


## Wykład 10

---

- ) podstawy  
kwant. mek. stat.
- 
- 
- 

# Część III: Kwantowa mechanika statystyczna

## 10. Podstawy kwantowej mechaniki statystycznej

### 10.1 Kwantowe mikrostan

Wzrost kwantowy:  $(\mathcal{H}, \mathcal{H})$

$\mathcal{H}$  - przestrzeń Hilberta (2 iloczyn-śledzący)

$$\varphi, \psi \in \mathcal{H} \quad \langle \varphi, \psi \rangle \in \mathbb{C}$$

$$\langle \varphi, \lambda \psi \rangle = \lambda \langle \varphi, \psi \rangle, \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

$\mathcal{H}$  - Hamiltonian, samosprężony operator na  $\mathcal{H}$ .

Mikrostan kwantowy: znormalizowany wektor

w przestrzeni Hilberta:  $\varphi \in \mathcal{H}, \|\varphi\| = 1$

$$\|\varphi\| = \langle \varphi, \varphi \rangle^{1/2}$$

### Uwaga:

↳ mechanice statystycznej mamy do czynienia z wektorami wielo cząstkowymi?

⇒ funkcje falowe zależą od położenia wszystkich cząstek.

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \dots \otimes L^2(\mathbb{R}^3) \simeq L^2(\mathbb{R}^{3N})$$

$$\psi = \psi(x_1, \dots, x_N) \quad x_i \in \mathbb{R}^3$$

$$\|\psi\|^2 = \int \dots \int |\psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \dots dx_N.$$

## Observable

Wielkości mierzalne opisywane są observable  $\hat{O}$ , czyli samosprężone operatory na  $\mathcal{H}$ .

Konkretny wynik eksperymentu, to zmierzona wartość o wartości oczekiwanej w stanie  $\psi$  danej post.

$$\langle \hat{O} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{O} \psi \rangle$$

## Pmyślaj

operator energii kinetycznej  $(-\Delta)$

Widocznym:  $\sum_{i=1}^N \epsilon(\Delta)_i$ , gdzie

$$\epsilon(\Delta)_i = 1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes \epsilon(\Delta_{x_i}) \otimes 1 \dots \otimes 1$$

↑  
i-te miejsce

Laplasjan w zmiennej  $x_i$

## Ewolucja czasowa

$$i \partial_t \psi(t) = \hat{H} \psi(t)$$

→ Hamiltonian  
równanie Schrödingera

$$\psi(t) = \mathcal{U}(t, t_0) \psi(t_0)$$

↑  
operator ewolucji  $\mathcal{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}}$

## 10.2. Kwantowe mikrostan

Mikrostan - opisany przez parametry termodynamiczne.  
Zespół mikrostanów odpowiadający danemu  
makrostanowi.

Gdy nie wiemy w jakim dokładnie mikrostanie  
jest nasz układ kwantowy, to powiemy, że  
jest w stanie mieszanym.

Klasyczne mielibyśmy dla obserwacji  $O$ :

$$\langle O \rangle = \int \delta p \delta q \mathcal{O}(p, q) g(p, q, t) = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \mathcal{O}(p_{\alpha}(t))$$

wartość obserwacji  
w danym mikrostanie

$$g(p, q, t) = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \prod_i \delta(q_i - q_{i, \alpha}) \delta(p - p_{i, \alpha})$$

↑  
gęstość na  $p$ -ni fazowej.

### Kwantowo

$$\langle O \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \mathcal{O}(\varphi_{\alpha}) = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \varphi_{\alpha} | O | \varphi_{\alpha} \rangle$$

Niech  $\varphi_n$  - baza  $p$ -ni Hilberta

$$\sum_n \langle \varphi_n | \langle \varphi_n | = \mathbb{1}$$

$$| \varphi_n \rangle \equiv | n \rangle$$

$$\langle 0 \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \sum_{n, m} \langle \psi_{\alpha} | n \rangle \langle n | 0 \rangle \langle m | \psi_{\alpha} \rangle$$

Definiujemy macierz gęstości  $\rho$

$$\rho = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}|$$

Wtedy

$$\langle 0 \rangle = \sum_{m, n} \langle n | 0 \rangle \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle m | \psi_{\alpha} \rangle \langle \psi_{\alpha} | n \rangle$$

$$= \sum_{m, n} \langle n | 0 \rangle \langle m | \rho | n \rangle$$

$$= \sum_n \langle n | 0 \rho | n \rangle = \text{Tr}(\rho \langle 0 |)$$

$\text{Tr}$  - ślad  $\text{Tr} A := \sum_n \langle n | A | n \rangle$

Fakt  $\text{Tr} \rho = 1$  (c.w.)

Uwaga stan czysty to szczególny przypadek stanu mieszanego o gęstości

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$$

Is that true:

$$\begin{aligned} \langle 0 \rangle_{\psi} &= \text{Tr}(\rho \langle 0 |) = \text{Tr}(|\psi\rangle \langle \psi| \langle 0 |) = \sum_n \langle n | 0 \rangle \langle \psi | n \rangle \\ &= \langle \psi | 0 \rangle = \langle \psi | \langle 0 | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | 0 \rangle \langle n | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle = \langle \psi | 0 \rangle \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | 0 \rangle \end{aligned}$$

## 12.3 Kwantowe zespół statystyczne

Równanie Liouville'a - van Neumanna:

$$i\partial_t \rho = [\mathcal{H}, \rho]$$

↑ ewolucja macicy gęstości

(porównaj z równaniem Liouville'a dla  $\rho(\text{spit})$ )

Wniosek:  $\rho = \rho(\mathcal{H})$  w stanie stacionarnym.

Dalej rozumowanie analogiczne jak klasyczne.

•) zespół mikrokanoniczny

$$\rho(E) = \frac{\delta(\mathcal{H}-E)}{\Omega(E)}, \quad \Omega(E) = \sum_n \delta(E-E_n)$$

↑  
stany energetyczne

•) zespół kanoniczny

$$\rho(\mathcal{H}) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z}, \quad Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

↑  
suma statystyczna  
kwantowa

•) wielki zespół kanoniczny

$$\rho(\mu, \beta) = \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}-\mu N)}}{\Omega}, \quad \Omega = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} z_N(\beta)$$