بسم الله الرحمن الرحیم

جلسه ۱۴۰۰/۱۰/۹

Recall

① $\langle \hat{f} \rangle = Tr(\hat{\rho} \hat{f})$

② Canonical Ensemble $\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}}{Z} \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$

③ $\langle \hat{f} \rangle_{\text{Canonical Ensemble}} = \frac{Tr(e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \hat{f})}{\underbrace{Tr(e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}})}_{Z}}$

Ex2: A linear Harmonic oscillator

سیستم نوسانگر هماهنگ

$N = 1$

$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \longleftarrow$ نظیر کلاسیک

$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2$

$E_n = (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega$ Eigenvalue.

Hermite Polynomial

$\phi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{H_n(\xi)}{(2^n n!)^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ Eigenvector

تابع در فضای مختصات

$$\begin{cases} \xi \equiv \left(\dfrac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} q \\[2ex] H_n(\xi) = (-1)^n \, e^{\xi^2} \left(\dfrac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \end{cases}$$

$$\hat{\rho}_{can} = ?$$

$$\boxed{\rho_{can}^{class} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z}}$$

$$\downarrow$$

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}}{Z} \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

$$\hat{\mathcal{H}} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$$ ← همه محاسبات را از این به بعد در تصویر پایه های هامیلتونی ادامه می دهم

Momentum Representation

$$E_n = \left(\tfrac{1}{2}+n\right)\hbar\omega$$

ترازهای انرژی را می دهد.

$$\rho_{mn} = \rho_n \delta_{nm} = \langle \phi_n | \hat{\rho} | \phi_n \rangle$$

عناصر قطری $\rho_n = \dfrac{e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)}}{Z}$?

یعنی احتمال.

$$\rho = \begin{array}{c|c} & m \rightarrow \\ \hline n \downarrow & \begin{bmatrix} e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+1)} & 0 & \cdots & \cdots \\ \vdots & 0 & e^{-\beta\hbar(\frac{1}{2}+2)\omega} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)} \end{bmatrix}_{\infty\times\infty} \end{array}$$

قطری

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi_n | e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} | \phi_n \rangle$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)} \underbrace{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}_{1}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)} = \left[2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right]^{-1}$$

قبلاً هم اومده بودیم. خیلی عجیب نیست چرا جواب یکی شدن.

بدیهی بود اینا چون فقط جبر ماتریسی (محاسبات) در قطری کردیم + گسسته بودیم

Discrete

$$\rho_n = \frac{e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)}}{\left[2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right]^{-1}}$$

احتمال اینکه نوسانگر در هر کدام از n ام پیدا شود.

Now $\rightarrow$ Coordinate Representation

$(p) \longrightarrow (q)$ نمایش مختصات

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}}{Z}\,\hat{1}$$

$$\rho_{qq'} = \left\langle \phi(q') \left| \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}}{Z} \right| \phi(q) \right\rangle$$ عنصر غیرقطری

$$\rho_{qq} = \left\langle \phi(q) \left| \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}}{Z} \right| \phi(q) \right\rangle$$ عنصر قطری

$$\left\langle \phi(q') \middle|\, \underbrace{\wedge}_{\sum_{n'} |n'\rangle\langle n'|}\, \hat{\rho} \,\overbrace{\wedge}^{\sum_n |n\rangle\langle n|}\, \middle| \phi(q) \right\rangle = \sum_{nn'} \underbrace{\langle \phi(q') | n' \rangle}_{\phi^*_{n'}(q')} \langle n' | \hat{\rho} | n \rangle \overbrace{\langle n | \phi(q) \rangle}^{\phi_n(q)}$$

شرط کامل بودن فضای بردارها

$$= \sum_{n'n} \phi^*_{n'}(q')\, \underbrace{\langle n' | \hat{\rho} | n \rangle}\, \phi_n(q)$$

الان ماتریس چگالی در تصویر انرژی که قبلاً حساب کردیم.

$$\langle \phi(q')|\hat{\rho}|\phi(q)\rangle = \sum_{nn'} \phi^*_{n'}(q') \underbrace{\frac{e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)}}{Z}\delta_{nn'}}_{\text{قطری است}} \phi_n(q)$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_{n=0}^{\infty} \phi^*_n(q')\, e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)}\, \phi_n(q)$$

(19) page 125

(A) $$\underbrace{\langle \phi(q')|\hat{\rho}|\phi(q)\rangle}_{\text{عناصر ماتریس اپراتور در فضای مختصات}} = \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\beta\hbar\omega)}\right]^{1/2} e^{\left[-\frac{m\omega}{4\hbar}\left\{(q+q')^2\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)+(q-q')^2\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right\}\right]}$$

نکته: معنی عبارت بالا چیست؟

فرض کنید ذره مورد نظر در تراز $n=0$ نشسته باشد

احتمال پیدا شدن ذره در تراز $n=0$ چقدر است؟ ← 1

عنصر قطری

$$\langle \phi(q)|\hat{\rho}|\phi(q)\rangle = \frac{e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}\,|\phi_0(q)|^2}{\mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{H}})}$$

از بالا داریم

$$\mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{H}}) = \int dq\, \langle \phi(q)|e^{-\beta\hat{H}}|\phi(q)\rangle$$

$$= \int dq \sum_{nn'} \underbrace{\langle \phi(q) | n \rangle}_{\phi_n^*(q)} \underbrace{\langle n | e^{-\beta \hat{H}} | n' \rangle}_{e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)} \delta_{nn'}} \underbrace{\langle n' | \phi(q) \rangle}_{\phi_{n'}(q)}$$

$$= \int dq \sum_n |\phi_n(q)|^2 e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)}$$

$n=0$

$$= \int dq \, |\phi_0(q)|^2 e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}$$

$$= \boxed{e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}} \underbrace{\int dq \, |\phi_0(q)|^2}_{1}}$$

$$\rho_{qq} \sim |\phi_0(q)|^2 \sim e^{-\frac{m\omega q^2}{\hbar}}$$

احتمال اینکه ذره در مختصات q از مبدا و حتی نقطه‌ای غیر قابل

انرژی

دسترس داشته باشد

احتمال اینکه ذره در دمای صفر در مختصات q باشد

نوسانگر هماهنگ

$$\langle \hat{H} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \overbrace{Tr\left(e^{-\beta \hat{H}}\right)}^{Z}$$

برگردیم به ادامه مسئله

$$\boxed{\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}$$ (B)

نکته مهم

$$\langle \phi(q) | \hat{q} | \phi(q) \rangle = (B) \rightarrow (A)$$

احتمال اینکه ذره در مختصات q پیدا شود

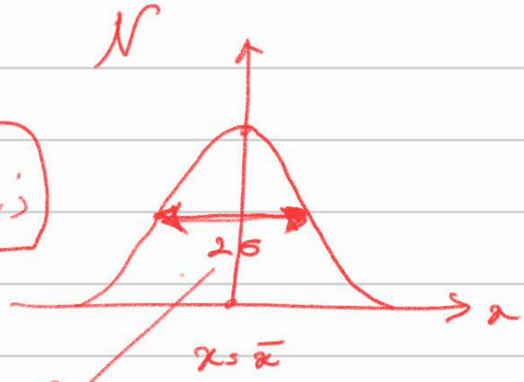
قید مکانی داریم، نه ثابت

احتمال پیدا شدن ذره در مختصات q $= \left(\frac{m\omega^2}{2\pi\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega^2 q^2}{2\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle}}$

Real Gaussia distribut $N(\bar{x}, \sigma)$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}}$$

ذره در فضای مختصات



$x \equiv q$

$\bar{x} = 0$

$$\begin{cases} \sigma_q^2 = \dfrac{\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle}{m\omega^2} \\ \sigma_q = q_{rms} = \left(\dfrac{\langle\mathcal{H}\rangle}{m\omega^2}\right)^{\frac{1}{2}} \end{cases}$$

گستردگی حضور ذره (گسترده شدن در فضا) نشان می‌دهد.

متوجه این جمله‌ای باشیم که از اینجا بستیم

فشار ندارد

$$f_q \sim e^{-\frac{q^2}{2\sigma_q^2}} \sim e^{-\frac{(q-\langle q\rangle)^2}{2\sigma_q^2}}$$

دیگر جرم به طور موثر جابجا نمی‌شود

$\boxed{\text{فشار } P_{sm}}$ قبلاً دیده بودیم

انرژی، جرم و ω

مسئله را از زاویه دیگری نگاه کنید!

اصل سادگی که در q حلقه $\longrightarrow$ $e^{-\frac{q^2}{2\sigma_q^2}} \sim e^{-\frac{q^2}{2q_{rms}^2}}$

$$q_{rms}^2 = \frac{\langle \hat{H} \rangle}{m\omega^2} \longrightarrow \boxed{\langle \hat{H} \rangle = m\omega^2 q_{rms}^2}$$

$$\underbrace{\frac{1}{2}\langle \hat{H} \rangle}_{\text{تقسیم انرژی}} = \underbrace{\frac{1}{2} m\omega^2 q_{rms}^2}_{\text{متوسط انرژی پتانسیل نوسانگر}}$$

$$\hat{H} = \underbrace{\text{Kinetic}}_{\sim p^2} + \underbrace{\text{Potential}}_{\sim q^2}$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \text{Kinetic} \rangle + \langle \text{Potential} \rangle \qquad f=2 \;\; \text{Kinetic},\ \text{Potential}$$

$$= \frac{1}{2}\langle H \rangle + \frac{1}{2}\langle H \rangle = \frac{f}{2} KT = KT$$

$\boxed{\text{ثابت؟} \quad \langle q \rangle = 0 \longleftrightarrow \text{چون فشار ندارد}}$

متوسط مختصات ذره جا به جا نمی‌شود

نکته پایانی :

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2$$

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \right\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\langle \mathcal{H} \rangle + \frac{1}{2}\langle \mathcal{H} \rangle = KT \qquad \boxed{N=1}$$

کلاسیک

$\beta\hbar\omega \ll 1$ ← عناصر غیر قطری سهم خیلی کوچکی پیدا می‌کنند فاز‌های مختلف

عناصر غیر قطری سهم کوچک‌تری دارند

$\beta\hbar\omega \gg 1 \longrightarrow$ Purely Quantum Mechanical Regim

Many Body

تابع موج ساده نیست

Density operator ذره در تکانه (p) ، مکان (q)

$\rho(q,p)\, d_q^{3N}\, d_p^{3N}$ آماری

$$1 = \int \rho(q,p)\, \frac{d_p^{3N}\, d_q^{3N}}{h^{3N}}$$

$N=1$

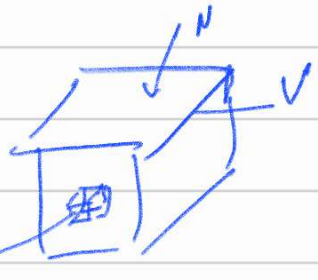
$$\rho(q) = \int \frac{d_p^{3N}}{h^{3N}}\, \rho(q,p) \leftarrow \text{ضرب } \frac{1}{}$$

سهم نشان می‌دهد که احتمال بیابد q

فقط به مکان بستگی دارد

احتمال $= \psi_n^*(r)\,\psi_n(r)$

[illegible]



چگالی تعداد $= \dfrac{N}{V}$

مثلاً $\boxed{\rho_1 \text{ ذره } = \dfrac{1}{V}}$

Ex3

جلسه بعد