Microcanonical A23 (HW 2009 2.4)

a) $$\Sigma = \int_{H(p_i,q_i)\le E} d^{3N}p_i\, d^{3N}q_i = \int d^{3N}p_i\, d^{3N}q_i\, \Theta(E-\mathcal{H})$$

נפריד דרגת חופש אחת $\{q_i, p_i\}$ ונבצע עליה rescale:

$$\Sigma(\lambda) = \int \Theta(E-\mathcal{H}(\lambda))\, d^{3N-3}p\, d^{3N-3}q\, d^3p_i\, d^3q_i$$

$$= \int \Theta(E-\mathcal{H}_{i\neq j} - \mathcal{H}_i(\lambda))\, d^{3N-3}p\, d^{3N-3}q\, d^3p_i\, d^3q_i$$

$$\tilde{q}_i = \lambda q_i \quad \tilde{p}_i = \frac{p_i}{\lambda}$$ נסמן

$$dp_i\, dq_i = d\tilde{q}_i\, d\tilde{p}_i$$

$$\mathcal{H}_i(p_i, q_i, \lambda) = \mathcal{H}_i(\tilde{p}_i, \tilde{q}_i)$$ וכן

$$= \Sigma$$

ע"י החלפת המשתנים ב- $\mathcal{H}_\lambda$ ומשתנה האינטגרציה.

b) $$\frac{1}{w}\frac{\partial \Sigma}{\partial \lambda} = 0$$

סה"כ מספר המצבים האפשריים של המערכת

נסמן $\left(d^{3N-3}p\, d^{3N-3}q\, d^3p_i\, d^3q_i\right)$ "$\mathcal{D}\Omega$"

$$= \frac{1}{w}\frac{\partial}{\partial \lambda}\int \Theta(E-\mathcal{H})\, \mathcal{D}\Omega$$

$$= \frac{1}{w}\int \mathcal{D}\Omega \cdot \delta(E-\mathcal{H}) \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} = \frac{1}{w}\int \mathcal{D}\Omega\, \delta(E-\mathcal{H})\frac{\partial \mathcal{H}_i}{\partial \lambda}$$

זהו ממוצע מיקרוקנוני: סופרים את כל המצבים עם $\mathcal{H}=E$ וכל אחד "מושקל" $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda}$

$$= \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_i}{\partial \lambda} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda}\left(\frac{p_i^2}{2m\lambda^2} + V(\lambda q_i)\right) \right\rangle \Bigg|_{\lambda=1} = 0$$

$$= \left\langle \frac{-p_i^2}{m} + \frac{\partial V}{\partial q_i} q_i \right\rangle = 0$$

$$\rightarrow \boxed{\left\langle \frac{\partial V}{\partial q_i} q_i \right\rangle = \left\langle \frac{p_i^2}{m} \right\rangle}$$

c) Classically, we choose $x_i = p_i = x_j$ so that $\langle x_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \rangle$ becomes

$$\langle p_i \cdot \frac{p_i}{m} \rangle = k_B T$$

if we choose $x_i = q_i = x_j$ we have

$$\langle q_i \cdot \frac{\partial V}{\partial q_i} \rangle = k_B T = \langle \frac{p_i^2}{m} \rangle$$

מ.ש.ל

d) Now, we have

$$\mathcal{H}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \lambda q_i}, \lambda q_i\right)\psi_n(q_i) = E_n \psi_n(q_i)$$

(נתעלם ממשתנה העישנים $i \neq j$)

ונגדיר $\tilde{q}_i = \lambda q_i$, $\tilde{p}_i = \frac{p_i}{\lambda}$ לקבל

$$\mathcal{H}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \tilde{q}_i}, \tilde{q}_i\right)\psi_n\left(\frac{\tilde{q}_i}{\lambda}\right) = E_n \psi_n\left(\frac{\tilde{q}_i}{\lambda}\right)$$

או אותם ערכים עצמיים משמע שאין יותר תלות ב-λ:

מה מספר המצבים בעלי אנרגיה $\leq E$? נעזר על המרכוז
היות שלנו מצב ונספור אותם

$$\Sigma = \sum_n \Theta(\langle n_\lambda | \mathcal{H} | n_\lambda \rangle - E) = \sum_n \Theta(E_n - E)$$

ובצורה דומה, לפי משפט Feynman-Hellman

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial \lambda} = 0 = \sum_n \left[\delta(E - \langle n_\lambda | \mathcal{H} | n_\lambda \rangle) \langle n_\lambda | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} | n_\lambda \rangle\right]$$
$(*)$
$$= \langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} \rangle_{MCE}$$

ולכן מקבל כמו סעיף (b) ע"י גזירה מפורשת של $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda}$.

(*) באופן כללי, אם $|n\rangle = |n(\lambda)\rangle$ אז

$$\frac{\partial}{\partial \lambda}\langle n | \mathcal{H} | n \rangle = \langle n | \mathcal{H}\left(\frac{\partial}{\partial \lambda}|n\rangle\right) + \frac{\partial \langle n|}{\partial \lambda}\mathcal{H}|n\rangle + \langle n | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} | n \rangle$$
$$= E_n \frac{\partial}{\partial \lambda}\langle n | n \rangle + \langle n | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} | n \rangle = \langle n | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} | n \rangle$$

"Feynman Hellman theorem"