp(-\beta\,\varepsilon_i)}{1 - s\,z\,\exp(-\beta\,\varepsilon_i)}. \tag{17}$$

از این‌جا می‌شود چگالی یِ ذره‌ها را هم حساب کرد. حالت ی را در نظر می‌گیریم که ذره‌ها ساختار ِ درون‌ی ن‌دارند. بردارِحالت ِ به‌هنجار ِ متناظر با حالت ِ i را با $|\psi_i\rangle$، تابعِ‌موج ِ متناظر را با ψ_i، و چگالی یِ ذرات را با ρ نمایش می‌دهیم. داریم

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \langle \mathcal{N}_i \rangle\, |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \tag{18}$$

اگر z کوچک باش‌د:

$$z \ll \exp(\beta\,\varepsilon_0), \tag{19}$$

که ε_0 انرژی یِ حالت ِ پایه است، در (17) می‌شود به جا یِ مخرج یک گذاشت:

$$\langle \mathcal{N}_i \rangle = z\,\exp(-\beta\,\varepsilon_i). \tag{20}$$

در این حالت به‌ساده‌گی می‌شود z را حذف کرد. نتیجه می‌شود

$$\langle \mathcal{N}_i \rangle = \langle N \rangle\, \frac{1}{Q_1}\, \exp(-\beta\,\varepsilon_i), \tag{21}$$

این همان چیز ی است که برا یِ کلاسیک‌ون‌ها به دست می‌آید. در این حالت،

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle N \rangle\, \frac{1}{Q_1}\, \langle \mathbf{r} | \exp(-\beta\, H_1) | \mathbf{r} \rangle, \tag{22}$$

که H_1 همیلتن‌ی یِ تک‌ذره‌ای، و $|\mathbf{r}\rangle$ ویژه‌بردار ِ به‌هنجار ِ مکان متناظر با ویژه‌مقدار ِ $\mathbf{r}$ است.

اگر علاوه بر برقراری یِ (19) (کوچک‌بودن ِ z) H_1 مجموع ِ یک تابع ِ تکانه و یک تابع ِ مکان (انرژی یِ پتانسیل) باش‌د،

$$H_1 = K(\hat{\mathbf{p}}) + U(\hat{\mathbf{r}}), \tag{23}$$

که $\hat{\mathbf{p}}$ عمل‌گر ِ تکانه و $\hat{\mathbf{r}}$ عمل‌گر ِ مکان است، و دما زیاد (β کوچک) باش‌د،

$$\beta\,\Delta H_1 \ll 1, \tag{24}$$

که ΔH_1 اختلافِ‌انرژی یِ نوع‌ی یِ ترازها یِ انرژی است، آن‌گاه،

$$\langle \mathbf{r}|\exp(-\beta\, H_1)|\mathbf{r}\rangle = \langle \mathbf{r}|\exp[-\beta\, K(\hat{\mathbf{p}})]\ \exp[-\beta\, U(\hat{\mathbf{r}})]|\mathbf{r}\rangle,$$
$$= \exp[-\beta\, U(\mathbf{r})]\ \langle \mathbf{r}|\exp[-\beta\, K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle. \qquad (25)$$

داریم

$$\begin{aligned}\mathrm{LH} &= \langle \mathbf{r}'|\exp[-\beta\, K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}'\rangle,\\ &= \langle \mathbf{r}|\exp[-(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{p}}/(\mathrm{i}\,\hbar)]\ \exp[-\beta\, K(\hat{\mathbf{p}})]\exp[(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{p}}/(\mathrm{i}\,\hbar)]|\mathbf{r}\rangle,\\ &= \langle \mathbf{r}|\exp[-\beta\, K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle,\end{aligned} \qquad (26)$$

که نشان می‌دهد $\langle \mathbf{r}|\exp[-\beta\, K(\mathbf{p})]|\mathbf{r}\rangle$ مستقل از $\mathbf{r}$ است. پس اگر (19) و (24) برقرار باش‌ند،

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle N\rangle\, \frac{1}{\tilde{Q}_1}\ \exp[-\beta\, U(\mathbf{r})], \qquad (27)$$

که

$$\tilde{Q}_1 := \int \mathrm{d}V\ \ \exp[-\beta\, U(\mathbf{r})]. \qquad (28)$$

3 فشار و تانسر ـِ تن‌ش

لَگرانژی ی تک‌ذره‌ای یی به این شکل را در نظر ب‌گیرید.

$$L = \int \mathrm{d}V\ \left\{\frac{1}{2}\,[\psi^*(\mathbf{r})\,\mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi}(\mathbf{r}) - \mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi}^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})] - \psi^*(\mathbf{r})\,(H\,\psi)(\mathbf{r})\right\}, \qquad (29)$$

که هَمیلتِن‌ی یِ H را مجموع ـِ انرژی یِ جنب‌ش‌ی و انرژی یِ پتانسیل گرفته ایم:

$$H = \frac{1}{2\,m}\,\hat{p}^k\,\hat{p}_k^\dagger + U(\hat{\mathbf{r}}). \qquad (30)$$

در حالت ـِ کل‌ی $\hat{p}_k$ اِرمیت‌ی نیست و $\hat{p}_k$ و $\hat{p}_k^\dagger$ چن‌ین تعریف شده اند.

$$\hat{p}_k|\mathbf{r}\rangle := \mathrm{i}\,\hbar\,\partial_k|\mathbf{r}\rangle, \qquad (31)$$

و

$$\hat{p}_k^\dagger|\mathbf{r}\rangle := \mathrm{i}\,\hbar\,\frac{1}{\sqrt{\mathfrak{D}}}\,\partial_k(\sqrt{\mathfrak{D}}\,|\mathbf{r}\rangle), \tag{32}$$

که $\mathfrak{D}$ دترمینان ِ ماتریس ِ متریک (با شاخص‌ها یِ پایین) است. از (31) و (32) نتیجه می‌شود

$$\langle\mathbf{r}|\hat{p}_k = -\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{1}{\sqrt{\mathfrak{D}}}\,\partial_k(\sqrt{\mathfrak{D}}\,\langle\mathbf{r}|), \tag{33}$$

و

$$\langle\mathbf{r}|\hat{p}_k^\dagger = -\mathrm{i}\,\hbar\,\partial_k\langle\mathbf{r}|. \tag{34}$$

سرانجام،

$$\hat{p}^n := \hat{p}_k\,g^{k\,n}(\hat{\mathbf{r}}), \tag{35}$$

و

$$\hat{p}^{n\,\dagger} = g^{k\,n}(\hat{\mathbf{r}})\,p_k^\dagger, \tag{36}$$

که g متریک ِ فضا است. به این ترتیب،

$$(H\,\psi)(\mathbf{r}) = \frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}), \tag{37}$$

که

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{\mathfrak{D}}}\,\partial_l\,g^{l\,n}\,\sqrt{\mathfrak{D}}\,\partial_n. \tag{38}$$

برا یِ تانسرِتن‌ش ِ کانونیک (Θ) داریم [2]

$$\Theta^{j\,k} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_j\psi)}\,\partial^k\psi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_j\psi^*)}\,\partial^k\psi^* - g^{j\,k}\,\mathcal{L}, \tag{39}$$

$\mathcal{L}$ چگالی یِ لَگرانژی است:

$$\mathcal{L} = \sqrt{\mathfrak{D}}\,\left[\frac{1}{2}\,(\psi^*\,\mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi} - \mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi}^*\,\psi) - \psi^*\,(H\,\psi)\right] + \mathcal{B}. \tag{40}$$

$\mathcal{B}$ دیورژانس ِ یک بردار است، چن‌ان که $\mathcal{L}$ شامل ِ مشتق ِ دوم ِ ψ ن‌باش‌د:

$$\mathcal{B} = \frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\partial_l(\psi^*\,g^{l\,n}\,\sqrt{\mathfrak{D}}\,\partial_n\psi),$$

$$= \sqrt{\mathfrak{D}}\,\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla\cdot(\psi^*\,\nabla\psi). \tag{41}$$

به این ترتیب،

$$\mathcal{L} = \sqrt{\mathfrak{D}}\,\left[\frac{1}{2}\,(\psi^*\,\mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi} - \mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi}^*\,\psi) + \frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - \psi^*\,U\,\psi\right], \tag{42}$$

که نتیجه می‌دهد

$$\Theta^{j\,k} = \sqrt{\mathfrak{D}}\,\left\{\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,(\partial^j\,\psi^*\,\partial^k\,\psi + \partial^j\,\psi\,\partial^k\,\psi^*)\right.$$

$$\left.-g^{j\,k}\,\left[\frac{1}{2}\,(\psi^*\,\mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi} - \mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi}^*\,\psi) + \frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - \psi^*\,U\,\psi\right]\right\}. \tag{43}$$

برا یِ تانسرِتن‌ش ـِ متقارن (T) داریم [2]

$$T^{j\,k} = \frac{2}{\sqrt{\mathfrak{D}}}\,\frac{\delta L}{\delta g_{j\,k}}. \tag{44}$$

با استفاده از

$$\frac{\partial\mathfrak{D}}{\partial g_{j\,k}} = \mathfrak{D}\,g^{k\,j}, \tag{45}$$

و

$$\frac{\partial g^{l\,n}}{\partial g_{j\,k}} = -g^{l\,k}\,g^{j\,n}, \tag{46}$$

نتیجه می‌شود

$$T^{j\,k} = -\left\{\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,(\partial^j\,\psi^*\,\partial^k\,\psi + \partial^j\,\psi\,\partial^k\,\psi^*)\right.$$

$$\left.-g^{j\,k}\,\left[\frac{1}{2}\,(\psi^*\,\mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi} - \mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi}^*\,\psi) + \frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - \psi^*\,U\,\psi\right]\right\}. \tag{47}$$

چن‌ان که انتظار می‌رود، T و Θ رابطه یِ ساده ای با هم دارند:

$$\Theta = -\sqrt{\mathfrak{D}}\,T. \tag{48}$$

سرانجام، با تعریف ِ

$$E := \left(\int \mathrm{d}V\ \psi^*\,\psi\right)^{-1}\int \mathrm{d}V\ \left[-\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi + \psi^*\,U\,\psi\right] \tag{49}$$

و

$$\tilde{T}^{j\,k} = -\frac{2}{\sqrt{\mathfrak{D}}}\left(\int \mathrm{d}V\ \psi^*\,\psi\right)\frac{\delta E}{\delta g_{j\,k}}, \tag{50}$$

نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned}\tilde{T}^{j\,k} = -&\left\{\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,(\partial^j\,\psi^*\,\partial^k\,\psi + \partial^j\,\psi\,\partial^k\,\psi^*)\right.\\ &\left.-g^{j\,k}\left[E\,(\psi^*\,\psi) + \frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - \psi^*\,U\,\psi\right]\right\}.\end{aligned} \tag{51}$$

دیده می‌شود

$$\tilde{T} = T, \tag{52}$$

به شرط ِ این که

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\dot{\psi} = E\,\psi. \tag{53}$$

(48) و (52) سه راه ِ هم‌ارز برا یِ محاسبه یِ تانسر ِ تن‌ش می‌ده‌ند. البته هم‌ارزی یِ Θ و T وقت ی است که چگال‌ی یِ لَگرانژی نسبت به مشتق ِ مکان‌ی از درجه یِ بیش از یک ن‌باش‌د.

اگر (53) برقرار باش‌د،

$$(E - U)\,\psi = \frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla^2\psi, \tag{54}$$

و

$$(E - U)\,\psi^* = \frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\nabla^2\psi^*, \tag{55}$$

که نتیجه می‌دهد در این حالت،

$$T^{j\,k} = -\left[\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,(\partial^j\,\psi^*\,\partial^k\,\psi + \partial^j\,\psi\,\partial^k\,\psi^*)\right.$$
$$\left. -g^{j\,k}\,\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{4\,m}\,(\psi^*\,\nabla^2\psi + \nabla^2\psi^*\,\psi + 2\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi)\right],$$
$$= -\,\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\left[(\partial^j\,\psi^*\,\partial^k\,\psi + \partial^j\,\psi\,\partial^k\,\psi^*) - \frac{1}{2}\,g^{j\,k}\,\nabla^2(\psi^*\,\psi)\right]. \qquad (56)$$

بر حسب ـِ $\hat{p}_k$ ها، (56) می‌شود

$$T^{j\,k} = \frac{1}{2\,m}\,\langle\mathbf{r}|(\hat{p}^{k\,\dagger}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{p}^j + \hat{p}^{j\,\dagger}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{p}^k)|\mathbf{r}\rangle$$
$$+\frac{1}{4\,m}\,g^{j\,k}\,\langle\mathbf{r}|(\hat{p}^n\,\hat{p}_n^\dagger|\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\psi|\hat{p}^n\,\hat{p}_n^\dagger - 2\,\hat{p}_n^\dagger|\psi\rangle\langle\psi|\hat{p}^n)|\mathbf{r}\rangle, \qquad (57)$$

مشابه با (18)،

$$\langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle = \sum_i \langle\mathcal{N}_i\rangle\,T_i^{j\,k}(\mathbf{r}), \qquad (58)$$

که $T_i^{j\,k}$ با ψ_i حساب می‌شود. اگر z کوچک باشد، چنان که (19) برقرار باشد، آن‌گاه (21) برقرار است و در نتیجه

$$\langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle = \langle N\rangle\,\frac{1}{Q_1}\,\frac{1}{2\,m}\,\Big(\langle\mathbf{r}|[\hat{p}^{k\,\dagger}\,\exp(-\beta\,H_1)\,\hat{p}^j + \hat{p}^{j\,\dagger}\,\exp(-\beta\,H_1)\,\hat{p}^k]|\mathbf{r}\rangle$$
$$+\frac{1}{2}\,g^{j\,k}\,\{\langle\mathbf{r}|[\hat{p}^n\,\hat{p}_n^\dagger\,\exp(-\beta\,H_1) + \exp(-\beta\,H_1)\,\hat{p}^n\,\hat{p}_n^\dagger]|\mathbf{r}\rangle$$
$$-2\langle\mathbf{r}|\hat{p}_n^\dagger\,\exp(-\beta\,H_1)\,\hat{p}^n|\mathbf{r}\rangle\}\Big). \qquad (59)$$

فرض کنید

$$g = \delta, \qquad (60)$$

یعنی فضا تخت باشد. در این صورت $\hat{p}_k$ ها اِرمیت‌ی و هم‌ان تکانه‌ها یِ معمول اند، و (23) برقرار است. سرانجام، اگر علاوه بر برقراری یِ (19) و (60) رابطه یِ (24) هم برقرار باشد (دما زیاد باشد)، ضریب ِ $g^{j\,k}$ در طرف ِ راست ِ (59) صفر می‌شود و

$$\langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle = \langle N\rangle\,\frac{1}{Q_1}\,\frac{1}{m}\,\exp[-\beta\,U(\mathbf{r})]\,\langle\mathbf{r}|\hat{p}^j\,\hat{p}^k\,\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle. \tag{61}$$

داریم

$$\langle\mathbf{r}|\hat{p}^j\,\hat{p}^k\,\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle = \int\frac{\mathrm{d}^D p}{h^D}\,p^j\,p^k\,\exp[-\beta\,K(\mathbf{p})], \tag{62}$$

که D بُعد ِ فضا است. K تابع ِ $(\mathbf{p}\cdot\mathbf{p})$ است. در واقع

$$K(\mathbf{p}) = \frac{1}{2\,m}\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}. \tag{63}$$

از (62) و این که K تابع ِ $(\mathbf{p}\cdot\mathbf{p})$ است، نتیجه می‌شود

$$\langle\mathbf{r}|\hat{p}^j\,\hat{p}^k\,\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle = \frac{1}{D}\,\delta^{j\,k}\,\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\,\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle, \tag{64}$$

از (63) هم نتیجه می‌شود

$$\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\,\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle = -(2\,m)\,\frac{\partial}{\partial\beta}\,\langle\mathbf{r}|\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle, \tag{65}$$

و

$$\langle\mathbf{r}|\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle \propto \beta^{-D/2}, \tag{66}$$

که ضریب ِ تناسب مستقل از دما است. به این ترتیب،

$$\langle\mathbf{r}|\hat{p}^j\,\hat{p}^k\,\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle = \frac{m}{\beta}\,\delta^{j\,k}\,\langle\mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\,\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle. \tag{67}$$

از این‌جا (61) می‌شود

$$\langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle = \delta^{j\,k}\,\frac{1}{\beta}\,\langle N\rangle\,\frac{1}{Q_1}\,\exp[-\beta\,U(\mathbf{r})]\,\langle\mathbf{r}|\exp[-\beta\,K(\hat{\mathbf{p}})]|\mathbf{r}\rangle, \tag{68}$$

که نتیجه می‌دهد

$$\langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle = g^{j\,k}\,\frac{1}{\beta}\,\rho(\mathbf{r}). \tag{69}$$

با تعریف ِ فشار (P) به شکل ِ

$$P(\mathbf{r}) := \frac{1}{D}\, g_{j\,k}\, \langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle, \tag{70}$$

معلوم می‌شود

$$\langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle = g^{j\,k}\, P(\mathbf{r}), \tag{71}$$

(یعنی تانسر ِ تنش هم‌سان‌گرد است) و

$$P(\mathbf{r}) = \frac{1}{\beta}\, \rho(\mathbf{r}), \tag{72}$$

یعنی معادله ي ِ حالت موضعَن مثل ِ معادله‌يِ‌حالت ِ گاز ِ کامل است. تنهاتفاوت ِ این سیستم با گاز ِ کامل این است که چگال‌ی و فشار یک‌نواخت نیست‌ند.

4 ترمودینامیک ِ کلاسیک

در دوبخش ِ پیش معلوم شد معادله‌ها ي ِ حاکم بر چگال‌ی و تن‌ش، در z و β ي ِ کوچک (و در فضا ي ِ تخت) ساده می‌شوند. این نتیجه‌ها را با محاسبه ي ِ مستقیم ِ کلاسیک (غیرِکوانتم‌ی) هم می‌شود به دست آورد. برا ي ِ این کار، در (14) پارامتر ِ s را به صفر میل می‌دهیم و تابعِ‌مولد را هم در حد ِ کلاسیک حساب می‌کن‌یم:

$$\ln[\mathcal{Z}(\zeta)] = \int \mathrm{d}V\ \zeta(\mathbf{r})\ \exp[-\beta\, U(\mathbf{r})]\, q_1^{\mathrm{C}}(\beta), \tag{73}$$

که

$$q_1^{\mathrm{C}} = \frac{1}{h^D} \int \mathrm{d}^D p\ \exp[-\beta\, K(\mathbf{p})], \tag{74}$$

تابعِ‌پارش ِ کلاسیک ِ تک‌ذره‌ای ي ِ آزاد (در فضا ي ِ تخت) تقسیم بر حجم است. مانسته ي ِ (16) برا ي ِ چگال‌ی می‌شود

$$\rho(\mathbf{r}) = \left[\frac{\zeta(\mathbf{r})}{\mathcal{Z}}\, \frac{\delta\mathcal{Z}}{\delta\zeta(\mathbf{r})}\right]_{\forall\mathbf{r}\,:\,\zeta(\mathbf{r})=z}, \tag{75}$$

از این‌جا،

$$\rho(\mathbf{r}) = z\ \exp[-\beta\, U(\mathbf{r})]\, q_1^{\mathrm{C}}(\beta). \tag{76}$$

این همان (27) است.

هم‌چنین، تانسر ِ تن‌ش در فضا ي تخت می‌شود

$$\langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle = \frac{1}{\beta}\,\left[\frac{2}{\sqrt{\mathfrak{D}}\,\mathcal{Z}}\,\frac{\delta\mathcal{Z}}{\delta g_{j\,k}(\mathbf{r})}\right]_{[\forall\mathbf{r}\,:\,\zeta(\mathbf{r})=z]\,\wedge\,g=\delta}, \tag{77}$$

که از آن‌جا

$$\langle T^{j\,k}(\mathbf{r})\rangle = g^{j\,k}\,\frac{1}{\beta}\,z\,\exp[-\beta\,U(\mathbf{r})]\,q_1^{\mathrm{C}}(\beta). \tag{78}$$

(بسته‌گی ي $\mathcal{Z}$ به متریک از طریق ِ $\mathfrak{D}$ در $\mathrm{d}V$ است.) به این ترتیب (69)، (71)، و (72) هم برقرار اند.

5 مرجع‌ها

[1] P. K. Pathria; "Statistical mechanics", (Pergamon Press, 1993) chapter 6

[2] محمد خرمی؛ " تانسور ِ انرژی‌ـ تکانه، II"، (2005/02/20) X1-029

6 اسم ِ خاص

[a] Boltzmann