بسم الله الرحمن الرحیم

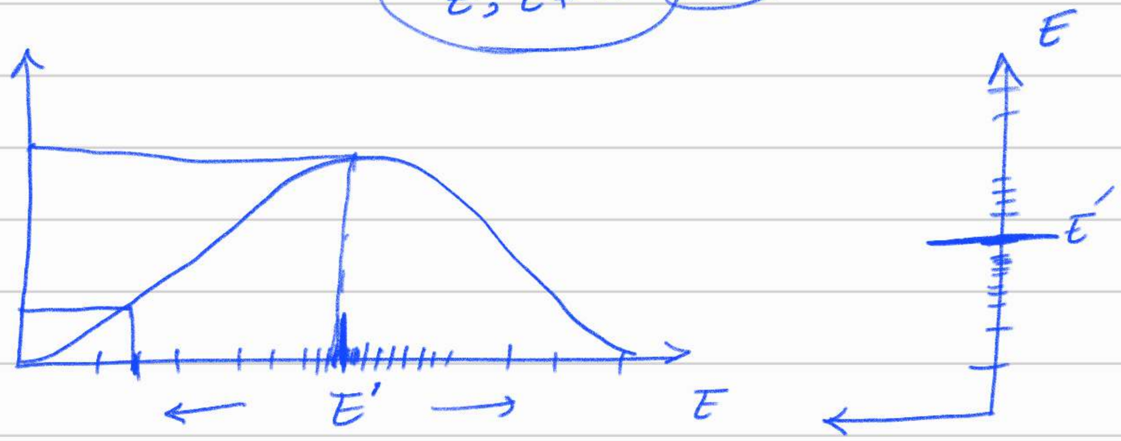
جلسه ۱۶/۹/ ۱۴۰۰

Density of Energy State (DOS

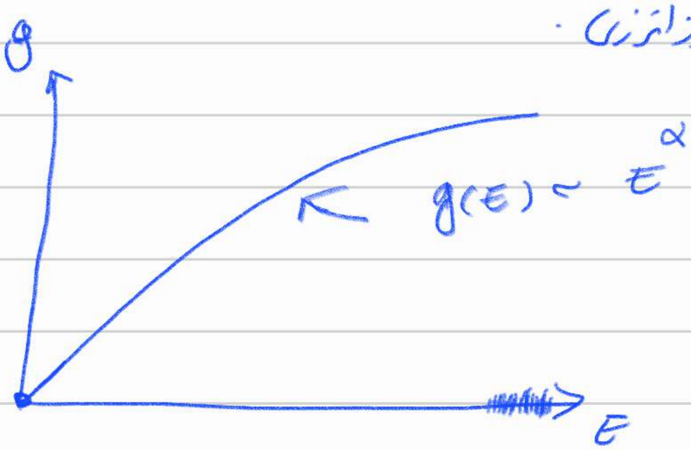
1. $\rho(q,p)\,d\Gamma$ احتمال یافتن حالتی با $q, q+dq$ / $p, p+dp$ $\qquad \mathcal{H}(q,p) = \dots$

$g(E)\,dE$ تعداد (احتمال یافتن) ترازهای انرژی با انرژی $E, E+dE$

2.

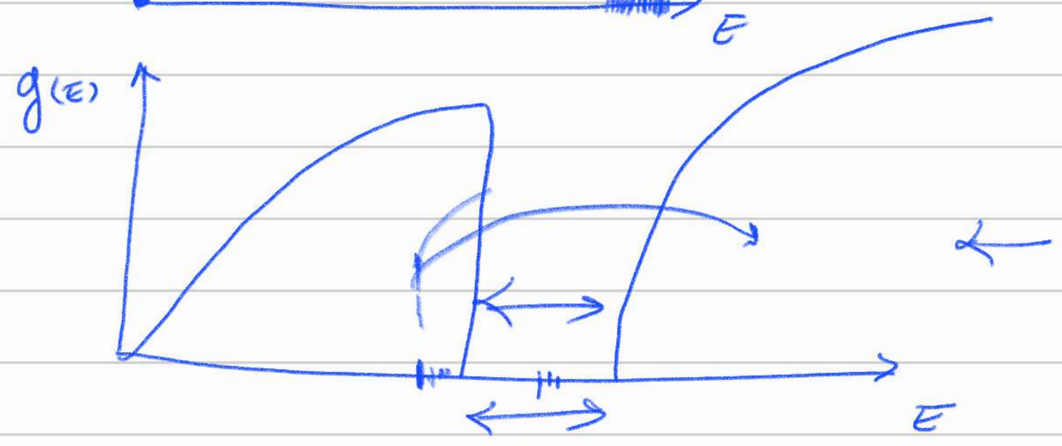


محور ترازهای انرژی $g(E)$



$\boxed{\alpha = ?}$

با شکل هامیلتونی



نیمه رسانا

Energy Gap

یکی از اهداف مهم فیزیک ماده چگال محاسبه $g(E)$ (Band structure)

Canonical Ensemble

$$\frac{V^N}{h^{3N}}$$

$$Z(T,V,N) = \int d\Gamma \, e^{-\beta \mathcal{H}(q,p)}$$

$$= Z(\beta) = \int dE \, g_{N,V}(E) \, e^{-\beta E_{N,V}}$$

با توجه به مفهوم $g(E)$ نوشتیم

$$\boxed{d\Gamma = dE \, g(E)}$$

$$\boxed{\frac{d\Gamma}{dE} = g(E)}$$

DOS که تعریف دیگر

V, N فرض کردیم که نقش وابستگی که به هم داشتند

$$\boxed{Z(\beta) = \int dE \, g(E) \, e^{-\beta E}}$$

این عبارت مانند یک تبدیل لاپلاس

Recall That

$$F(t) \xrightarrow{\hat{\mathcal{L}}} f(s)$$

$$f(s) = \hat{\mathcal{L}}\{F(t)\} = \lim_{a \to \infty} \int_0^a dt \, F(t) \, e^{-st}$$

$$Z(\beta) = \int_0^\infty dE \, g(E) \, e^{-\beta E}$$

$$\boxed{g(E) = \hat{\mathcal{L}}^{-1}\{Z(\beta)\}}$$

$$\boxed{Z = \mathcal{L}\{g(E)\}}$$

Z = ✓ ⟶ کل خواص ترمودینامیکی محاسبه می‌شود

$$g(E) = \mathcal{L}^{-1}\{Z(\beta)\} = \frac{1}{2\pi i}\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta\, e^{+\beta E} Z(\beta)$$

توقف انتگرال بر روی کمیت موهومی

$$\boxed{\beta' = \frac{1}{K_B T}}$$

$$\beta = \beta' + i\beta''$$

بخش حقیقی β را نشان می‌دهد ($\frac{1}{K_B T}$)

بخش موهومی ⟶ نمی‌دانیم

در نتیجه محاسبات در بازه‌ای β'' وجود ندارد.

$\beta'' \in (-\infty, +\infty)$

Ex1

الف: در گاز ایده‌آل با توجه به Z چگالی حالات انرژی را محاسبه کنید.

ب: با توجه به نتایج بخش الف $g(E) = $ ✓ ⟶ مجدداً Z را حساب کنید

$$Z = \int dE\, g(E)\, e^{-\beta E}$$

نشان دهید که با آنچه قبلاً برای گاز ایده‌آل آن را در نظر گرفتیم

N-Body , D-Dimension

همخوانی دارد.

Solution

$$g(E) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \, e^{\beta E} Z$$

$$\boxed{d\beta = d\beta' + i\, d\beta''}$$

$$\boxed{Z(T,V,N) = \frac{V^N}{\lambda^{3N}}}$$

قبلاً داشتیم:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \, e^{\beta E} \frac{V^N\left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}N}}{\beta^{\frac{3N}{2}}}$$

$$= V^N\left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \frac{1}{2\pi i}\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \, \frac{e^{\beta E}}{\beta^{\frac{3N}{2}}}$$

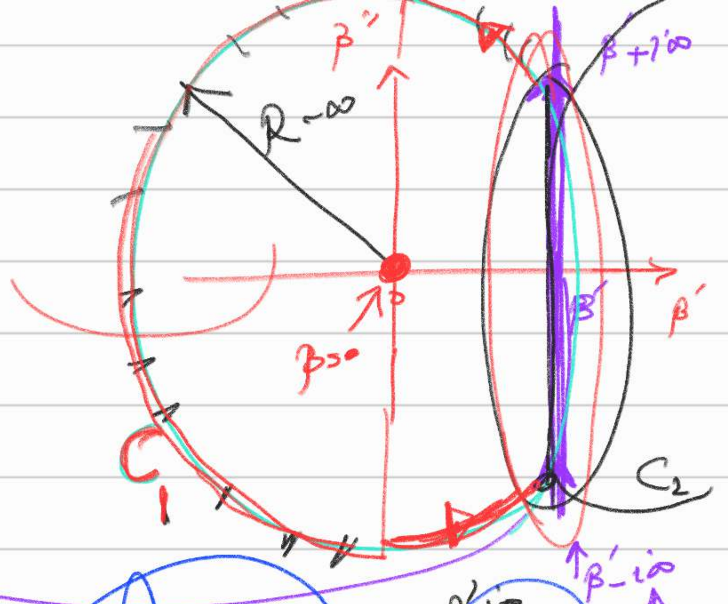
$$\boxed{\frac{3N}{2} = K}$$

$$g(E) = V^N\left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}N} \frac{1}{2\pi i} \underbrace{\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \, \frac{e^{\beta E}}{\beta^{K}}}_{\text{محاسبه انتگرال}}$$

$\beta = \beta' + i\beta''$

حساب: مانده‌ها

$$\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \, \frac{e^{\beta E}}{\beta^K} = ?$$



آرزو داشتیم

$$2\pi i\, b_{-1}(\beta=0) = \underbrace{\oint_C d\beta \, \frac{e^{\beta E}}{\beta^K}}_{A_1} = \underbrace{\int_{C(\infty)} d\beta \, \frac{e^{\beta E}}{\beta^K}}_{A_2} + \int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \, \frac{e^{\beta E}}{\beta^K}$$

$\beta E > 0$

پربند Contour

محیط انتخاب نمودیم

آرزو داشتیم

تکه اول

تکه دوم

اما ما این تکه ها را که می خواهیم

$2\pi i\, b_{-1}(\beta=0)$

$$\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \, \frac{e^{\beta E}}{\beta^K} = \overset{?}{A_1} - \overset{?}{A_2}$$

$\circ$

نیاز که نمی توانستیم با یک روش غیر مستقیم محاسبه

(Calculus of Residue) آنتگرال را بیابیم

حساب مانده

از حساب مانده ها داریم

$$b_{-1}(\beta=0) = \frac{1}{(K-1)!}\left(\frac{d}{d\beta}\right)^{K-1}\left[\beta^K \frac{e^{\beta E}}{\beta^K}\right]$$

$$\boxed{b_{-1}(\beta=0) = \frac{E^{K-1}}{(K-1)!}}$$

$$\boxed{\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta\, \frac{e^{\beta E}}{\beta^{K}} = A_1 - \cancel{A_2} = 2\pi i \left(\frac{E^{K}}{(K-1)!} \right)}$$

$A_2 \to 0$

$$g(E) = V^N \left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \frac{1}{\cancel{2\pi i}} \left[\cancel{2\pi i} \left(\frac{E^{K-1}}{(K-1)!} \right) \right]$$

$$\boxed{K = \frac{3N}{2}}$$

$$\boxed{g(E) = V^N \left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \frac{E^{\frac{3N}{2}-1}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}\right)}}$$

$$\boxed{g(E) \sim E^{\frac{3N}{2}-1}}$$

گاز ایده‌آل سیستم N ذره‌ای

$$\boxed{\mathcal{H} = \sum \frac{p^2}{2m}}$$

در 3D - !

[illegible]

یادآوری

$$\sum = \frac{V^N}{h^{3N}} \frac{\pi^{\frac{3N}{2}}}{\frac{3N}{2}\Gamma\left(\frac{3N}{2}\right)} (2mE)^{\frac{3N}{2}}$$

$$\Delta E\, g(E) = \frac{\partial \sum}{\partial E} \Delta E$$

ب

$g(E) = \checkmark \longrightarrow Z = ?$

$$Z = \int_0^{+\infty} dE\, g(E)\, e^{-\beta E} = \frac{V^N}{\lambda^{3N}} = \left(\frac{V}{\lambda^3}\right)^N$$

$$Z(T,V,N) = [\underbrace{Z(T,V,1)}]^N$$

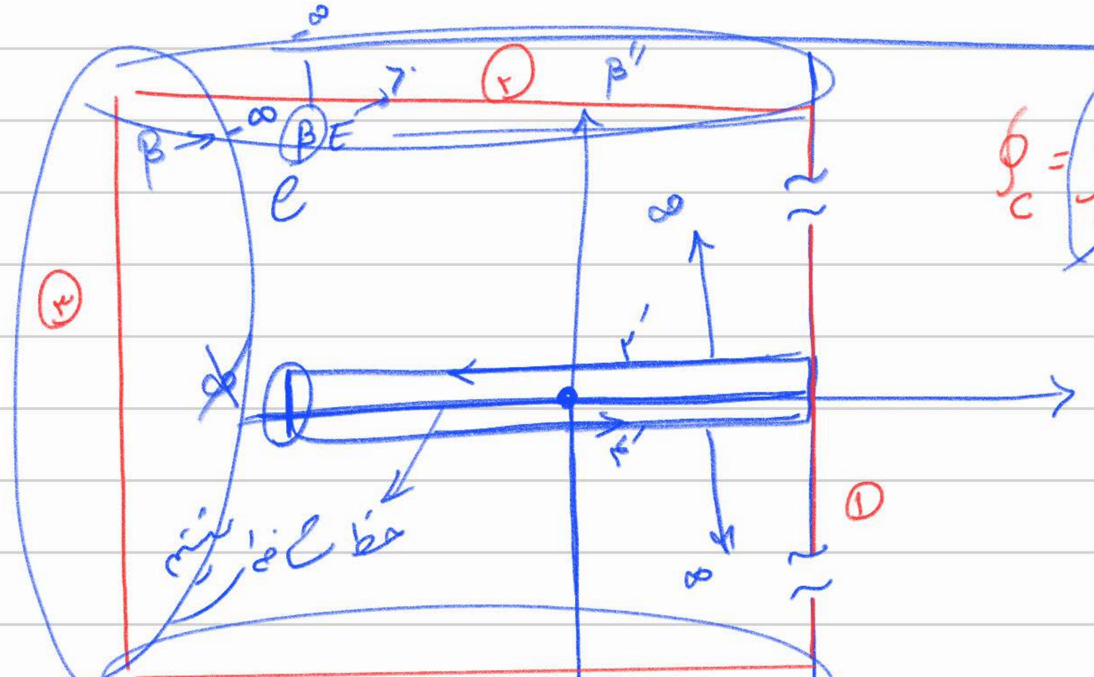
اندرکنش نداشتیم

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_i$$

$$H_i = \frac{(\vec{p}_i)^2}{2m} \quad , \quad \cancel{p_i p_j} \quad , \quad \cancel{q_i q_j} \quad \dots$$

مطابق کتاب آماری سِتنا فصل ۲

$$H = H_{Kinetic} + H_{Interact}$$



$$\oint_C = \int_1 + \cancel{\int_2} + \cancel{\int_3} + \cancel{\int_4}$$

$$\frac{e^{\beta E}}{\beta^K}$$

بدون اینکه دغدغه‌ی زوج یا فرد بودن K را داشته باشیم

$$K = \frac{3N}{2}$$

fluctuation in Canonical Ensemble.

$$\sigma_E^2 \equiv \left\langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle)^2 \right\rangle = \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2$$

$$= -\frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta}\left[-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \right]$$

$$= k_B T^2 C_v \sim \mathcal{O}(N)$$

$$\lim_{N \to \infty} \frac{\sigma_E}{\langle \mathcal{H} \rangle} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \to 0$$

$$\underbrace{P(E)\,dE}_{\text{احتمال پیدا شدن سیستم در انرژی}} = \underbrace{\overbrace{g(E)\,dE}^{d\Gamma} \frac{e^{-\beta E}}{Z}} = \underbrace{d\Gamma\, \rho}$$

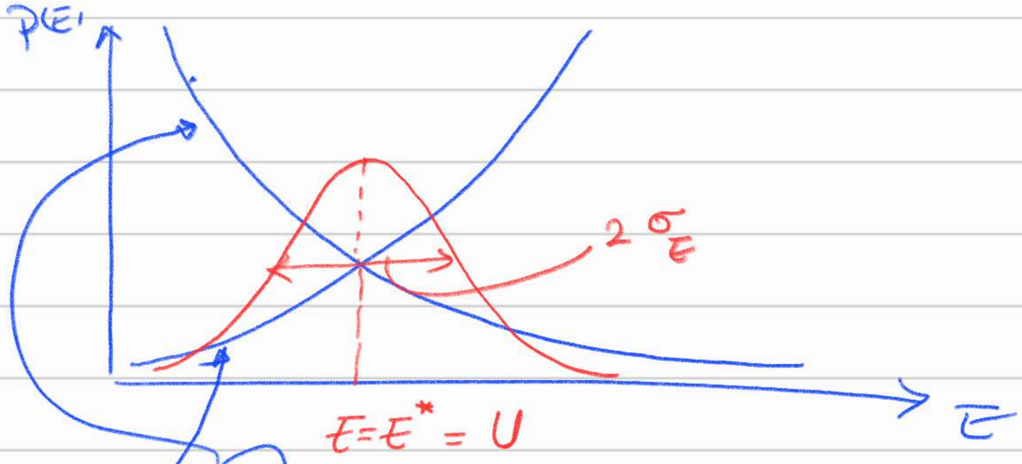
قبلاً این نمایش را دیده بودیم

اکسترمم

اگر سیستم در حالت تعادل ترمودینامیکی باشد

U

$$P(E) = \underbrace{\frac{e^{-\beta(\langle \mathcal{H} \rangle - TS)}}{Z}}_{\text{دامنه}} \underbrace{e^{-\frac{(E - \langle \mathcal{H} \rangle)^2}{2 k_B T^2 C_v}}}$$



$$P(E)\,dE = g(E)\,\frac{e^{-\beta E}}{Z}\,dE$$

$$\boxed{\langle \mathcal{H} \rangle = U \pm \sigma_E = U \pm \sqrt{K_B T^2 C_V} = \underbrace{O(N) + O(\sqrt{N})}}$$

? ? ?

$$\boxed{\langle \mathcal{H} \rangle = U \pm \bar{\sigma}_E = U \pm \frac{\sigma_E}{\sqrt{N}} = O(N) \pm \cancel{O(1)}}$$

مقدار میانگین

تابع توزیع دوجمله‌ای

$\bar{\sigma}_E^2 =$ Mean standard Deviation

$$\boxed{\bar{\sigma}_E^2 = \frac{\sigma_E^2}{N}}$$

انحراف معیار در مقدار میانگین

انحراف معیار

Virial Theorem and Its Consequences