**Date: 1402/10/14**

In the name of God

**Advanced Statistical Mechanics I, Third Midterm exam, (Time allowed: 2 hours)**

**1.** Matrix representation of angular momentum operators for a particle with the value of $L = 1$ is given as follows:

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

Now, suppose we turn on the magnetic field in the $z$ direction and therefore the Hamiltonian is given by:

$$\mathcal{H} = -\alpha \vec{B}.\vec{L} \tag{2}$$

Find the expectation values of $\langle L_x \rangle$, $\langle L_y \rangle$, $\langle L_z \rangle$ in the canonical ensemble. (15 points)

**2.** For two ideal particles system:
a: Show that the $\Psi^{(A.S.)}(r_1, r_2)$ is normalized. (5 points)
b: Derive the density matrix in the coordinate representation, $\rho^{(A.S.)} = \langle r_1', r_2' | \frac{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}}{Z} | r_1, r_2 \rangle$ and explain the corresponding physical meaning. (Hint: $f(r' - r) = \langle r' | e^{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}} | r \rangle = \frac{1}{\lambda^3} e^{-\frac{\pi}{\lambda^2}(r'-r)^2)}$) (10 points)

**3.** Suppose we just have three noninteracting particles (each particle has mass denoted by $m$ which is equal together) in the one-dimensional box with size $a$. The total energy of this system is:

$$E = E_A + E_B + E_C = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}({n_A}^2 + {n_B}^2 + {n_C}^2) \tag{3}$$

where $n_A$, $n_B$ and $n_C$ are positive integer values.
a) Find all combinations of $(n_A, n_B, n_C)$ for which, we achieve the fixed energy as $E / \left( \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \right) = 363$ and if we consider the $n \in \{1, 5, 7, 11, 13, 17, 19\}$. (Hint: The total number of micro-states are $\mathcal{N} = 13$ irrespective the type of particles.) (10 points)
b) Find the probability of finding the particle in each of the possible energy levels determined in the previous part for classical, bosons and fermions, separately. (10 points)
c) Use the following relations and show that the statements you obtained in part (a) and (b) are correct. (10 points)

$$W_{M.B.}\{n_i\} = \prod_i \frac{(g_i)^{n_i}}{n_i!}; \quad W_{B.E.}\{n_i\} = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}; \quad W_{F.D.}\{n_i\} = \prod_i \frac{g_i!}{(g_i - n_i)!} \tag{4}$$

**4.** Using the entropy as $S(N, V, E) = k_B \ln W(\{n\})$, where $W(\{n\})$ is the probability of having a configuration denoted by $\{n\}$, compute the most probable value of number of particle in $i$th energy level if associated level has the degeneracy equates to $g_i$ for $M.B.$, $B.E.$ and $F.D.$ statistics. (Hints: You should derive $W(\{n\})$ which is given by Eq. (4)). (10 ponts)

Good luck, Movahed

پاسخنامه
امتحان میانترم سوم
مکانیک آماری پیشرفته

$\boxed{1}$

$$H = -\alpha \vec{B}\cdot\vec{L} \xrightarrow[\text{در جهت } z \text{ است}]{\text{در صورت سوال قید شده میدان}} H = -\alpha B_z L_z$$

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{\alpha\beta B_z L_z}$$

درتوان exp ماتریس $L_z$ قرار دارد، پس exp را بسط می‌دهیم:

$$e^{X} = 1 + X + \frac{X^2}{2!} + \frac{X^3}{3!} + \cdots$$

$$e^{\alpha\beta B_z L_z} = \mathbb{1} + \alpha\beta B_z\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{(\alpha\beta B_z\hbar)^2}{2!} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$+ \frac{(\alpha\beta B_z\hbar)^3}{3!} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \cdots$$

$$e^{\alpha\beta B_z L_z} = \begin{pmatrix} 1+\alpha\beta B_z\hbar + \frac{(\alpha\beta B_z\hbar)^2}{2!} + \frac{(\alpha\beta B_z\hbar)^3}{3!} + \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1-\alpha\beta B_z\hbar + \frac{(\alpha\beta B_z\hbar)^2}{2} - \frac{(\alpha\beta B_z\hbar)^3}{3!} \cdots \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{\alpha\beta B_z\hbar} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\alpha\beta B_z\hbar} \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho} = \frac{\begin{pmatrix} e^{\alpha\beta B_z\hbar} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\alpha\beta B_z\hbar} \end{pmatrix}}{e^{\alpha\beta B_z\hbar} + e^{-\alpha\beta B_z\hbar} + 1}$$

$$\langle L_z\rangle = Tr(\hat{\rho}L_z) = \frac{Tr\left[\hbar\begin{pmatrix} e^{\alpha\beta B_z\hbar} & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & e\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\right]}{e^{\alpha\beta B_z\hbar}+e^{-\alpha\beta B_z\hbar}+1}$$

$$= \frac{\hbar\left(e^{\alpha\beta B_z\hbar}-e^{-\alpha\beta B_z\hbar}\right)}{e^{\alpha\beta B_z\hbar}+e^{-\alpha\beta B_z\hbar}+1} = \frac{2\hbar\sinh(\alpha\beta B_z\hbar)}{2\cosh(\alpha\beta B_z\hbar)+1}$$

$$\langle L_y\rangle = Tr(\hat{\rho}L_y) = \frac{Tr\left[\frac{\hbar}{\sqrt{2}i}\begin{pmatrix} e^{\alpha\beta B_z\hbar} & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & e^{-\alpha\beta B_z\hbar}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ -1 & 0 & 1\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix}\right]}{e^{\alpha\beta B_z\hbar}+e^{-\alpha\beta B_z\hbar}+1}$$

$$= \frac{\frac{\hbar}{\sqrt{2}i}Tr\begin{pmatrix} 0 & e^{\alpha\beta B_z\hbar} & 0\\ -1 & 0 & 1\\ 0 & -e^{-\alpha\beta B_z\hbar} & 0\end{pmatrix}}{e^{\alpha\beta B_z\hbar}+e^{-\alpha\beta B_z\hbar}+1} = 0$$

$$\langle L_x\rangle = Tr(\hat{\rho}L_x) = \frac{Tr\left[\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{\alpha\beta B_z\hbar} & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & e^{-\alpha\beta B_z\hbar}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\right]}{e^{\alpha\beta B_z\hbar}+e^{-\alpha\beta B_z\hbar}+1}$$

$$= \frac{\frac{\hbar}{\sqrt{2}}Tr\begin{pmatrix} 0 & e^{\alpha\beta B_z\hbar} & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & e^{-\alpha\beta B_z\hbar} & 0\end{pmatrix}}{e^{\alpha\beta B_z\hbar}+e^{-\alpha\beta B_z\hbar}+1} = 0$$

روش دیگر که در آن ویژه مقدارهای $\varepsilon_1$، $\varepsilon_2$، $\varepsilon_3$ را پیدا می‌کنیم نیز به نتایج بالا ختم می‌شود.

$\boxed{2}$ a)

$$\psi^{A.S}(r_1,r_2) = \sum_P \frac{(-1)^P}{\sqrt{2!}}\phi_{k_1}(r_1)\phi_{k_2}(r_2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2!}}\left[\phi_{k_1}(r_1)\phi_{k_2}(r_2) - \phi_{k_2}(r_1)\phi_{k_1}(r_2)\right]$$

$$\psi^{A.S*}(r_1,r_2)\,\psi^{A.S}(r_1,r_2) = \frac{1}{2}\Big[\phi^*_{k_1}(r_1)\phi^*_{k_2}(r_2)\phi_{k_1}(r_1)\phi_{k_2}(r_2) - \phi^*_{k_1}(r_1)\phi^*_{k_2}(r_2)\phi_{k_1}(r_2)\phi_{k_2}(r_1)$$

$$- \phi^*_{k_1}(r_2)\phi^*_{k_2}(r_1)\phi_{k_1}(r_1)\phi_{k_2}(r_2) + \phi^*_{k_1}(r_2)\phi^*_{k_2}(r_1)\phi_{k_1}(r_2)\phi_{k_2}(r_1)\Big]$$

توابع $\phi_1$ و $\phi_2$ متعامد هستند. جمله دوم و سوم مساوی صفر می‌شوند و جملات اول و دوم هرکدام یک هستند:

$$|\psi^{A.S}(r_1,r_2)|^2 = \frac{1}{2}(2) = 1$$

b)

$$\langle r_1', r_2' | e^{-\beta\hat{H}} | r_1, r_2\rangle = f(r_1'-r_1)f(r_2'-r_2) \pm f(r_1'-r_2)f(r_2'-r_1)$$

$$= \frac{1}{\lambda^6}\Big\{\exp\Big(\frac{-\pi}{\lambda^2}\big((r_1'-r_1)^2 + (r_2'-r_2)^2\big)\Big)$$

$$\pm \exp\Big(\frac{-\pi}{\lambda^2}\big((r_1'-r_2)^2 + (r_2'-r_1)^2\big)\Big)\Big\}$$

$$\langle r_1', r_2' | \rho | r_1, r_2\rangle = \frac{1}{Z^{A.S}\lambda^6}\Big[1 \pm \exp\Big\{\frac{-2\pi}{\lambda^2}(r_1-r_2)^2\Big\}\Big]$$

$\boxed{3}$ a)

(11,11,11)

(13,13,5) (13,5,13) (5,13,13)

(1,1,19) (1,19,1) (19,1,1)

(5,7,17) (5,17,7) (7,5,17) (7,17,5) (17,5,7) (17,7,5)

b) ذرات کلاسیک :

$$P_1 = \left(\frac{3}{13}\right) \times \left(\frac{2}{3}\right) = \frac{2}{13} \quad , \quad P_5 = \left(\frac{3}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) + \left(\frac{6}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{3}{13}$$

$$P_7 = \left(\frac{6}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{2}{3} \quad , \quad P_{11} = \frac{1}{3} \quad , \quad P_{13} = \left(\frac{3}{13}\right) \times \frac{2}{3} = \frac{2}{13}$$

$$P_{17} = \left(\frac{6}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{2}{3} \quad , \quad P_{19} = \left(\frac{3}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{13}$$

ذرات فرمیون :

درصورتی که ذرات فرمیون باشند سه ترکیب اول هرکدام رخ نمی دهد و فقط آخرین ترکیب باقی می ماند. چون ذرات تمیز ناپذیر هستند پس هر شش حالت در واقع یک حالت است.

$$P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$$

ذرات بوزون :

چون ذرات تمیز ناپذیر هستند، پس در هر پیکربندی با حالت ٤ ی متفاوت به یک حالت تقلیل پیدا می کنند.

$$P_1 = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{2}{3}\right) = \frac{1}{6} \quad , \quad P_5 = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) + \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{6}$$

$$P_7 = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{12} \quad , \quad P_{11} = \left(\frac{1}{4}\right) \times (1) = \frac{1}{4} \quad , \quad P_{13} = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{2}{3}\right) = \frac{1}{6}$$

$$P_{17} = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{12} \quad , \quad P_{19} = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{12}$$

c)

$$N = 3,\ g_i = 1 \rightarrow \begin{cases} W = 6 \prod_{i=1}^{\infty} \dfrac{1}{n_i!} & \text{ذرات کلاسیک تمیز پذیر} \\[2ex] W = \prod_{i=1}^{\infty} \dfrac{1}{n_i!\,(1-n_i)!} & \text{فرمیون} \\[2ex] W = 1 & \text{بوزون} \end{cases}$$

* دقت کنید ضریب $g_i$ قبل از $W$ ذرات کلاسیک، به این خاطر گذاشتیم که در محاسبات ابتدا ذرات تمیز پذیر در نظر می‌گرفتیم و سپس تصحیح گیبس $\frac{1}{N!}$ را وارد می‌کردیم. در بخش (ط) ذرات کلاسیک را تمیزپذیر گرفتیم و تمام حالت‌های بدست آمده را در محاسبات خود در نظر گرفتیم، پس اینجا لازم است که ابتدا $N!$ را در عبارت $W_{M.B}$ ضرب کنیم.

* توجه کنید که برای انرژی کل $E$ حالت‌های متفاوتی داریم که می‌توانند به این انرژی ختم شوند. ولی برای هر ذره منفرد تبهگنی نداریم چون هر ذره در یک چاه پتانسیل یک بعدی قرار دارد و فقط یک حالت می‌تواند به انرژی این ذره منفرد ختم شود، پس $g_i = 1$ است.

به طور مثال چنانچه همین سوال برای سه ذره در یک چاه پتانسیل سه بعدی مطرح می‌شد، در اینصورت $g_i = 3$ بود چون برای هر ذره حالت‌های $n_x$، $n_y$، $n_z$ می‌توانند به انرژی یکسانی برای یک تک ذره ختم شود.

عبارت‌هایی که در آن $\frac{1}{0!}$ و $\frac{1}{1!}$ داریم برابر 1 است که آنها را نمی‌نویسیم. همچنین در عبارت‌هایی که $\frac{1}{(\text{عدد منفی})!}$ باشد مساوی صفر قرار می‌دهیم.

ترکیب اول $(n_1 = 3,\ \text{others } 0)$ :

$$\begin{cases} W = 6 \times \frac{1}{3!} = 1 & \text{ذرات کلاسیک} \\ W = \frac{1}{3!} \times \frac{1}{(-2)!} = 0 & \text{فرمیون} \\ W = 1 & \text{بوزون} \end{cases}$$

ترکیب دوم $(n_5 = 1,\ n_{13} = 2)$ :

$$\begin{cases} W = 6 \times \frac{1}{1!} \times \frac{1}{2!} = 3 & \text{ذرات کلاسیک} \\ W = \frac{1}{1!\,0!} \times \frac{1}{2!\,(-1)!} = 0 & \text{فرمیون} \\ W = 1 & \text{بوزون} \end{cases}$$

ترکیب سوم $(n_1 = 2,\ n_{19} = 1)$ :

$$\begin{cases} W = 6 \times \frac{1}{2!} \times \frac{1}{1!} = 3 & \text{ذرات کلاسیک} \\ W = \frac{1}{2!\,(-1)!} \times \frac{1}{1!\,0!} = 0 & \text{فرمیون} \\ W = 1 & \text{بوزون} \end{cases}$$

ترکیب چهارم $(n_5=n_7=n_{17}=1)$ :

$$\begin{cases} W = 6 \times \frac{1}{1!} \times \frac{1}{1!} \times \frac{1}{1!} = 6 & \text{ذرات کلاسیک} \\ W = \frac{1}{1!0!} \times \frac{1}{1!0!} \times \frac{1}{1!1!} = 1 & \text{فرمیون} \\ W = 1 & \text{بوزون} \end{cases}$$

$\boxed{4}$

$$S(N,V,E) \simeq k \ln W\{n_i^*\}$$

$$\delta \ln W\{n_i\} - \left[\alpha \sum_i \delta n_i + \beta \sum_i \varepsilon_i \delta n_i\right] = 0$$

$$\ln W\{n_i\} = \sum_i \ln w(i) \simeq \sum_i \left[n_i \ln\left(\frac{g_i}{n_i} - a\right) - \frac{g_i}{a} \ln\left(1 - a\frac{n_i}{g_i}\right)\right]$$

$$a = \begin{cases} -1 & B.E \\ 0 & M.B \\ 1 & F.D \end{cases}$$

$$\sum_i \left[\ln\left(\frac{g_i}{n_i} - a\right) - \alpha - \beta\varepsilon_i\right]_{n_i = n_i^*} \delta n_i = 0$$

$$\ln\left(\frac{g_i}{n_i^*} - a\right) - \alpha - \beta\varepsilon_i = 0$$

$$n_i^* = \frac{g_i}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_i} + a}$$