Παράδειγματα ασκήσεων στο Μεγαλοκανονικό Σύνολο
(Στατιστική Φυσική ΣΕΜΦΕ, Αναπλ. Καθ. Γ. Βαρελογιάννης)

ΑΣΚΗΣΗ 1.

Κβαντική παγίδα *είναι σε επαφή με δοχείο θερμότητας θερμοκρασίας T και με δοχείο σωματιδίων χημικού δυναμικού μ. Η παγίδα μπορεί να παγιδεύσει είτε ένα ηλεκτρόνιο με σπίν ↑ στην κατάσταση* $|\uparrow\rangle$ *με ενέργεια* $E_\uparrow = E_o$*, είτε ένα ηλεκτρόνιο με σπίν ↓ στην κατάσταση* $|\downarrow\rangle$ *και ενέργεια* $E_\downarrow = E_o$ *είτε δύο ηλεκτρόνια στην κατάσταση* $|\uparrow\downarrow\rangle$ *και ενέργεια* $E_{\uparrow\downarrow} = 2E_o + g$ *(όπου g κάποια θετική ενέργεια αλληλεπίδρασης των δύο ηλεκτρονίων και μια ενέργεια παγίδευσης αρνητική). Η παγίδα μπρεί να μην παγιδεύσει κανένα ηλεκτρόνιο (η ενέργεια της καταστασης αυτής που μπορεί να συμβολίζεται* $|\varnothing\rangle$ *είναι μηδενική* $= 0$*).*

i) *Να βρεθεί ο τελεστής πυκνότητας και η συνάρτηση επιμερισμού.*

ii) *Να βρεθούν η εσωτερική ενέργεια και ο μέσος αριθμός των παγιδευμένων ηλεκτρονίων (από τον τελεστή πυκνότητας) για ένα σύστημα που αποτελείται από W διακριτές ανεξάρτητες παγίδες όπως οι παραπάνω*

iii) *Να βρεθεί για ποιό χημικό δυναμικό ο αριθμός των παγιδευμένων ηλεκτρονιών στις* W *παγίδες είναι επίσης* W*. Στην περίπτωση αυτή να βρεθεί ο μέσος αριθμός των παγίδων οι οποίες έχουν παγιδεύσει 2 ηλεκτρόνια, 1 ηλεκτρόνιο ή είναι κενές συναρτήσει των* W*,* g *και* T*.*

ΑΠΑΝΤΗΣΗ:

i)

Βρισκόμαστε στο μεγαλοκανονικό σύνολο. Μπορεί να ορισθεί για το χώρο καταστάσεων της κάθε παγίδας μια βάση που αποτελείται από τέσσερις καταστάσεις $\{|\varnothing\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ οι οποίες είναι **ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής $\widehat{H}_1$ αλλά και του τελεστή αριθμού σωματιδίων $\widehat{N}_1$**

Κατάσταση παγίδας	Ιδιοτιμές τελεστή αριθμού κατάληψης	Ιδιοτιμές τελεστή ενέργειας
$\lvert\varnothing\rangle$	$\widehat{N}\lvert\varnothing\rangle = 0\lvert\varnothing\rangle$	$\widehat{H}\lvert\varnothing\rangle = 0\lvert\varnothing\rangle$
$\lvert\uparrow\rangle$	$\widehat{N}\lvert\uparrow\rangle = 1\cdot\lvert\uparrow\rangle$	$\widehat{H}\lvert\uparrow\rangle = E_o\lvert\uparrow\rangle$
$\lvert\downarrow\rangle$	$\widehat{N}\lvert\downarrow\rangle = 1\cdot\lvert\downarrow\rangle$	$\widehat{H}\lvert\downarrow\rangle = E_o\lvert\downarrow\rangle$
$\lvert\uparrow\downarrow\rangle$	$\widehat{N}\lvert\uparrow\downarrow\rangle = 2\cdot\lvert\uparrow\downarrow\rangle$	$\widehat{H}\lvert\uparrow\downarrow\rangle = (2E_o + g)\lvert\uparrow\downarrow\rangle$

Ο τελεστής πυκνότητας **κάθε παγίδας** $\widehat{\rho}_1$ δίνεται από τη σχέση:

$$\widehat{\rho}_1 = \frac{1}{Z_1} e^{-\beta(\widehat{\mathrm{H}} - \mu\widehat{\mathrm{N}})}$$

οπότε στη βάση $\{|\varnothing\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ έχει τη μορφή πίνακα:

$$\widehat{\rho}_1 = \frac{1}{Z_1}\begin{pmatrix} e^{-\beta(0-0\mu)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-1\mu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-1\mu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)} \end{pmatrix}$$

Η συνάρτηση επιμερισμού **κάθε παγίδας** δίνεται από τη σχέση: $Z_1 = tr\left\{e^{-\beta\left(\widehat{H}_1 - \mu\widehat{N}_1\right)}\right\}$ και έχουμε :

$$Z_1 = 1 + 2e^{-\beta(\mathrm{E}_o - 1\mu)} + e^{-\beta(2\mathrm{E}_o + g - 2\mu)}$$

ii)

Η εσωτερική ενέργεια **κάθε παγίδας** προκύπτει από τη σχέση: $U_1 = \langle\widehat{H}\rangle = tr\{\widehat{\rho}\widehat{H}\}$ και δεδομένου ότι η χαμιλτονιανή είναι επίσης διαγώνια στη βάση $\{|\varnothing\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ το γινόμενο των πινάκων είναι διαγώνιος πίνακας με στοιχεία της διαγωνίου το γινόμενο των διαγώνιων στοιχείων

$$U_1 = tr\left\{\frac{1}{Z_1}\begin{pmatrix} e^{-\beta(0-0\mu)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-1\mu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-1\mu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_o & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_o & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2E_o + g \end{pmatrix}\right\}$$

προκύπτει εύκολα

$$U_1 = \frac{2E_o e^{-\beta(\mathrm{E}_o-1\mu)} + (2E_o + g)e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)}}{1 + 2e^{-\beta(\mathrm{E}_o-1\mu)} + e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)}}$$

μπορούν να ελαφρυνθούν οι συμβολισμοί ορίζοντας

$$x = e^{-\beta(\mathrm{E}_o - \mu)}$$

οπότε πιο πυκνά

$$Z_1 = 1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}$$

και

$$U_1 = \frac{2E_o x + (2E_o + g)x^2 e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}}$$

Για το μέσο αριθμό σωματιδίων **σε κάθε παγίδα** έχουμε με ανάλογο τρόπο

$$\langle\widehat{N}_1\rangle = tr\{\widehat{\rho}\widehat{N}_1\} = \frac{2x + 2x^2 e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}}$$

Οπότε **για W παγίδες** η ολική εσωτερική ενέργεια U και ο μέσος αριθμός των παγιδευμένων σωματιδίων $\langle\widehat{N}\rangle$ είναι (**να τεκμηριώσετε γιατί ισχύουν οι παρακάτω δύο σχέσεις !**)

$$U = W\frac{2E_o x + (2E_o + g)x^2 e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}}$$

$$\langle\widehat{N}\rangle = W\frac{2x + 2x^2 e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}}$$

iii)

Δίνονται οι απαντήσεις: Εξισώνουμε $\langle\widehat{N}\rangle = W$ και προκύπτει το χημικό δυναμικό.

$$\langle\widehat{N}\rangle = W\frac{2x + 2x^2 e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}} = W \Rightarrow \mu = E_o + \frac{g}{2}$$

Ο μέσος αριθμός παγίδων που έχουν παγιδεύσει 2 ηλεκτρόνια είναι ίσος με το μέσο αριθμό των κενών παγίδων και δίνονται από τη σχέση:

$$\frac{W}{2(1+e^{\beta g/2})}$$

Ο μέσος αριθμός αυτών αυτών που έχουν παγιδεύσει 1 ηλεκτρόνιο δίνεται από τη σχέση

$$\frac{2We^{\beta g/2}}{2(1+e^{\beta g/2})}$$

————————————————————————————————-

ΑΣΚΗΣΗ 2:

Εστω **ζεύγος** δύο παγίδων όπως αυτές που περιγράφονται στην ΑΣΚΗΣΗ 1. Στην **πρώτη** γίνεται μέτρηση του αριθμού των σωματιδίων και διαπιστώνεται ότι έχει παγιδεύσει **ένα ηλεκτρόνιο**.

i) *Βρείτε τον τελεστή πυκνότητας και τη συνάρτηση επιμερισμού του ζεύγους.*

ii) *Να βρεθεί η εντροπία και η εσωτερική ενέργεια του ζεύγους ξεκινώντας από τον συνολικό τελεστή πυκνότητας.*

ΑΠΑΝΤΗΣΗ:

i)

Ο χώρος καταστάσεων του ζεύγους $\mathcal{E}$ είναι το γινόμενο Kronecker των χώρων καταστάσεων της κάθε παγίδας

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

Αντίστοιχα ο τελεστής πυκνότητας του ζεύγους $\widehat{\rho}$ δίνεται από τη σχέση

$$\widehat{\rho} = \widehat{\rho}_1 \otimes \widehat{\rho}_2$$

και η συνάρτηση επιμερισμού του ζεύγους Z από τη σχέση

$$Z = Z_1 \times Z_2$$

(Τεκμηριώστε γιατί ισχύουν οι παραπάνω τρείς σχέσεις). Για την πρώτη παγίδα μετά τη μέτρηση η κατάστασή της είναι σύμφωνα με τα αξιώματα της κβαντομηχανικής η κανονικοποιημένη προβολή στον υποχώρο των καταστάσεων της παγίδας ο οποίος είναι συμβατός με τη μέτρηση. Οπότε η πρώτη παγίδα βρίσκεται μετά τη μέτρηση στην κατάσταση

$$|\phi\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

και ο αντίστοιχος τελεστής πυκνότητας είναι

$$\widehat{\rho}_1 = |\phi\rangle\langle\phi|$$

ο οποίος στη βάση $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ του χώρου $\mathcal{E}_1$ μετά τη μέτρηση γράφεται εύκολα σε μορφή πίνακα

$$\widehat{\rho}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

παρατηρείστε ότι δεν είναι διαγώνιος και βέβαια υπακούει τις σχέσεις $tr\{\widehat{\rho}_1\} = 1$ και $\widehat{\rho}_1^2 = \widehat{\rho}_1$ για καθαρή κατάσταση. Ο τελεστής πυκνότητας $\widehat{\rho}_2$ της δεύτερης παγίδας και η αντίστοιχη συνάρτηση επιμερισμού Z_2 έχουν ήδη υπολογισθεί στα πλαίσια της ΑΣΚΗΣΗΣ 1. Χρησιμοποιούμε τα αποτελέσματα και τους συμβολισμούς της άσκησης αυτής.

Στη **βάση** του **οκταδιάστατου** χώρου $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$

$$\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \otimes \{|\varnothing\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\} \equiv \{|\uparrow,\varnothing\rangle, |\uparrow,\uparrow\rangle, |\uparrow,\downarrow\rangle, |\uparrow,\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow,\varnothing\rangle, |\downarrow,\uparrow\rangle, |\downarrow,\downarrow\rangle, |\downarrow,\uparrow\downarrow\rangle\}$$

μπορούμε να γράψουμε εύκολα τον τελεστή πυκνότητας του ζεύγους σε μορφή πίνακα

$$\widehat{\rho} = \widehat{\rho}_1 \otimes \widehat{\rho}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{Z_1}\begin{pmatrix} e^{-\beta(0-\mu 0)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-1\mu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-1\mu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\rho} = \frac{1}{2Z_1}\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)} & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)} & 0 & 0 \\
0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)} & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)} & 0 \\
0 & 0 & 0 & e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)} & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)} \\
1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)} & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)} & 0 & 0 \\
0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)} & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)} & 0 \\
0 & 0 & 0 & e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)} & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(2\mathrm{E}_o+g-2\mu)}
\end{pmatrix}$$

ή ακόμη εισάγοντας όπως στην ΑΣΚΗΣΗ 1

$$x = e^{-\beta(\mathrm{E}_o-\mu)}$$

ο τελεστής πυκνότητας γράφεται σε πιο πυκνή μορφή

$$\widehat{\rho} = \frac{1}{2Z_1}\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & x & 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 \\
0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & x & 0 \\
0 & 0 & 0 & x^2e^{-\beta g} & 0 & 0 & 0 & x^2e^{-\beta g} \\
1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & x & 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 \\
0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 & x & 0 \\
0 & 0 & 0 & x^2e^{-\beta g} & 0 & 0 & 0 & x^2e^{-\beta g}
\end{pmatrix}$$

Επιβεβαιώνουμε εύκολα ότι ισχύει $tr\{\widehat{\rho}\} = 1$ με δεδομένο το Z_1 που υπολογίστηκε στην ΑΣΚΗΣΗ 1. Επιπλέον για τη συνάρτηση επιμερισμού έχουμε

$$Z = 1 \times Z_1 = Z_1 = 1 + 2x + 2x^2e^{-\beta g}$$

ii)

Για την εσωτερική ενέργεια του ζεύγους ξεκινώντας από το τελεστή πυκνότητας του ζεύγους

$$U = tr\{\widehat{\rho}\widehat{H}\}$$

έχουμε το $\widehat{\rho}$, αρκεί να ορίσουμε το $\widehat{H}$. Η χαμιλτονιανή της πρώτης παγίδας γράφεται εύκολα στη βάση $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ του χώρου $\mathcal{E}_1$:

$$\widehat{H}_1 = \begin{pmatrix} E_o & 0 \\ 0 & E_o \end{pmatrix}$$

Ενώ η χαμιλτονιανή της δεύτερης παγίδας $\widehat{H}_2$ στη βάση $\{|\varnothing\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ του χώρου $\mathcal{E}_2$ γράφεται:

$$\widehat{H}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_o & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_o & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2E_o + g \end{pmatrix}$$

Να σημειωθεί ότι η εσωτερική ενέργεια της πρώτης παγίδας είναι

$$U_1 = tr\{\widehat{\rho}_1\widehat{H}_1\} = \langle\phi|\widehat{H}_1|\phi\rangle = E_o$$

και δεδομένου ότι η εσωτερική ενέργεια είναι **προσθετική** ιδιότητα αρκεί στην U_1 να προσθέσουμε την εσωτερική ενέργεια της δεύτερης παγίδας που υπολογίστηκε ήδη στην ΑΣΚΗΣΗ 1

$$U_2 = \frac{2E_o x + (2E_o + g)x^2 e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}}$$

για να βρούμε άμεσα την εσωτερική ενέργεια του ζεύγους:

$$U = U_1 + U_2 = E_o + \frac{2E_o x + (2E_o + g)x^2 e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}} = \frac{E_o + 4xE_o + (3E_o + g)x^2 e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2 e^{-\beta g}}$$

Για να καταλήξουμε στο αποτέλεσμα αυτό ξενινώντας από τον συνολικό τελεστή πυκνότητας πρέπει να γράψουμε τη συνολική χαμιλτονιανή $\widehat{H} = \widehat{H}_1 + \widehat{H}_2$ στη βάση $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \otimes \{|\varnothing\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ του οκταδιάστατου χώρου $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ οπότε πρέπει να επεκταθούν τα $\widehat{H}_1$ και $\widehat{H}_2$ στον οκταδιάστατο χώρο. Εχουμε λοιπόν

$$\widehat{H} = \widehat{H}_1 \otimes \widehat{I}_{4\times4} + \widehat{I}_{2\times2} \otimes \widehat{H}_2$$

όπου $\widehat{I}$ είναι τελεστές μονάδα

$$\widehat{H} = \begin{pmatrix} E_o & 0 \\ 0 & E_o \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_o & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_o & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2E_o + g \end{pmatrix}$$

και βρίσκουμε τη χαμιλτονιανή του ζεύγους σε μορφή πίνακα

$$\widehat{H} = \begin{pmatrix} E_o & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2E_o & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2E_o & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3E_o + g & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_o & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2E_o & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2E_o & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3E_o + g \end{pmatrix}$$

και καταλήγουμε προφανώς στο ίδιο αποτέλεσμα

$$U = tr\{\widehat{\rho}\widehat{H}\} = \frac{E_o + 4xE_o + (3E_o + g)x^2e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2e^{-\beta g}}$$

Η **εντροπία** είναι επίσης **προσθετική** ιδιότητα οπότε για το ζεύγος έχουμε $S = S_1 + S_2$. Ομως $S_1 = 0$ δεδομένου ότι η πρώτη παγίδα βρίσκεται σε καθαρή κατάσταση $|\phi\rangle$. Αρα στο μεγαλοκανονικό για τη δεύτερη παγίδα

$$S = S_2 = kln(Z_2) + k\beta U_2 + k\lambda_N\langle N\rangle$$

όπου $\lambda_N = -\beta\mu$ ο πολλαπλασιαστής Lagrange που αντιστοιχεί στον τελεστή αριθμός σωματιδίων. Ολα έχουν υπολογιστεί στην ΑΣΚΗΣΗ 1, οπότε έχουμε για την εντροπία:

$$S = k\ln(1 + 2x + x^2e^{-\beta g}) + k\beta\frac{2E_ox + (2E_o + g)x^2e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2e^{-\beta g}} - k\beta\mu\frac{2x + 2x^2e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2e^{-\beta g}}$$

τελικά

$$S = k\ln(1 + 2x + x^2e^{-\beta g}) + k\beta\frac{(2E_o - \mu)x + (2E_o + g - \mu)x^2e^{-\beta g}}{1 + 2x + x^2e^{-\beta g}}$$