Інститут ядерних досліджень НАНУ

ФІЗИКА НЕІДЕАЛЬНОЇ ПЛАЗМИ

Лекція #9

Модуль #2

Квантова неідеальна плазма

9.1. Рівняння Шрьодінгера

9.1.1. Рівняння Шрьодінгера

- Хвильова функція Ψ від

* Координати : час t, просторові координати $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N$
дискретні спінові координати $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,$$

9.1. Рівняння Шрьодінгера

9.1.2. Рівняння Шрьодінгера

- Гамільтоніан

$$\hat{H} = \sum_{1 \le i \le N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} + U_i(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{1 \le i < j \le N} \Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

$$\Delta_{\mathbf{r}_i} = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

$$\mathbf{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}.$$

9.1. Рівняння Шрьодінгера

9.1.3. Представлення Шрьодінгера

- Нормування хвильової функції

$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N; t)|^2 d^3r_1, d^3r_2, \ldots, d^3r_N = 1.$$

- Середнє значення величини

$$< f(t) >= \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N; t) \hat{f} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N; t) d^3r_1 d^3r_2 \ldots d^3r_N.$$

9.1. Рівняння Шрьодінгера

9.1.4. Представлення Гайзенберга

Середнє значення величини

$$< f(t) >= \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N; 0) \hat{f} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N; 0) d^3 r_1 d^3 r_2 \ldots d^3 r_N,$$

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{f}\hat{H} - \hat{H}\hat{f}] = \frac{1}{i\hbar}[\hat{f}\hat{H}].$$

Дужки Пуассона

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{f}\hat{H} - \hat{H}\hat{f}] = \frac{1}{i\hbar}[\hat{f}\hat{H}].$$

9.1. Рівняння Шрьодінгера

9.1.5. Представлення Гайзенберга

Аналог рівнянь Гамільтона

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = [\hat{H}, \mathbf{r}_i], \quad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = [\hat{H}, \mathbf{p}_i],$$

9.2. Матриця густини

9.2.1. Матриця густини

- Матриця густини

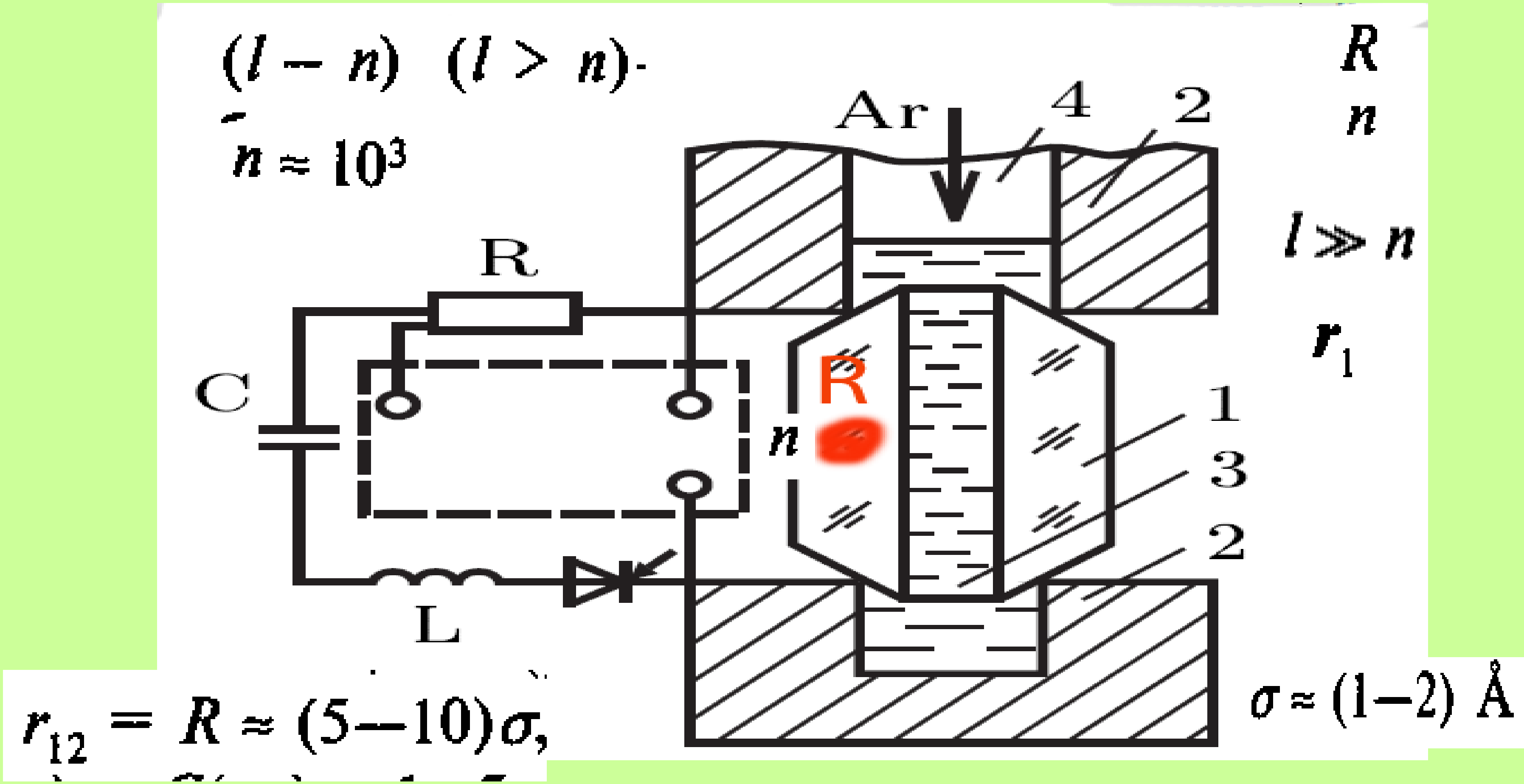
$$\rho_N(q, q'; t) = \Psi(q, t)\Psi^*(q', t),$$

$$q = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N\}, q' = \{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \ldots, \mathbf{r}'_N\}$$

- Квантове рівняння Ліувілля

$$\frac{\partial \rho_N}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\rho_N - \rho_N\hat{H}) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \rho_N],$$

9.3. Матриця густини



Ієрархія статистичної теорії. Два рівня. Кореляційна сфера і термостат.

9.2. Матриця густини

9.2.3. Матриця густини

- Замкнені системи –чисті стани
- Додатковий набір змінних $y = \{\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n\}$,

$$\rho_N(q, q'; t) = \int \Psi(q, y; t) \Psi^*(q', y; t) d\mathbf{y},$$

- Незамкнені системи (змішані системи) мають лише матрицю густини

9.2. Матриця густини

9.2.4. Шпур –розподіл ймовірності для координат системи

$$\rho_n(q,q,t) = Sp\,\rho_N = \int |\Psi(q,y)|^2 d\mathbf{y}$$

$$\rho_N^*(q,q',t) = \rho_n(q',q,t).$$

$$\bar{f} = \int [\hat{f}\rho_N(q,q',t)]_{q'=q} d^3 q,$$

$$q' = q.$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} + \hat{H}^*\right)\rho_N(q,q';t) = 0,$$

9.2. Матриця густини.

9.2.5. Квантовий ланцюжок ББГКІ.

$$\left\{ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{j=1}^{s}\left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_j^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r'}_j^2}\right) - \sum_{1\le i<j\le N}\left[\Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) - \Phi_{ij}(|\mathbf{r'}_i - \mathbf{r'}_j|)\right] \right\}$$

$$\rho_s(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_s;\mathbf{r}'_1,\ldots,\mathbf{r}'_s;t) = \frac{N}{V}\int \sum_{1\le j\le s} d^3r_{s+1}\left[\Phi_{j,s+1}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{s+1}|) - \Phi_{j,s+1}(|\mathbf{r'}_j - \mathbf{r'}_{s+1}|)\right]$$

$$\rho_{s+1}(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_{s+1};\mathbf{r'}_1,\ldots,\mathbf{r'}_{s+1};t).$$

9.3. Рівняння Бдоха

9.3.1. Квантове розподілення Гіббса

$$\rho_N = \frac{1}{Z_N} \exp\{-\beta \hat{H}\}$$

$$e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k / k! \, (\beta \hat{H})^k.$$

9.3. Рівняння Бдоха

9.3.2. Рівняння Блоха

$$\rho'_N(\beta) = e^{-\beta \hat{H}}.$$

$$\frac{\partial \rho'_N}{\partial \beta} = -\hat{H}\rho'_N. \qquad \rho'_N(0) = 1$$

$$\beta \qquad it/\hbar$$

9.3.3. Рівняння Блоха. Координатне представлення.

$$\frac{\partial \rho'_N(q,q';\beta)}{\partial \beta} = -\hat{H}\rho'_N(q,q';\beta),$$

$$q = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N\},\; q' = \{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \ldots, \mathbf{r}'_N\}$$

$$\rho'_N(q,q';0) = \delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}')$$

$$\rho'_N(q,q';\beta) = \sum_{\{n\}} e^{-\beta E_N}\Psi_n(q)\Psi_n^*(q').$$

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \qquad \{n\} = n_1, n_2, \ldots, n_N$$

$$\boldsymbol{\Psi}_{n_1},\; \boldsymbol{\Psi}_{n_2},\; \ldots,\; \boldsymbol{\Psi}_{n_N}$$

9.3. Рівняння Бдоха

9.3.4. Статистична сума

$$\int \rho_N(q,q;\beta)dq = \frac{1}{Z_N}\int \rho'_N(q,q;\beta)dq = 1,$$

$$Z_N = \sum_{\{n\}} \int e^{-\beta E_n} \Psi_n(q) \Psi_n^*(q) dq = \sum_{\{n\}} e^{-\beta E_n} = Sp e^{-\beta E_n}.$$

9.3. Рівняння Бдоха

9.3.5. Велике канонічне розподілення

$$\rho = \frac{1}{Z_G} \sum_{N=0}^{\infty} \exp\left\{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})\right\} = \frac{1}{Z_G} \sum_{N=0}^{\infty} z^N \rho_N,$$

$$Z_G = Sp e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n\}} \exp\left[-\beta(E_{n,N} - \mu N)\right] = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N$$

$$z = \exp(\beta\mu)$$

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

9.4. Теорія збурень

9.4.1. Представлення взаємодії

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{1 \le i < j \le N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|).$$

$$R(\beta) = \exp\left[\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\right] \exp\left[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})\right]$$

$$\frac{\partial R}{\partial \beta} = -e^{\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})}(\hat{H} - \hat{H}_0)e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} = -\hat{H}_1(\beta)R(\beta),$$

$$\hat{H}_1(\beta) = \exp\left[\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\right] \hat{H}_1 \exp\left[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\right]$$

9.4. Теорія збурень

9.4.2. Оператор впорядкування

$$R(0) = 1$$

$$R(\beta) = 1 - \int_0^\beta \hat{H}_1 R(\beta) d\beta.$$

$$R(\beta) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \ldots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n \hat{H}_1(\beta_1) \ldots \hat{H}_1(\beta_n).$$

$$R(\beta) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \ldots \int_0^\beta d\beta_1 \ldots d\beta_n T\left[\hat{H}_1(\beta_1) \ldots \hat{H}_1(\beta_n)\right]$$

$$\beta > \beta_1 > \beta_2 > \ldots > \beta_n > 0$$

9.4. Теорія збурень

9.4.3. Статистична сума

$$Z_G^0 = Sp\exp\left[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\right]$$

$$\left\langle T\left[\hat{H}_1(\beta_1)\ldots\hat{H}_1(\beta_n)\right]\right\rangle_0 = \frac{Sp\exp\left[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\right]T\left[\hat{H}_1(\beta_1)\ldots\hat{H}_1(\beta_n)\right]}{Sp\exp\left[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\right]}.$$

$$\frac{Z_G}{Z_G^0} = \left\langle R(\beta)\right\rangle_0 = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta\ldots\int_0^\beta d\beta_1\ldots d\beta_n\left\langle T\left[\hat{H}_1(\beta_1)\ldots\hat{H}_1(\beta_n)\right]\right\rangle_0.$$