بسم الله الرحمن الرحیم

دانشکده علوم‌پایه

پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد

فیزیک (نظری)

مکانیک آماری در فضای ناجابجایی

مجتبی نجفی زاده

استاد راهنما :

دکتر مهدی سعادت

آذر ۸۷

تقدیم به:

پدر، مادر

و

همسرم

سپاسگزاری

با تشکر فراوان از استاد راهنمای گرامی ام دکتر مهدی سعادت که بی دریغ در تمام مراحل پایان نامه و انجام محاسبات آن در کنار من بودند. بسیار مفتخرم که در کنار ایشان فراتر از علم، ادب و تواضع را آموختم. احترامی که ایشان برای دانشجویان قائلند بی نظیر، و توانایی و تسلطشان بر موضوعات درسی کم نظیر است. بطور حتم، روش ایشان را در زندگی علمی ام پیش می گیرم و همیشه سپاسگزار زحماتشان خواهم بود.

از آقای دکتر محمد رضا ابوالحسنی که در زمان تحصیلم، رئیس بخش فیزیک بودند و زحمات بسیاری کشیدند، صمیمانه سپاسگزارم. همکاری ایشان برای میهمان شدن برخی از دروس ام در دانشگاه شریف، بسیار قابل تقدیر است.

از آقای دکتر محمد مهدی شیخ جباری بخاطر پیشنهادشان، برای استفاده از مختصات جدید در حل مسائلمان سپاسگزارم.

از رئیس بخش فیزیک آقای دکتر رسول ملک فر، بخاطر امکاناتی که در مراحل پایانی دفاع در اختیارم گذاشتند، صمیمانه قدردانی می کنم.

از پدر و مادرم که دعای خیرشان همیشه راهگشای مشکلاتم بوده و دوری مرا در مدت تحصیل تحمل کردند، سپاسگزارم.

از همسر گرامی ام که سختی و مشقت زیادی در مراحل مختلف نوشتن پایان نامه متحمل شدند، و همواره در کنار من بودند تشکر و قدردانی می کنم.

چکیده؛

مطالعات نظریه ریسمان نشان می دهد که مختصات فضا ناجابجایی دارند. پارامتر ناجابجایی شبیه اعمال یک نیروی خارجی، در فضای جابجایی است. بعنوان مثال؛ تبهگنی نوسانگر دو بعدی در این فضا از بین می رود و ترازهای اتم هیدروژن نیز تغییر می کنند. در این تحقیق، برخی از پدیده های مکانیک آماری را در فضای ناجابجایی بررسی می کنیم. هدف ما بدست آوردن تابع پارش، انرژی آزاد هلمهولتز و بقیه کمیتهای ترمو دینامیکی یک سیستم آماری است. ما تابع پارش کلاسیک را برای گاز ایده آل، گاز نسبیتی و نوسانگر دو بعدی کلاسیکی، تا مرتبه اول و دوم پارامتر ناجابجایی محاسبه می کنیم. همچنین تابع پارش کوانتومی را برای نوسانگر دو بعدی کوانتومی، تا مرتبه اول پارامتر ناجابجایی بدست می آوریم.

واژگان کلیدی؛

پارامتر ناجابجایی، گاز ایده آل، گاز نسبیتی، نوسانگر دو بعدی کلاسیکی و کوانتومی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

مقدمه ۱

فصل اول ۳

مکانیک کوانتومی در فضای ناجابجایی ۳

۱- ۱ مقدمه ۳

۱-۲ نوسانگر دو بعدی کوانتومی ۴

۱-۳ اتم هیدروژن ۶

۱-۴ اثر استارک ۸

فصل دوم ۹

مکانیک آماری در فضای جابجایی ۹

۲-۱ مقدمه ۹

۲-۲ گاز ایده آل، شامل مولکولهای تک اتمی ۹

۲-۲-۱ بررسی کلاسیک ۱۱

۲-۲-۲ بررسی کوانتومی ۱۲

۲-۳ گاز فرین نسبیتی ۱۳

۲-۳-۱ بررسی کلاسیک ۱۴

۲-۳-۲ بررسی کوانتومی ۱۵

۲-۴ نوسانگر هارمونیک ۱۶

۲-۴-۱ بررسی کلاسیک ۱۶

۲-۴-۲ بررسی کوانتومی ۱۸

۲- ۵ ارتعاشات شبکه یک بعدی ۲۰

فصل سوم ۲۸

روشهای حل مسئله ۲۸

۳-۱ مقدمه ۲۸

۳-۲ روش الف ۲۸

۳-۲-۱ محاسبه تابع پارش کلاسیکی تا مرتبه اول θ ۲۹
۳-۲-۲ محاسبه تابع پارش کلاسیکی تا مرتبه دوم θ ۳۰
۳-۳ روش ب ۳۱
فصل چهارم ۳۳
مکانیک آماری در فضای ناجابجایی ۳۳
۴-۱ مقدمه ۳۳
۴-۲ گاز ایده آل شامل مولکولهای تک اتمی ۳۴
۴-۲-۱ تا مرتبه اول پارامتر ناجابجایی ۳۴
۴-۲-۲ تا مرتبه دوم پارامتر ناجابجایی و با استفاده از روش الف ۳۵
۴-۲-۳ تا مرتبه دوم پارامتر ناجابجایی و با استفاده از روش ب ۳۷
۴-۳ گاز فرین نسبیتی ۳۹
۴-۳-۱ تا مرتبه اول پارامتر ناجابجایی ۳۹
۴-۳-۲ تا مرتبه دوم پارامتر ناجابجایی ۴۰
۴-۴ نوسانگر کلاسیکی ۴۳
۴-۴-۱ تا مرتبه اول پارامتر ناجابجایی ۴۳
۴-۴-۲ تا مرتبه دوم پارامتر ناجابجایی ۴۴
۴-۵ نوسانگر کوانتومی ۴۶
مراجع مورد استفاده در پایان‌نامه ۴۸
پیوست الف) ۴۹
محاسبه ی اندازه در فضای ناجابجایی ۴۹
پیوست ب) ۵۱
محاسبه ی $\hat{\boldsymbol{x}}^2$ و $\hat{\boldsymbol{p}}^2$ در فضای ناجابجایی ۵۱
ب-۱) محاسبه $\hat{\boldsymbol{x}}^2$، با استفاده از مختصات $\boldsymbol{a}$ ۵۱
ب-۲) محاسبه $\hat{\boldsymbol{x}}^2$، با استفاده از مختصات $\boldsymbol{b}$ ۵۲
ب-۳) محاسبه $\hat{\boldsymbol{p}}^2$، با استفاده از مختصات $\boldsymbol{a}$ ۵۲
ب-۴) محاسبه $\hat{\boldsymbol{p}}^2$، با استفاده از مختصات $\boldsymbol{b}$ ۵۳
پیوست ج) ۵۴

محاسبه اندازه تکانه زاویه ای کل در فضای ناجابجایی ۵۴
ج-۱) با استفاده از مختصات a ۵۴
ج-۲) با استفاده از مختصات b ۵۴

فهرست شکل‌ها و نمودارها

عنوان **صفحه**

شکل۲-۱) شبکه یک بعدی ۲۰

مقدمه ؛

در سالهای اخیر برخی از مدلهای فیزیکی موجود در فضای جابجایی[1]، به فضای ناجابجایی[2] تعمیم داده شده است [۱-۵]. اگر چه فضاهای با مختصات ناجابجایی اساسا تئوری‌اند، مسائلی در حوزه های مختلف مانند: مکانیک کلاسیک، نظریه ریسمان[3]، نظریه میدان، فیزیک پلاسما، فیزیک حالت جامد، و ... در آن بررسی شده‌اند. در این تحقیق پدیده‌های مکانیک آماری [۶و۷] در فضای ناجابجایی بررسی می‌شوند. مسائلی که ما در فضای ناجابجایی حل می‌کنیم، عبارتند از:

۱-گاز ایده‌ال[4] شامل مولکول‌های تک اتمی

۲-گاز نسبیتی

۳-نوسانگر کلاسیکی

۴-نوسانگر کوانتومی

هدف از بررسی این پدیده‌ها بدست آوردن خواص ترمودینامیکی آن‌ها مانند: تابع پارش[5]، آنتروپی، انرژی درونی، انرژی آزاد، گرمای ویژه و ... در فضای ناجابجایی و مقایسه آن‌ها با فضای جابجایی می‌باشد. در این تحقیق فرض بر این است که فضای جابجایی با

---

[1] Commutative Space
[2] Noncommutative Space
[3] Sting Theory
[4] Ideal Gas
[5] Partition Function

روابـــط جابجـــایی: $[x_i, x_j] = 0$, $[p_i, p_j] = 0$, $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ و فـــضای ناجابجایی بـا روابـط: $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\theta_{ij}$, $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = i\bar{\theta}_{ij}$, $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ (کـه در آن θ و $\bar{\theta}$ پارامترهای ناجابجایی[1] اند) تعریف می‌شوند. بـدیهی اسـت کـه اگـر θ و $\bar{\theta}$ را بـه سمت صفر میل دهیم، جواب مسائل حل شده بـه همـان جـواب‌هـای فـضای معمـولی میـل می‌کنند. ایده‌ی این تحقیق از مقاله‌ای گرفته شـده اسـت کـه در آن خـواص ترمودینـامیکی نوسانگر دوبعدی میرا در فضای ناجابجایی بررسی شده است [۸و۹].

[1] Noncommutative Parameter

فصل اول؛

مکانیک کوانتومی در فضای ناجابجایی

۱- ۱ مقدمه

در این فصل سعی خواهیم کرد به بررسی چند مسئله در فضای ناجابجایی بپردازیم. فرض اساسی این است که مختصات فضا ناجابجایی دارد. بنابراین هامیلتونی سیستم را بر حسب مختصات جدید نوشته و روشهای مکانیک کوانتومی معمولی را بکار می بریم. محاسبات انجام شده در مورد نوسانگر دو بعدی نشان می دهد که ترازهای انرژی تغییر می کنند. این تغییر بگونه ایست که تبهگنی[1] ترازها از بین می رود. در مورد اتم هیدروژن نیز تغییر ترازها مشاهده می شود. این تغییر شبیه اعمال میدان مغناطیسی به اتم هیدروژن در فضای جابجایی است. سرانجام به بررسی اثر استارک[2] می پردازیم. محاسبات انجام شده نشان می دهند که، جابجایی ترازهای انرژی در اثر فضای ناجابجایی صفر است.

[1] Degenerecy
[2] Stark Effect

۱-۲ نوسانگر دو بعدی کوانتومی

روابط ناجابجایی برای مختصات فضا و تکانه، در دو بعد، بصورت زیر است[۱۰]:

$$[X,Y]=i\theta \qquad , \qquad [P_X,P_Y]=0 \tag{۱-۱}$$

مختصه های ناجابجایی که رابطه (۱-۱) را برقرار می کنند، بر اساس مختصات جابجایی بیان می شوند و برابرند با:

$$\begin{cases} X=x-\dfrac{1}{2\hbar}\theta p_y \\ Y=y+\dfrac{1}{2\hbar}\theta p_x \end{cases} \qquad , \qquad \begin{cases} P_X=p_x \\ P_Y=p_y \end{cases} \tag{۲-۱}$$

بنابراین، هامیلتونی[1] نوسانگر دو بعدی در فضای ناجابجایی برابراست با:

$$\begin{aligned} H_{NC} &= \frac{1}{2m}\left(P_X{}^2+P_Y{}^2\right)+\frac{1}{2}m\omega^2\left(X^2+Y^2\right) \\ &= \frac{1}{2m}\left(p_x{}^2+p_y{}^2\right)+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\left(x-\frac{1}{2\hbar}\theta p_y\right)^2+\left(y+\frac{1}{2\hbar}\theta p_x\right)^2\right) \\ &= \left(\frac{1}{2m}+\frac{m\theta^2\omega^2}{8\hbar^2}\right)\left(p_x{}^2+p_y{}^2\right)+\frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2+y^2\right)-\frac{m\omega^2\theta}{2\hbar}\left(xp_y-yp_x\right). \end{aligned} \tag{۳-۱}$$

حال می توانیم با جایگزینی زیر:

$$\left(\frac{1}{2m}+\frac{m\theta^2\omega^2}{8\hbar^2}\right)\equiv\frac{1}{2M} \qquad , \qquad m\omega^2\equiv M\Omega^2 \tag{۴-۱}$$

عملگرهای نردبانی را تعریف کنیم. داریم:

$$\begin{aligned} a_x &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{ip_x}{M\Omega}\right) \quad ; \quad a_x^\dagger=\sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{ip_x}{M\Omega}\right); \\ a_y &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}}\left(y+\frac{ip_y}{M\Omega}\right) \quad ; \quad a_y^\dagger=\sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}}\left(y-\frac{ip_y}{M\Omega}\right); \\ x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}\left(a_x+a_x^\dagger\right) \quad ; \quad p_x=\frac{1}{i}\sqrt{\frac{M\Omega\hbar}{2}}\left(a_x-a_x^\dagger\right); \\ y &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}}\left(a_y+a_y^\dagger\right) \quad ; \quad p_y=\frac{1}{i}\sqrt{\frac{M\Omega\hbar}{2}}\left(a_y-a_y^\dagger\right). \end{aligned} \tag{۵-۱}$$

[1] Hamiltonian

بر اساس این عملگرها، هامیلتونی شکل زیر را می گیرد:

$$H_{NC} = \hbar\Omega\left(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1\right) - \frac{M\Omega^2\theta}{2i}\left(a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x\right) \qquad (۶-۱)$$

از طرفی، در نمایش شوینگر[1] برای تکانه زاویه ای داشتیم:

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{1}{2}\left(a_x^\dagger a_y + a_y^\dagger a_x\right), \\ J_2 &= \frac{1}{2i}\left(a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x\right), \\ J_3 &= \frac{1}{2}\left(a_x^\dagger a_x - a_y^\dagger a_y\right). \end{aligned} \qquad (۷-۱)$$

مشاهده می شود که جمله $a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x$ در رابطه (۱-۶) برابر است با $2iJ_2$.

با تبدیل یکانی[2] زیر

$$\begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a'_x \\ a'_y \end{pmatrix} \qquad (۸-۱)$$

عملگر $2iJ_2$ به $2iJ'_3$،که یک عملگر قطریست، تبدیل می شود. در نتیجه هامیلتونی بـه فـرم زیـر در می آید:

$$H_{NC} = \hbar\Omega\left(a_x'^\dagger a'_x + a_y'^\dagger a'_y + 1\right) - \frac{M\Omega^2\theta}{2}\left(a_x'^\dagger a'_x - a_y'^\dagger a'_y\right) \qquad (۹-۱)$$

اگـر $\hat{N}_x = a_x'^\dagger a'_x$ و $\hat{N}_y = a_y'^\dagger a'_y$ بـه ترتیـب عملگرهـای تعـداد، بـرای نوسـانگرهای هارمونیـک در جهت x و y باشند، هامیلتونی را بصورت

$$H_{NC} = \hbar\Omega\left(\hat{N}_x + \hat{N}_y + 1\right) - \frac{M\Omega^2\theta}{2}\left(\hat{N}_x - \hat{N}_y\right) \qquad (۱۰-۱)$$

می توان نوشت. در نتیجه، ویژه مقادیر انرژی برابر

$$E^{NC}_{n_x,n_y} = \hbar\Omega\left(n_x + n_y + 1\right) - \frac{M\Omega^2\theta}{2}\left(n_x - n_y\right) \qquad (۱۱-۱)$$

می باشند.در این رابطه، n_x و n_yاعداد صحیح غیر منفی هستند.

---

[1] Schwinger Representation
[2] Unitary transformation

اگر ویژه مقادیر را بر حسب m و ω بنویسیم، داریم:

$$E^{NC}_{n_x,n_y} = m\omega^2\hbar^2\left(\frac{1}{m^2\omega^2\hbar^2}+\frac{\theta^2}{4\hbar^4}\right)^{\frac{1}{2}}\left(n_x+n_y+1\right)-\frac{m\omega^2\theta}{2}\left(n_x-n_y\right) \qquad (۱۲-۱)$$

این ویژه مقادیر غیر تبهگن اند.

در نظر داریم که نوسانگر دو بعدی به ازای هر تراز n ، $n+1$ مرتبه تبهگن است. بنابراین تبهگنی این نوسانگر در فضای ناجابجایی به کلی از بین رفته است.در ادامه، این ویژه مقادیر را برای بدست آوردن تابع پارش نوسانگر دو بعدی، استفاده خواهیم کرد.

در حد $\theta \to 0$ ویژه مقادیر، به مقدارهای فضای جابجایی میل می کنند.

$$E^{NC}_{n_x,n_y} \to \hbar\omega\left(n_x+n_y+1\right) \qquad (۱۳-۱)$$

۱-۳ اتم هیدروژن

هامیلتونی اتم هیدروژن[1] در فضای ناجابجایی برابر

$$H_{NC} = \frac{\hat{p}.\hat{p}}{2m}+V(\hat{x}) \qquad (۱۴-۱)$$

است. اگر مختصات فضای ناجابجایی را بصورت

$$\hat{x}_i = x_i - \frac{1}{2\hbar}\theta_{ij}p_j \qquad , \qquad \hat{p}_i = p_i \qquad (۱۵-۱)$$

در نظر بگیریم، تنها پتانسیل کولنی تغییر می کند[11].

بنابر این داریم:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{\sqrt{\hat{x}\hat{x}}} \qquad (۱۶-۱)$$

حال اگر انرژی پتانسیل در فضای ناجابجایی را بر حسب مختصات جابجایی بنویسیم، داریم:

[1] Hydrogen atom

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{\sqrt{\left(x_i - \theta_{ij}p_j/2\hbar\right)\left(x_i - \theta_{ik}p_k/2\hbar\right)}}$$
$$= -\frac{Ze^2}{r} - Ze^2\frac{x_i\theta_{ij}p_j}{2\hbar r^3} + O\left(\theta^2\right) \qquad (۱-۱۷)$$
$$= -\frac{Ze^2}{r} - Ze^2\frac{L.\theta}{4\hbar r^3} + O\left(\theta^2\right)$$

که در آن $\theta_{ij} = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\theta_k$ و $L = r \times p$.

در رابطه (۱-۱۷)، جمله دوم بخاطر ناجابجا بودن فضا ظاهر شد. این جمله را می توان بعنوان یک اختلال در نظر گرفت. جا بجایی ترازهای ا نرژی، ناشی از ناجابجا بودن فضا، تا مرتبه اول اختلال[1] برابر است با:

$$\Delta E_{NC}^{H-atom} = -\left\langle nl'jj'_z\right|\frac{Ze^2}{4\hbar}\frac{L.\theta}{r^3}\left|nljj_z\right\rangle \qquad (۱-۱۸)$$

اگر جهت ناجابجایی[2] را در راستای $\hat{k}$ بگیریم، آنگاه $L.\theta = L_z\theta$.

حال با توجه به اینکه

$$\left\langle ljj_z\right|L_z\left|l'jj'_z\right\rangle = j_z\hbar\left(1 \mp \frac{1}{2l+1}\right)\delta_{ll'}\delta_{j_zj'_z} \qquad , j = l \pm \frac{1}{2} \qquad (۱-۱۹)$$

جابجایی ترازهای انرژی برابر

$$\Delta E_{NC}^{H-atom} = -\frac{m_ec^2}{4}(Z\alpha)^4\frac{\theta}{\lambda_e^2}j_z\left(1 \mp \frac{1}{2l+1}\right)f_{n,l}\delta_{ll'}\delta_{j_zj'_z} \qquad , j = l \pm \frac{1}{2} \qquad (۱-۲۰)$$

می شود. در این رابطه، λ_e طول موج کامپتون[3] الکترون و $f_{n,l} = \frac{1}{n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}$ می باشد.

[1] Perturbation
[2] Noncommutative direction
[3] Compton wavelength

مشاهده می شود که ویژه مقادیر انرژی، به چهار عدد کوانتومی وابسته شد. وابستگی انرژی به عدد کوانتومی j_z، بعلت ناجابجا بودن فضاست.

اثر استارک[1]

انرژی پتانسیل یک الکترون اتمی در یک میدان الکتریکی، که در امتداد محور z اعمال می شود، در فضای ناجابجایی برابر است با:

$$V_{NC}^{stark} = eEz + \frac{e}{4\hbar}(\theta \times p).E \qquad (۲۱-۱)$$

در رابطه فوق $\hat{z} = z + \frac{1}{4\hbar}(\theta \times p)_z$ می باشد.

تغییر ترازهای انرژی ناشی از ناجابجایی (دومین جمله در (۱-۲۱)) برابر

$$\Delta E_{NC}^{stark} = \langle nl'jj'_z | \frac{e}{4\hbar}(\theta \times p).E | nljj_z \rangle \qquad (۲۲-۱)$$

است.

عملگر تکانه در رابطه فوق را بصورت $p_i = \frac{m}{i\hbar}[x_i, H_0]$، که در آن H_0 هامیلتونی مختل نشده است، می توان نوشت. بطوریکه:

$$H_0 | nljj_z \rangle = E_n | nljj_z \rangle \qquad (۲۳-۱)$$

بنابر این جابجایی ترازهای انرژی برابر

$$\Delta E_{NC}^{stark} \propto (\theta \times E)_i \langle nl'jj'_z | [x_i, H_0] | nljj_z \rangle = 0 \qquad (۲۴-۱)$$

می باشد. یعنی فضای ناجابجایی تاثیری در اثر استارک ندارد. در واقع چون میدان الکتریکی در یک راستا نیرو وارد می کند، الکترون اتمی در یک بعد حرکت می کند و می دانیم که فضای ناجابجایی، برای بیشتر از یک بعد معنی دار است.

[1] Stark Effect

فصل دوم؛

مکانیک آماری در فضای جابجایی

۲-۱ مقدمه

هدف از این فصل، یادآوری مسائلی است که در مکانیک آماری حل می کردیم. در اینجا مسائلی را اشاره می کنیم، که قصد داریم در فضای ناجابجایی آنها را حل کنیم. با مقایسه جوابهای بدست آمده از فصل ۴ به اثرات فضای ناجابجایی پی می بریم.

فرضیات اساسی در این فصل به قرار زیراند:

$$\begin{aligned} \{x_i, x_j\} &= 0 & [x_i, x_j] &= 0 \\ \{p_i, p_j\} &= 0 & [p_i, p_j] &= 0 \\ \{x_i, p_j\} &= \delta_{ij} & [x_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij} \end{aligned} \qquad (۱-۲)$$

که عنصر حجم در فضای فاز، برابر با d^3pd^3q می باشد.

۲-۲ گاز ایده آل، شامل مولکولهای تک اتمی

سیستمی متشکل از N ذره (ملکول تک اتمی) که هر یک دارای جرم m هستند، در محفظه ای به حجم $V(=L^3)$ و دمای تعادل T در نظر بگیرید. فرض کنید اثرات برهمکنش بین مولکولی قابل چشم پوشی است.

به این ترتیب، سیستم ما یک گاز ایده آل بولتزمن[1] می شود.

تحت این فرضیات، تابع پارش سیستم از رابطه زیر بدست می آید:

$$Q_N(V,T) = \frac{1}{N!}\left[Q_1(V,T)\right]^N \qquad (۲-۲)$$

که $Q_1(V,T)$ را می توان تابع پارش یک تک مولکول در سیستم نامید. نتیجه مذکور از این فرض بدست می آید که اجزای بنیادی سیستم ما غیر برهمکنشی اند (و بنابراین انرژی کل سیستم، مجموع انرژیهای مجزای آنها است).

واضح است که این وضعیت حتی اگر مولکولها درجات درونی حرکت داشته باشند هم تغییر نخواهد کرد.

چیزی که برای درستی رابطه (۲-۲) لازم است، نبود برهمکنش بین اجزاء بنیادی سیستم است. همچنین متذکر می شویم، گاز تک اتمی در صورتی تک اتمی تلقی می شود، که انرژی گرمایی K_BT در مقایسه با انرژی یونیزاسیون[2] E_{ion} کوچک باشد. برای اتمهای متفاوت، این شرط به $T \ll \frac{E_{ion}}{K_B} \approx 10^4 - 10^5\,K^\circ$ می انجامد. در این دماها تعداد اتمهای یونیزه شده در گاز کاملا ناچیز است. برای اتمهای در حالت برانگیخته نیز این موضوع صادق است. اختلاف انرژی هر یک از حالتهای برانگیخته با انرژی حالت پایه اتم، معمولا از مرتبه خود انرژی یونیزاسیون است. پس همه اتمهای گاز را در حالت پایه شان در نظر می گیریم. اکنون به بررسی کلاسیکی و کوانتومی سیستم می پردازیم.

[1] Boltzmann
[2] Ionization Energy

۲-۲-۱ بررسی کلاسیک

سیستم مورد نظر را در آنسامبل کانونیک[1] حل می کنیم. از آنجا که ذرات سیستم آزادند، تمام انرژی سیستم، جنبشی است. پس هامیلتونی یک تک مولکول برابر است با:

$$H_1(q,p)=\frac{p^2}{2m} \qquad (۳-۲)$$

تابع پارش یک تک مولکول از رابطه ی

$$Q_1=\frac{1}{h^3}\int e^{-\beta H_1}d^3pd^3q \qquad (۴-۲)$$

بدست می آید. بنابراین:

$$Q_1=\frac{1}{h^3}\int e^{-\beta\frac{p^2}{2m}}d^3p\int d^3q \qquad (۵-۲)$$

$$Q_1=\frac{V}{h^3}(2\pi mKT)^{\frac{3}{2}} \qquad (۶-۲)$$

با استفاده از رابطه (۲-۲)، تابع پارش سیستم برابر

$$Q_N=\frac{V^N}{N!h^{3N}}(2\pi mKT)^{\frac{3N}{2}} \qquad (۷-۲)$$

است. با داشتن تابع پارش، کمیتهای ترمودینامیکی سیستم مورد نظر بدست می آیند. داریم:

$$A(N,V,T)=-KT\,ln\,Q_N(V,T)=NKT\left[ln\left\{\frac{N}{V}\left(\frac{h^2}{2\pi mKT}\right)^{\frac{3}{2}}\right\}-1\right] \qquad (۸-۲)$$

$$\mu=\left(\frac{\partial A}{\partial N}\right)_{V,T}=KT\,ln\left\{\frac{N}{V}\left(\frac{h^2}{2\pi mKT}\right)^{\frac{3}{2}}\right\} \qquad (۹-۲)$$

$$P=-\left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_{N,T}=\frac{NKT}{V} \qquad (۱۰-۲)$$

[1] Canonical Ensemble