A23 | HW 2008 (3.4) | A23 | (canonical)

א

$$Z[\mathcal{H}_\lambda] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \int d^{3N-3}p_j \, d^{3N-3}q_j \, d^3(\lambda q_i) \, d^3\left(\frac{p_i}{\lambda}\right) \times e^{-\beta \mathcal{H}(p_j, q_j; \frac{p_i}{\lambda}, \lambda q_i)}$$

ע"י החלפת משתנים

$$q_i' = \lambda q_i$$
$$p_i' = \frac{p_i}{\lambda}$$

(טרנספורמציה קנונית

$$\left([q_i', p_i'] = [q_i, p_i]\right.$$

נקבל $Z[\mathcal{H}_\lambda]$

ב מפורשות

$$Z[\mathcal{H}_\lambda] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \int d^{3N}q_i \, d^{3N}p_i \times \exp\left[-\beta \sum_{j\neq 1} \frac{p_j^2}{2m} + \frac{p_1^2}{2m\lambda^2} + V(q_{j\neq 1}, \lambda q_1)\right]$$

נשים לב שלפי סעיף א

$$Z_\lambda = Z$$

או

$$\frac{\partial Z}{\partial \lambda} = 0$$

בפרט

$$\left.\frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=1} = 0$$

לכן

$$\left.\frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=1} = 0 = \frac{1}{Z} \cdot \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3N} \int d^{3N}q_i \, d^{3N}p_i \left[\frac{-p_1^2}{m} + \frac{\partial V}{\partial \bar{q}_1} \cdot \bar{q}_1\right]$$

אזי קיבלנו בדיוק

$$\left\langle \frac{p_1^2}{m} - \frac{\partial V}{\partial \bar{q}_1} \bar{q}_1 \right\rangle = 0$$

או

$$\left\langle \frac{p_1^2}{m} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V}{\partial \bar{q}_1} \bar{q}_1 \right\rangle$$

6

עבור $X_i = p_1$

$$\langle p_1 \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_1} \rangle = \langle \frac{p_1^2}{m} \rangle = kT$$

עבור $X_i = q_1$

$$\langle q_1 \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_1} \rangle = \langle q_1 \frac{\partial V}{\partial q_1} \rangle = kT$$

לכן $$\langle \frac{p_1^2}{m} \rangle = \langle q_1 \frac{\partial V}{\partial q_1} \rangle \left(= kT \right)$$

לדוגמא שבה חלוקה שווה קלאסית נכשלת:

פרמיונים בטמפרטורה אפס $\langle p^2 \rangle \neq 0$

ב) נכתוב רשתי דרכים - דבק שלי "דומיננית" ודרך של גרינ

I) נבחר שקוונטיות כמו לעיל $\hat{q} \to \lambda \hat{q}$, $\hat{p} \to \frac{\hat{p}}{\lambda}$

עלינו להפעיל את האופרטור של הדילטציות $\hat{G} = \frac{\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}}{2}$, $S = e^{i \ln\lambda \hat{G}}$

כלומר

$$\mathcal{H}_\lambda(\lambda\hat{q}, \frac{\hat{p}}{\lambda}) = S_\lambda \mathcal{H} S_\lambda^{-1}$$

כמו כן, פונק' החלוקה הקוונטית

$$Z = tr[e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}]$$

$$Z_\lambda = tr[e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_\lambda}] = tr[e^{-\beta\hat{S}_\lambda\hat{\mathcal{H}}\hat{S}_\lambda^{-1}}]$$

$$= tr\left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta\hat{S}_\lambda\hat{\mathcal{H}}\hat{S}_\lambda^{-1})^n}{n!}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{tr[(-\beta\hat{S}_\lambda\hat{\mathcal{H}}\hat{S}_\lambda^{-1})^n]}{n!}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n \cdot tr[(\hat{S}\mathcal{H}S^{-1})^n]}{n!} \overset{\text{לפי}}{=} \overbrace{\sum_n \frac{(-\beta)^n tr[\hat{S}\hat{\mathcal{H}}^n\hat{S}^{-1}]}{n!}}^{\text{לינאריות}} \xrightarrow{\text{ציקליות}} \sum_n \frac{tr[(-\beta\hat{\mathcal{H}})^n]}{n!}$$

$$\left[S\mathcal{H}S^{-1}S\mathcal{H}S^{-1} = S\mathcal{H}^2S^{-1} \right]$$

$$= tr[e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}]$$

והתגרה נקבל

(II) וריאל דרך סימטריה:

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

(נתעלם משאר המשתנים $j\neq i$)

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

אותם ערכים עצמיים E_n עבור $\lambda=1$ גם

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = Z_\lambda$$

ובצורה דומה למקודם, עבור $Z_\lambda = Z$

$$\left.\frac{\partial \ln Z}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=1} = 0 = \frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\lambda}e^{-\beta\mathcal{H}_\lambda}\Big|_{\lambda=1} = -\beta\left\langle\left.\frac{\partial\mathcal{H}_\lambda}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=1}\right\rangle$$

$$0 = -\beta\left\langle\left.\frac{\partial}{\partial\lambda}\left(\frac{p_1}{2m\lambda^2} + V(\lambda q_1)\right)\right|_{\lambda=1}\right\rangle$$

עד λ^2 מסדר ב:

כמו מקודם...

$$0 = \left\langle\left.\frac{\partial\mathcal{H}_\lambda}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=1}\right\rangle = \left\langle\left.\frac{\partial}{\partial\lambda}\left(S_\lambda\mathcal{H}S_\lambda^{-1}\right)\right|_{\lambda=1}\right\rangle$$

אפשר גם:

$$\left(S_\lambda\big|_{\lambda=1} = 1;\ \frac{\partial S_\lambda}{\partial\lambda} = \frac{i\hat{G}}{\lambda}S_\lambda\right), \quad \hat{G} = \frac{\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}}{2} \quad S_\lambda = e^{+i\ln\lambda\hat{G}}$$

עבור

$$0 = \left\langle\left.\left(\frac{i\hat{G}}{\lambda}S_\lambda\hat{\mathcal{H}}S_\lambda^{-1} - iS_\lambda\hat{\mathcal{H}}\frac{\hat{G}}{\lambda}S_\lambda^{-1}\right)\right|_{\lambda=1}\right\rangle = i\left\langle\hat{G}\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{G}\right\rangle = i\left\langle[G,\mathcal{H}]\right\rangle$$

$$0 = \frac{d\langle\hat{G}\rangle}{dt} = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\left(\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q}\right) = \frac{1}{2}\left(\underset{\frac{p}{m}}{\dot{q}}p + p\dot{q} + q\underset{-\frac{\partial V}{\partial q}}{\dot{p}} + p\dot{q}\right)$$

$$0 = \left(\left\langle\frac{p^2}{m}\right\rangle - \left\langle q\frac{\partial V}{\partial q}\right\rangle\right) = \cdots$$