Zad. 2 (ćwiczenia 4)

niedziela, 11 grudnia 2016 14:41

1. Wyznaczyć macierz gęstości liniowego oscylatora harmonicznego w kontakcie z termostatem o temperaturze T. (Feynman, Statistical Mechanics, A Set of Lectures, rozd. 2)

   Wsk.: Przyjąć hamiltonian oscylatora:

   $$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

   i wykazać, że nieunormowana macierz gęstości $\rho_U(x, x', \beta) = e^{-\beta H}$ spełnia równania ($\beta = 1/k_B T$, k_B stała Boltzmanna):

   $$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial\beta}\rho_U(x, x', \beta) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\rho_U(x, x', \beta) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{m\omega^2 x'^2}{2}\right)\rho_U(x, x', \beta), \end{aligned}$$

   z warunkiem początkowym $\rho_U(x, x', \beta = 0) = \delta(x - x')$. Rozwiązania tych równań szukać w postaci funkcji Gaussa:

   $$\rho_U(x, x', \beta) = \exp\left[-(A(\beta)x^2 + B(\beta)x + C(\beta))\right].$$

2. Korzystając z wyników poprzedniego zadania podać przybliżoną postać macierzy gęstości oscylatora harmonicznego gdy $\hbar\omega\beta \to 0$ (granica wysokich temperatur).

Najpierw przyjrzyjmy się przypadkowi cząstki swobodnej:

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

zatem

$$-\partial_\beta \rho(x, x'; \beta) = -\frac{\hbar^2}{2m}\, \rho(x, x'; \beta)$$

powyższe równanie ma strukturę odpowiadającą II prawu Ficka, tj. $\frac{\partial\phi}{\partial t} = D\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}$, którego rozwiązaniem jest funkcja Gaussa:

$$\rho(x,x';\beta) = \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2\pi\beta}}\ \exp\left(-\frac{m}{2\hbar^2\beta}(x-x')^2\right)$$

Chcemy, aby w granicy wysokich temperatur rozwiązanie dla oscylatora harmonicznego pryjmowało postał rozwiązania swobodnego

$$H = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 x^2/2$$

$$-\frac{\partial\rho}{\partial\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\rho$$

wprowadzamy oznaczenie:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x \quad , \quad f = \frac{\hbar\omega}{2}\beta$$

$$-\frac{\partial\rho}{\partial f} = -\frac{\partial^2\rho}{\partial\xi^2} + \xi^2\rho$$

Postulujemy rozwiązanie w postaci:

$$\rho = \exp\left[-\left(a(f)\xi^2 + b(f)\xi + c(f)\right)\right]$$

Z warunkiem początkowym: $\rho = \delta(x-x')$ dla $f=0$

Wstawiając postulowaną postać rozwiązania do równania otrzymujemy:

$$a'\xi^2 + b'\xi + c' = (1-4a^2)\xi^2 - 4ab\xi + (2a-b^2)$$

czyli

$$\begin{cases} a' = 1-4a^2 & (1^\circ) \end{cases}$$

$$\begin{cases} b' = -4ab & (2^\circ) \\ c' = 2a - b^2 & (3^\circ) \end{cases}$$

(1°)

$$f - f_0 = \int \frac{da}{1-4a^2} = \frac{1}{2}\operatorname{arctg}(2a)$$

$$\Rightarrow a = \frac{1}{2}\operatorname{ctgh}\left[2(f-f_0)\right]$$

ponadto chcemy, aby odtworzone było zachowanie swobodne w wys. temp., więc $f_0 = 0$

(2°)

$$\ln\left(\frac{b}{A}\right) = \int \frac{db}{b} = -2\int \operatorname{ctgh}(2f)\,df = -\log(\sinh(2f))$$

$$\Rightarrow \quad b = \frac{A}{\sinh(2f)}$$

(3°)

$$c = \int \operatorname{ctgh}(2f)\,df - \int \frac{A^2 df}{\sinh(2f)} = \frac{1}{2}\ln(\sinh(2f)) +$$

$$- \frac{A^2}{2}\operatorname{ctgh}(2f) - \ln(B)$$

zatem

$$\rho = \frac{B}{\sqrt{\sinh(2f)}} \exp\left[-\left(\frac{\xi^2}{2}\operatorname{ctgh}(2f) + \frac{A\xi}{\sinh(2f)} + \frac{A^2}{2}\operatorname{ctgh}(2f)\right)\right]$$

w granicy $f \to 0$, mamy:

$$\rho = \frac{B}{\sqrt{2f}} \exp\left(-\frac{\xi^2 + 2A\xi + A^2}{4f}\right)$$

$\operatorname{ctgh}(2f) \approx \frac{1}{2f} + \ldots;\ \sinh(2f) \approx 2f + \ldots$

Aby uzyskane rozwiązanie było zgodne z rozwiązaniem dla cząstki swobodnej mamy:

$$A = -\xi' \quad , \quad B = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar}}$$

zatem

$$\rho(x, x'; \beta) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(2f)}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar \sinh(2f)}\left(\cosh(2f)\left(x^2 + x'^2\right) - 2xx'\right)\right)$$