ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ – ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ
Στα πλαίσια του Μεταπτυχιακού προγράμματος σπουδών.

ΙΩΑΝΝΗΣ Ε. ΣΦΑΕΛΟΣ
2004

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1. <u>ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟΝ ΠΙΝΑΚΑ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ</u>

Όλα τα συστήματα στην φύση υπακούουν στην Κβαντική Μηχανική. Ένα μετρήσιμο φυσικό μέγεθος ενός συστήματος, είναι συνδεδεμένο μ' έναν ερμιτιανό τελεστή, που ενεργεί στον χώρο Hilbert. Η κατάσταση ενός συστήματος είναι ένα διάνυσμα $|\Psi>$ στον ίδιο χώρο Hilbert. Αν $|x_i>$ είναι ένα διάνυσμα των τελεστών θέσης όλων των σωματίων του συστήματος, τότε η ποσότητα : $\Psi(x)\equiv<x_i|\Psi>$ είναι η κυματοσυνάρτηση του συστήματος στην κατάσταση $|\Psi>$, η οποία μας δίνει την πλήρη περιγραφή της κατάστασης.

Κάθε στιγμή, η κυματοσυνάρτηση Ψ ενός πραγματικά απομονωμένου συστήματος, μπορεί να γραφεί σαν γραμμική υπέρθεση ενός πλήρους ορθοκανονικού συνόλου από στάσιμες κυματοσυναρτήσεις $\{\varphi_i\}$:

$$\Psi = \sum_i c_i \phi_i \qquad (1.1)$$

όπου c_i είναι ένας μιγαδικός αριθμός και είναι συνάρτηση του χρόνου. Ο δείκτης i παριστάνει ένα σύνολο από κβαντικούς αριθμούς, που είναι ιδιοτιμές κάποιων επιλεγμένων δυναμικών τελεστών. Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής του μιγαδικού $|c_i|^2$ είναι η πιθανότητα ώστε σε μια μέτρηση, να βρούμε το σύστημα να έχει τους κβαντικούς αριθμούς i.

Στην Στατιστική Μηχανική έχουμε να κάνουμε πάντα με συστήματα, που αλληλεπιδρούν με το εξωτερικό περιβάλλον. Μπορούμε να θεωρήσουμε το σύστημα συν το εξωτερικό περιβάλλον σαν ένα πραγματικά απομονωμένο σύστημα. Η κυματοσυνάρτηση Ψ για το ολικό σύστημα, θα εξαρτάται τόσο από τις συντεταγμένες του συστήματος, όσο και από τις συντεταγμένες του εξωτερικού περιβάλλοντος. Θεωρούμε τώρα ένα κβαντομηχανικό σύστημα, που περιγράφεται από ένα πλήρες σύνολο διανυσμάτων $|x_i>$, ενώ το υπόλοιπο σύμπαν περιγράφεται από ένα πλήρες σύνολο διανυσμάτων $|X_i>$. Η πιο γενική κυματοσυνάρτηση, που μπορούμε να γράψουμε θα έχει την μορφή:

$$|\Psi>=\sum_{ij} C_{ij}\,|x_i>|X_j> \qquad (1.2)$$

Να σημειώσουμε ότι $C_{ij}\ C_{ij}^*$ αντιστοιχεί στην πιθανότητα να βρίσκεται το σύστημα στην κατάσταση $|x_i>$ και το υπόλοιπο σύμπαν στην κατάσταση $|X_i>$.

Ένα σημείο που πρέπει να υπενθυμίσουμε είναι, η καθαρή ή η μεικτή κατάσταση στην οποία λέμε ότι βρίσκεται κάποιο σύστημα. Αν το κβαντικό σύστημα περιγράφεται από μία μοναδική κυματοσυνάρτηση, τότε βρίσκεται σε **καθαρή κατάσταση**. Αυτό συμβαίνει αν έχουμε μετρήσει και γνωρίζουμε όλες τις ιδιοτιμές ενός πλήρους συνόλου συμβιβαστών φυσικών μεγεθών. Αν αυτό δεν έχει συμβεί, τότε το σύστημα θα βρίσκεται σε μια όχι πλήρως γνωστή κατάσταση, που την ονομάζουμε **μεικτή κατάσταση**. Αντί για μια μοναδική κυματοσυνάρτηση, η δυναμική κατάσταση του συστήματος αυτού θα πρέπει να περιγράφεται από ένα στατιστικό μείγμα κυματοσυναρτήσεων. Στην Κβαντική Στατιστική Μηχανική, η περιγραφή της δυναμικής κατάστασης ενός συστήματος, γίνεται με την βοήθεια του **πίνακα πυκνότητας**, που είναι απαραίτητος για την περιγραφή συστημάτων, που βρίσκονται σε μεικτή κατάσταση και της **συνάρτησης διαμερισμού**. Η γνώση τους μας επιτρέπει να υπολογίσουμε την μέση τιμή μιας οποιασδήποτε ποσότητας που αφορά το σύστημα, καθώς και τις πιθανότητες των διαφόρων τιμών αυτών των ποσοτήτων.

Έστω Α ένας τελεστής, που περιγράφει μια φυσική ποσότητα ενός συστήματος. Η μέση τιμή αυτής της ποσότητας ως προς την κατάσταση $|\Psi\rangle$ είναι εξ ορισμού : $\langle A\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle$, οπότε με την βοήθεια της σχέσης (1.2) έχουμε :

$$\langle A\rangle = \sum_{ij}\sum_{mn} C_{ij}^{*} C_{mn} \left\langle X_j \middle| \langle x_i|A|x_m\rangle \middle| X_n \right\rangle = \sum_{ij}\sum_{mn} C_{ij}^{*} C_{mn} \left\langle X_j \| X_n \right\rangle \langle x_i|A|x_m\rangle =$$

$$\sum_{ij}\sum_{mn} C_{ij}^{*} C_{mn} \delta_{jn} \langle x_i|A|x_m\rangle = \sum_{im}\left[\sum_{j} C_{ij}^{*} C_{mj}\right] \langle x_i|A|x_m\rangle \qquad (1.3)$$

Ορίζουμε σαν πίνακα πυκνότητας : $\rho_{mi} = \sum_{j} C_{ij}^{*} C_{mj} = \langle x_m|\rho|x_i\rangle$ (1.4)

όπου ρ είναι ο τελεστής πυκνότητας πιθανότητας.

Από τις σχέσεις (1.3) , (1.4) βρίσκουμε :

$$\langle A\rangle = \sum_{im} \rho_{mi} \langle x_i|A|x_m\rangle = \sum_{im} \langle x_m|\rho|x_i\rangle \langle x_i|A|x_m\rangle =$$

$$\sum_{m} \left\langle x_m \middle| \rho \left[\sum_{i} |x_i\rangle\langle x_i|\right] A \middle| x_m \right\rangle = \sum_{m} \langle x_m|\rho A|x_m\rangle = Tr[\rho A] \qquad (1.5)$$

όπου λάβαμε υπόψιν την ιδιότητα της πληρότητας των ιδιοσυναρτήσεων :

$\sum_{i} |x_i\rangle\langle x_i| = 1$, όπου 1 ο μοναδιαίος τελεστής.

Όπως φαίνεται από την (1.4) ο τελεστής ρ είναι ερμιτιανός. Κατά συνέπεια, μπορεί να διαγωνοποιηθεί μ'ένα μοναδιακό μετασχηματισμό. Επίσης, μπορεί να βρεθεί ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων |i> με πραγματικές ιδιοτιμές w_i, δηλαδή :

$$\rho = \sum_i w_i |i\rangle\langle i| \qquad (1.6)$$

όπου w_i εκφράζει το στατιστικό βάρος της καθαρής κατάστασης |i>, δηλαδή την πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα σ'αυτή την κατάσταση, οπότε φυσικά :

$$0 \le w_i \le 1 \ \text{ με } \ \sum_i w_i = 1.$$

Αν όλες οι τιμές των w_i εκτός από μία είναι μηδενικές, τότε λέμε ότι το σύστημα βρίσκεται σε μια καθαρή κατάσταση, αλλιώς βρίσκεται σε μια μεικτή κατάσταση.Προφανώς στην καθαρή κατάσταση θα έχουμε $w_i = 1$, οπότε σύμφωνα με την (1.6) έχουμε :

$$\rho = |i_{pure}\rangle\langle i_{pure}|.$$

Επίσης, σύμφωνα με την (1.4) για την καθαρή κατάσταση θα έχουμε :

$$\rho_{ij} = \langle x_i|\rho|x_j\rangle = \langle x_i|i_{pure}\rangle\langle i_{pure}|x_j\rangle = \langle x_i|i_{pure}\rangle(\langle x_j|\ i_{pure}\rangle)^*.$$

Είναι εύκολο να δείξουμε ότι για μια καθαρή κατάσταση η ικανή και αναγκαία συνθήκη είναι : $\rho = \rho^2$.

Γενικότερα, για μεικτές καταστάσεις έχουμε :

$$\rho_{ij} = \sum_k w_k \langle x_i|k\rangle\langle x_j|k\rangle^*$$

Αναφέρουμε τώρα σύμφωνα με τις σχέσεις (1.4) , (1.5) και (1.6) μερικές ιδιότητες.

1) $\langle A\rangle = Tr[\rho A] = \sum_j \langle j|\rho A|j\rangle = \sum_{ij} w_i \langle j||i\rangle\langle i|A|j\rangle = \sum_{ij} w_i \delta_{ji} \langle i|A|j\rangle \Leftrightarrow$

$$\langle A\rangle = \sum_i w_i \langle i|A|i\rangle \qquad (1.7)$$

Αφού <i|A|i> είναι η αναμενόμενη τιμή του τελεστή A όταν το σύστημα βρίσκεται στην ιδιοκατάσταση i, η ιδιοτιμή w_i, μπορεί να ερμηνευθεί ως η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στην ιδιοκατάσταση αυτή.

2) Έστω A ο μοναδιαίος τελεστής 1. Σ' αυτή την περίπτωση θα έχουμε : $\langle A\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Αλλά :

$\langle A\rangle = Tr[\rho A] = Tr\rho = \sum_j \langle j|\rho|j\rangle = \sum_{ij} w_i < j\,|\,i >< i\,|\,j > = \sum_{ij} w_i \delta_{ji}\delta_{ij} = \sum_i w_i$.

Άρα από τις δύο τελευταίες σχέσεις που καταλήξαμε, βρίσκουμε :

$$\sum_i w_i = 1 \quad (1.8) \quad \text{και} \quad Tr\rho = 1 \quad (1.9)$$

3) Σύμφωνα με την σχέση (1.4), τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας είναι :

$\rho_{ii} = \sum_j C_{ij}^* C_{ij} = \langle i|\rho|i\rangle = \sum_j |C_{ij}|^2 \geq 0$, οπότε : $\sum_i \rho_{ii} = \sum_i < i\,|\,\rho\,|\,i > = \mathrm{Tr}\rho = 1$.

Άρα: $0 \leq \rho_{ii} \leq 1$. Αυτό είναι συμβιβαστό με την προφανή φυσική ερμηνεία των διαγωνίων στοιχείων ρ_{ii}, που εκφράζουν την πιθανότητα που υπάρχει να βρούμε ένα τυχαίο μέλος του συνόλου μας στην ιδιοκατάσταση $|i>$.

4) Χρησιμοποιώντας την διαγώνια αναπαράσταση, συμπεραίνουμε ότι :

$$\mathrm{Tr}(\rho^2) \leq \mathrm{Tr}\rho = 1 \qquad (1.10)$$

Αυτή η σχέση ισχύει σε κάθε αναπαράσταση, αφού το ίχνος ενός πίνακα παραμένει αναλλοίωτο κάτω από ένα μοναδιακό μετασχηματισμό. Στην ειδική περίπτωση, που το σύστημα βρίσκεται σε καθαρή κατάσταση θα ισχύει :

$$\mathrm{Tr}(\rho^2) = \mathrm{Tr}\rho = 1.$$

Μπορούμε να πούμε λοιπόν, ότι η εξίσωση :

$$\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$$

αποτελεί κριτήριο του αν το σύστημα βρίσκεται σε καθαρή κατάσταση ή όχι.

2. ΧΡΟΝΙΚΗ ΕΞΕΛΙΞΗ ΤΟΥ ΤΕΛΕΣΤΗ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ

Η χρονική εξέλιξη του τελεστή ρ μπορεί να φανεί αμέσως από την εξίσωση Schrodinger :

$$H\,|\,i(t)> = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\,i(t)> \quad ή \quad <i(t)\,|\,H = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}<i(t)\,| \qquad (2.1)$$

Σύμφωνα με την (1.6), καθώς ο χρόνος αλλάζει, οι δυνατές καταστάσεις του συστήματος αλλάζουν επίσης, οπότε :

$$\rho(t) = \sum_i w_i\,|\,i(t)><i(t)\,| \qquad (2.2)$$

Διαφορίζοντας την (2.2) ως προς τον χρόνο και λαμβάνοντας υπόψιν τις σχέσεις (2.1) παίρνουμε :

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \sum_i[(\frac{\partial}{\partial t}w_i\,|\,i(t)>)<i(t)\,|+w_i\,|\,i(t)>(\frac{\partial}{\partial t}<i(t)\,|)] =$$

$$\frac{1}{i\hbar}\sum_i[w_iH\,|\,i(t)><i(t)\,|-w_i\,|\,i(t)><i(t)\,|\,H] =$$

$$\frac{1}{i\hbar}(H\rho-\rho H) \Leftrightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H,\rho] \qquad (2.3)$$

Η γενική λύση αυτής της εξίσωσης είναι :

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^+(t) \qquad (2.4)$$

όπου U(t) είναι ο τελεστής χρονικής εξέλιξης και

$$\rho(0) = \sum_i w_i\,|\,i(0)><i(0)\,| \qquad (2.5)$$

Αν η Hamiltonian είναι ανεξάρτητη από τον χρόνο, τότε ισχύει :

$$U(t) = \exp(-iHt/\hbar) \quad (2.6) \quad και \quad U^+(t) = \exp(iHt/\hbar) \quad (2.7)$$

Η σχέση (2.3) είναι η εξίσωση κίνησης του πίνακα πυκνότητας και είναι γνωστή και σαν εξίσωση του Liouville. Μοιάζει με την εξίσωση κίνησης του Heisenberg, αλλά έχει διαφορετικό πρόσημο από εκείνη στο δεύτερο μέλος.

Από την σχέση (2.3) βρίσκουμε εύκολα την εξίσωση κίνησης για την μέση τιμή ενός φυσικού μεγέθους. Έστω A ένας τελεστής, που δεν εξαρτάται εκπεφρασμένα από τον χρόνο, οπότε :

$$\frac{\partial}{\partial t}<A> = \frac{\partial}{\partial t}Tr(\rho A) = Tr(A\frac{\partial\rho}{\partial t}) = \frac{1}{i\hbar}Tr(A[H,\rho]) = \frac{1}{i\hbar}Tr([A,H]\rho) \qquad (2.8)$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει το γεγονός ότι το ίχνος του γινομένου δύο πινάκων δεν εξαρτάται από την σειρά των παραγόντων.

Εξετάζουμε τώρα την περίπτωση, που ένα σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία, οπότε οι μέσες τιμές των φυσικών μεγεθών είναι σταθερές. Άρα :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (2.9)$$

Κατά συνέπειαν, σύμφωνα με την σχέση (2.3) θα έχουμε :

$$[\rho, H] = 0 \quad (2.10) \quad \text{και} \quad \rho = \rho(H) \quad (2.11)$$

Οι παραπάνω σχέσεις (2.10) και (2.11) αποτελούν το κβαντομηχανικό ανάλογο του θεωρήματος του Liouville της κλασσικής στατιστικής μηχανικής για την σταθερότητα των κατανομών πιθανοτήτων.

Ειδικότερα, αν θεωρήσουμε σαν βάση τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας: $|i\rangle = |E_n\rangle$, τότε σ'αυτή την αναπαράσταση η Hamiltonian H και ο τελεστής πυκνότητας ρ έχουν διαγώνια μορφή :

$$H_{nn} = E_n \delta_{nn} \quad \text{ή} \quad H = \sum_n E_n | E_n >< E_n | \quad (2.12)$$

$$\rho_{nm} = \rho_{nn}(E_n)\delta_{nm} \quad \text{ή} \quad \rho = \sum_n f(E_n) | E_n >< E_n | \quad (2.13)$$

Ως γνωστόν, τα διαγώνια στοιχεία ρ_{nn} παριστάνουν την πιθανότητα να βρούμε ένα τυχαίο μέλος του συνόλου μας στην ιδιοκατάσταση E_n. Η ακριβής μορφή αυτής της συνάρτησης $f(E_n)$ εξαρτάται από το είδος του συνόλου, που θα χρησιμοποιήσουμε.

3. Ο ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ ΣΤΗΝ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ

Όταν $|\varphi_i>$ είναι μια ιδιοσυνάρτηση και E_i είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή της Hamiltonian H του συστήματος, η πιθανότητα ώστε το σύστημα να βρίσκεται στην κατάσταση $|\varphi_i>$ είναι: $\frac{1}{Q}e^{-\beta E_i}$, όπου Q είναι η συνάρτηση διαμερισμού, που δίνεται από την σχέση :
$Q = \sum_i e^{-\beta E_i}$ = $e^{-\beta F}$ = Tr $e^{-\beta H}$ και $\beta = 1 / kT$, όπου k η σταθερά του Boltzmann και F η ελεύθερη ενέργεια Helmholtz.

Έτσι ο πίνακας πυκνότητας είναι :

$$\rho = \sum_i w_i |\varphi_i><\varphi_i| , \text{ όπου } w_i = \frac{1}{Q}e^{-\beta E_i} \qquad (3.1)$$

Επειδή $H|\varphi_i> = E_i\ |\varphi_i>$, μπορούμε να γράψουμε την (3.1) ως εξής :

$$\rho = \frac{1}{Q}\sum_i e^{-\beta H} |\varphi_i><\varphi_i| = \frac{e^{-\beta H}}{Q} \qquad (3.2)$$

οπότε τελικά έχουμε :

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Tre^{-\beta H}} \qquad (3.3)$$

Η μέση ενέργεια U του συστήματος , μπορεί να γραφεί ως εξής :

$$U = Tr\rho H = \frac{Tr[He^{-\beta H}]}{Tr[e^{-\beta H}]} \qquad (3.4)$$

Ας θεωρήσουμε τον πίνακα πυκνότητας σαν μια συνάρτηση του β, τότε στην κανονική συλλογή (συλλογή που αλληλεπιδρά με το περιβάλλον, ανταλλάσσοντας μόνο ενέργεια), ισχύει η σχέση :

$$\rho(\beta) = \frac{e^{-\beta H}}{Tr(e^{-\beta H})} \qquad (3.5)$$

Για να απλοποιήσουμε την κατάσταση ορίζουμε τον μη κανονικοποιημένο πίνακα πυκνότητας :

$$\rho_U(\beta) = e^{-\beta H} \qquad (3.6)$$

Αντί του συμβόλου $\rho_U(\beta)$ θα χρησιμοποιήσουμε παρακάτω το ρ. Στην αναπαράσταση της ενέργειας η σχέση (3.6) γράφεται :

$$\rho_{ij} = \delta_{ij} e^{-\beta E_i} \qquad (3.7)$$

Διαφορίζοντας την σχέση (3.7) βρίσκουμε :

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial \beta} = -\delta_{ij} E_i e^{-\beta E_i} = -E_i \rho_{ij} \qquad (3.8)$$

Η εξίσωση (3.8) ισοδυναμεί με την διαφορική εξίσωση :

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -H\rho \qquad (3.9)$$

που έχει την προφανή αρχική συνθήκη :

$$\rho(0) = 1.$$

Σαν εφαρμογή του τελευταίου, θεωρούμε το πρόβλημα του μονοδιάστατου ελεύθερου σωματιδίου. Χρησιμοποιώντας την Hamiltonian του ελεύθερου σωματιδίου στην αναπαράσταση των θέσεων, η (3.9) γίνεται :

$$\frac{\partial \rho(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, x'; \beta) \qquad (3.10)$$

Η σχέση (3.10) είναι μια διαφορική εξίσωση τύπου διάχυσης και η λύση της είναι :

$$\rho(x, x'; \beta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 \beta}} \exp\left[-(\frac{m}{2\hbar^2 \beta})(x - x')^2 \right] \qquad (3.11)$$

Ο συντελεστής της (3.11) είναι κατάλληλα επιλεγμένος ώστε να ισχύει η αρχική συνθήκη :

$$\rho(x, x'; \beta = 0) = \delta(x - x') \ .$$

4. ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ ΓΙΑ ΕΛΕΥΘΕΡΟ ΣΩΜΑΤΙΟ ΣΕ ΚΟΥΤΙ

Έστω ένα ελεύθερο σωμάτιο μάζας m, σ'ένα κυβικό κουτί πλευράς L. Η Hamiltonian αυτού του σωματίου είναι :

$$H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad (4.1)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις της Hamiltonian, που ικανοποιούν τις περιοδικές οριακές συνθήκες :

$$\varphi(x+L,y,z) = \varphi(x,y+L,z) = \varphi(x,y,z+L) = \varphi(x,y,z)$$

είναι :

$$\varphi_E(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}\exp(i\vec{k}.\vec{r}) \qquad (4.2)$$

με αντίστοιχες ιδιοτιμές :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (4.3)$$

όπου :

$$\vec{k} \equiv (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \qquad (4.4)$$

Οι κβαντικοί αριθμοί n_x ,n_y ,n_z είναι ακέραιοι. Για το κυματάνυσμα $\vec{k}$ ισχύει :

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n} \qquad (4.5)\ ,$$

όπου $\vec{n}$ ένα διάνυσμα με ακέραιες συνιστώσες $0,\pm1,\pm2,\ldots$

Προχωράμε τώρα στον υπολογισμό των στοιχείων του πίνακα πυκνότητας ρ του συστήματος στην κανονική συλλογή, θεωρώντας την αναπαράσταση των θέσεων, σύμφωνα με την σχέση :

$$<\vec{r}\,|\,\rho\,|\,\vec{r}'> = \frac{<\vec{r}\,|\,e^{-\beta H}\,|\,\vec{r}'>}{Tr(e^{-\beta H})} \qquad (4.6)$$

Για τον αριθμητή της σχέσης (4.6) έχουμε :

$$<\vec{r}\,|\,e^{-\beta H}\,|\,\vec{r}'> = \sum_E <\vec{r}\,|\,E>e^{-\beta E}<E\,|\,\vec{r}'> = \sum_E e^{-\beta E}\varphi_E(\vec{r})\varphi_E^*(\vec{r}) \qquad (4.7)$$

Αντικαθιστούμε τώρα στην (4.7) τις σχέσεις (4.2) και (4.3), οπότε έχουμε :

$$<\vec{r}\,|\,e^{-\beta H}\,|\,\vec{r}'> = \frac{1}{L^3}\sum_{\vec{k}}\exp[-\frac{\beta\hbar^2}{2m}\vec{k}^2 + i\vec{k}.(\vec{r}-\vec{r}')] \qquad (4.8)$$

Μπορούμε στην σχέση (4.8), να αντικαταστήσουμε κατά προσέγγιση το άθροισμα με ολοκλήρωμα, καθώς για μεγάλους όγκους οι γειτονικές ιδιοτιμές του κυματανύσματος $\vec{k}$ βρίσκονται πολύ κοντά και έτσι το ενεργειακό φάσμα είναι σχεδόν συνεχές. Λαμβάνοντας υπόψη και την σχέση (4.5) και ότι $V = L^3$, παίρνουμε:

$$< \vec{r} \mid e^{-\beta H} \mid \vec{r}' >= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp[-\frac{\beta\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 + i\vec{k}.(\vec{r} - \vec{r}')] d^3\vec{k} \qquad (4.9)$$

Χρησιμοποιούμε τώρα το γνωστό ολοκλήρωμα :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{r} \exp(-a\vec{r}^2 + i\beta\vec{r}) = (\frac{\pi}{a})^{3/2} \exp(\frac{\beta^2}{4a}) \qquad (4.10)$$

οπότε η σχέση (4.9) γίνεται :

$$< \vec{r} \mid e^{-\beta H} \mid \vec{r}' >= (\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2})^{3/2} \exp[-\frac{m}{2\beta\hbar^2} (\vec{r} - \vec{r}')^2] \qquad (4.11)$$

Μένει τώρα να υπολογίσουμε τον παρανομαστή της σχέσης (4.6) που είναι η συνάρτηση διαμερισμού :

$$Tr(e^{-\beta H}) = \int < \vec{r} \mid e^{-\beta H} \mid \vec{r} > d^3\vec{r} = V(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2})^{3/2} \qquad (4.12)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (4.11) και (4.12) στην (4.6) καταλήγουμε:

$$< \vec{r} \mid \rho \mid \vec{r}' > = \frac{1}{V} \exp[-\frac{m}{2\beta\hbar^2} (\vec{r} - \vec{r}')^2] \qquad (4.13)$$

Με βάση αυτή την σχέση μπορούμε να υπολογίσουμε την μέση τιμή της ενέργειας :

$$< H > = U = Tr(\rho H) = -\frac{\hbar^2}{2mV} \int \{\nabla_r^2 \exp[-\frac{m}{2\beta\hbar^2} (\vec{r} - \vec{r}')^2]\}_{\vec{r}=\vec{r}'} d^3\vec{r}$$

$$= \frac{1}{2\beta V} \int \{[3 - \frac{m}{\beta\hbar^2} (\vec{r} - \vec{r}')^2] \exp[-\frac{m}{2\beta\hbar^2} (\vec{r} - \vec{r}')^2]\}_{\vec{r}=\vec{r}'} d^3\vec{r}$$

$$= \frac{3}{2\beta} = \frac{3}{2} kT \qquad (4.14)$$

5. ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ ΓΙΑ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΟ ΣΕ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΠΕΔΙΟ

Ως γνωστόν, η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ ενός χωρικά ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου $\vec{B}$ και μιας κατανομής φορτίου, που χαρακτηρίζεται από μια μαγνητική διπολική ροπή $\vec{\mu}$ είναι :

$$H = -\vec{\mu}.\vec{B} \qquad (5.1)$$

Για μικροσκοπικά σωματίδια όπως τα ηλεκτρόνια, η μαγνητική διπολική ροπή είναι :

$$\vec{\mu} = \frac{e}{mc}\vec{S} \qquad (5.2)$$

όπου $\vec{S}$ το σπιν του σωματιδίου. Αν χρησιμοποιήσουμε τους πίνακες του Pauli τότε έχουμε :

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} \qquad (5.3)$$

Από τις σχέσεις (5.1), (5.2), (5.3) βρίσκουμε :

$$H = -\mu_B(\vec{\sigma}.\vec{B}) \qquad (5.4)$$

όπου η ποσότητα $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2mc}$ είναι η μαγνητόνη του Bohr.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας ορίζουμε ως z-διεύθυνση την διεύθυνση του μαγνητικού πεδίου. Οπότε: $H = -\mu_B B\sigma_z$ (5.5),

όπου $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Άρα ο πίνακας πυκνότητας στην κανονική συλλογή θα είναι :

$$(\rho) = \frac{(e^{-\beta H})}{Tr(e^{-\beta H})} = \frac{1}{e^{\beta B\mu_B} + e^{-\beta B\mu_B}} \begin{pmatrix} e^{\beta B\mu_B} & 0 \\ 0 & e^{-\beta B\mu_B} \end{pmatrix} \qquad (5.6)$$

Για την μέση τιμή του σ_z έχουμε :

$$<\sigma_z> = Tr(\rho\sigma_z) = \frac{e^{\beta B\mu_B} - e^{-\beta B\mu_B}}{e^{\beta B\mu_B} + e^{-\beta B\mu_B}} = \tanh(\beta B\mu_B) \qquad (5.7)$$

6. ΓΡΑΜΜΙΚΟΣ ΑΡΜΟΝΙΚΟΣ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗΣ

Θεωρούμε την περίπτωση ενός γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή, του οποίου η Hamiltonian είναι :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \qquad (6.1)$$

Οι ιδιοτιμές αυτής της Hamiltonian είναι οι γνωστές : $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \ , \quad n = 0,1,2,...$ (6.2)

Οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις είναι :

$$\varphi_n(q) = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}\frac{H_n(\xi)}{(2^n n!)^{1/2}}e^{-(1/2)\xi^2} \qquad (6.3)$$

όπου $\xi = (\frac{m\omega}{\hbar})^{1/2} q$ (6.4)

και $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}(\frac{d}{d\xi})^n e^{-\xi^2}$ (6.5)

όπου $H_n(\xi)$ είναι τα πολυώνυμα Hermite.

Ο πίνακας στοιχείων του τελεστή exp(-βH) στην αναπαράσταση γενικευμένων συντεταγμένων είναι :

$$< q | e^{-\beta H} | q' >= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}\varphi_n(q)\varphi_n(q') =$$

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-(1/2)(\xi^2+\xi'^2)}\sum_{n=0}^{\infty}\left\{e^{-(n+1/2)\beta\hbar\omega}\frac{H_n(\xi)H_n(\xi')}{(2^n n!)}\right\} \qquad (6.6)$$

Ο υπολογισμός του αθροίσματος στην σχέση (6.6) είναι αρκετά επίπονη διαδικασία, οπότε θα την παραλείψουμε. Το αποτέλεσμα στο οποίο καταλήγουμε είναι :

$$< q | e^{-\beta H} | q' >=$$

$$= \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\beta\hbar\omega)}\right]^{1/2}\exp\left[-\frac{m\omega}{4\hbar}\left\{(q+q')^2\tanh\left(\frac{\beta\omega\hbar}{2}\right) + (q-q')^2\coth\left(\frac{\beta\omega\hbar}{2}\right)\right\}\right] \qquad (6.7)$$

Σύμφωνα με αυτή την σχέση, βρίσκουμε την συνάρτηση διαμερισμού του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή :

$$< q | e^{-\beta H} | q >= \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\beta\hbar\omega)}\right]^{1/2}\exp\left[-\frac{m\omega}{4\hbar}\left\{(2q)^2\tanh\left(\frac{\beta\omega\hbar}{2}\right)\right\}\right]$$

$$=\left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\beta\hbar\omega)}\right]^{1/2}\exp\left[-\frac{m\omega q^2}{\hbar}\tanh\left(\frac{\beta\omega\hbar}{2}\right)\right]$$

Άρα :

$$Tr(e^{-\beta H})=\int_{-\infty}^{+\infty}<q|e^{-\beta H}|q>dq=\left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\beta\hbar\omega)}\right]^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{m\omega q^2}{\hbar}\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right]dq$$

$$=\frac{1}{2\sinh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)}=\frac{e^{-(1/2)\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \qquad (6.8)$$

Επομένως για την ίδια χρονική στιγμή, ο πίνακας πυκνότητας του ταλαντωτή με γενικευμένη συντεταγμένη στην γειτονιά της συγκεκριμένης τιμής q, θα είναι :

$$<q|\rho|q>=\frac{<q|e^{-\beta H}|q>}{Tr(e^{-\beta H})}=\frac{\left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh(\beta\hbar\omega)}\right]^{1/2}\exp\left[-\frac{m\omega q^2}{\hbar}\tanh\left(\frac{\beta\omega\hbar}{2}\right)\right]}{\frac{1}{2\sinh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega)}}$$

$$=\left[\frac{m\omega\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)}{\pi\hbar}\right]^{1/2}\exp\left[-\frac{m\omega q^2}{\hbar}\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right] \qquad (6.9)$$

Στο κλασσικό όριο ($\beta\omega\hbar<<1$), η κατανομή γίνεται καθαρά θερμική, ελεύθερη από κβαντικές επιδράσεις . Στην περίπτωσή μας θα έχουμε: $\tanh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega)\approx\frac{1}{2}\beta\hbar\omega$,

οπότε η σχέση (6.9) γίνεται :

$$<q|\rho|q>\approx\left(\frac{m\omega^2}{2\pi kT}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{m\omega^2 q^2}{2kT}\right) \qquad (6.10)$$

με διάχυση: $(kT/m\omega^2)^{1/2}$.

Για την άλλη ακραία περίπτωση όπου $\beta\omega\hbar>>1$, η κατανομή γίνεται καθαρά κβαντομηχανική, ελεύθερη από θερμικές επιδράσεις. Στην περίπτωσή μας θα έχουμε: $\tanh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega)\approx 1$,

οπότε η σχέση (6.9) γίνεται :

$$<q|\rho|q>\approx\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{m\omega q^2}{\hbar}\right) \qquad (6.11)$$

με διάχυση: $(\hbar/2m\omega)^{1/2}$.

Η μέση ενέργεια του ταλαντωτή θα δίνεται από την σχέση:

$$< H > = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Tr(e^{-\beta H}) = \frac{1}{2}\hbar\omega\coth(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega) \qquad (6.12)$$

Αν λάβουμε υπόψιν την σχέση (6.12), η σχέση (6.9), γράφεται :

$$< q \,|\, \rho \,|\, q > = \left(\frac{m\omega^2}{2\pi < H >}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega^2 q^2}{2 < H >}\right) \qquad (6.13)$$

Με την βοήθεια της τελευταίας σχέσης, μπορούμε να υπολογίσουμε την μέση τιμή της δυναμικής ενέργειας του ταλαντωτή :

$$< \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 > = \left(\frac{m\omega^2}{2\pi < H >}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{m\omega q^2}{2 < H >}\right]\left(\frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right)dq = \frac{1}{2} < H > \qquad (6.14)$$

Επομένως, η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας του ταλαντωτή θα πρέπει να είναι ίση με $\frac{1}{2} < H >$, δηλαδή :

$$< -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} > = \frac{1}{2} < H > \qquad (6.15)$$

7. Η ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΤΟΥ WIGNER

Ο πίνακας πυκνότητας μπορεί να γραφεί στην αναπαράσταση των θέσεων και στην αναπαράσταση των ορμών αντίστοιχα ως εξής :

$$\rho(x,x') = \sum_i e^{-\beta E_i}\varphi_i(x)\varphi_i^*(x') \qquad (7.1)$$

$$\rho(p,p') = \sum_i e^{-\beta E_i}\varphi_i(p)\varphi_i^*(p') = \int \rho(x,x')e^{(-i/\hbar)(p.x-p'.x')}dxdx' \qquad (7.2)$$

Τα διαγώνια στοιχεία :

$$\rho(x,x) \equiv P(x) \qquad (7.3)$$

παριστάνουν την πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου στην θέση x (παραμελώντας την σταθερά κανονικοποίησης 1/Trρ).

Ομοίως τα διαγώνια στοιχεία:

$$\rho(p,p) \equiv P(p) \qquad (7.4)$$

είναι ανάλογα με την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην p στον χώρο των ορμών.

Η έκφραση (7.4) χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της μέσης τιμής της κινητικής ενέργειας :

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{Tr[(p^2/2m)\rho]}{Tr[\rho]} = \frac{\int \rho(p,p)(p^2/2m)(dp/2\pi\hbar)}{\int \rho(p,p)(dp/2\pi\hbar)} \qquad (7.5)$$

Στην κλασσική μηχανική, η συνάρτηση πυκνότητας f(p,x) στον χώρο των φάσεων έχει τις ακόλουθες ιδιότητες :

$$P(p) = \int f(p,x)dx$$
$$P(x) = \int f(p,x)\frac{dp}{2\pi\hbar} \qquad (7.6)$$

Η ερώτηση που τίθεται τώρα, είναι αν υπάρχει κάποια συνάρτηση f (p,x) στην κβαντομηχανική, που να ικανοποιεί τις σχέσεις (7.6).

Η απάντηση είναι ότι, υπάρχει και ονομάζεται συνάρτηση Wigner f_w (p,x) :

$$f_w(p,x) = \int \rho(x+\frac{n}{2}, x-\frac{n}{2})e^{-i(pn/\hbar)}dn \qquad (7.7)$$

Αυτή η συνάρτηση παράγεται θεωρώντας την ρ(x,x'), σαν μια συνάρτηση του (x+x΄)/2 και του (x-x΄)/2 . Σ'αυτή την περίπτωση γράφουμε το (x+x΄)/2 σαν x και κάνουμε μετασχηματισμό Fourier ως προς (x-x΄)/2 .

Για να δούμε, πως η εξίσωση (7.7) ικανοποιεί τις σχέσεις (7.6).

$$\int f_w(p,x)\frac{dp}{2\pi\hbar}=\int \rho(x+\frac{n}{2},x-\frac{n}{2})\left(\int e^{-i(pn/\hbar)}\frac{dp}{2\pi\hbar}\right)dn=$$

$$=\int \rho(x+\frac{n}{2},x-\frac{n}{2})\delta(n)dn=\rho(x,x)=P(x)$$

Παρατηρούμε από το αποτέλεσμα, ότι ικανοποιείται η δεύτερη εξίσωση από τις (7.6). Ακολούθως, με την βοήθεια των σχέσεων (7.2), (7.4) έχουμε :

$$P(p)=\rho(p,p)=\int \rho(x,x')e^{-(i/\hbar)p(x-x')}dxdx'=$$

$$\int \rho(y+\frac{n}{2},y-\frac{n}{2})e^{-ipn/\hbar}dydn=\int f_w(p,y)dy$$

όπου έχουμε κάνει τις εξής αλλαγές μεταβλητών :

$$x=y+\frac{n}{2}$$

$$x'=y-\frac{n}{2}$$

Από τις εξισώσεις (7.6) παρατηρούμε ότι, αν η $h(p,x)$ είναι είτε μια συνάρτηση μόνο του p είτε μια συνάρτηση μόνο του x, τότε :

$$\langle h(p,x)\rangle=\int f_w(p,x)h(p,x)\frac{dp}{2\pi\hbar}dx \qquad (7.8)$$

Όμως, η σχέση (7.8) δείχνει ότι δεν είναι αληθής για μια γενική συνάρτηση $h(p,x)$.

Μολονότι η συνάρτηση του Wigner $f_w(p,x)$ ικανοποιεί τις σχέσεις (7.6), δεν μπορεί να θεωρηθεί σαν η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στην θέση x και με ορμή p, γιατί η $f_w(p,x)$ μπορεί να γίνεται αρνητική για κάποιες τιμές των x και p.

8. ΑΝΑΠΤΥΓΜΑ ΔΙΑΤΑΡΑΧΩΝ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ

Όπως έχουμε αναφέρει, ο πίνακας πυκνότητας στην στατιστική μηχανική ικανοποιεί την εξίσωση :

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -H\rho \qquad (8.1)$$

Υπάρχουν πολύ λίγες Hamiltonians, για τις οποίες μπορεί να λυθεί η εξίσωση (8.1) επακριβώς. Η λύση επιτυγχάνεται επίσης με την θεωρία διαταραχών. Ας υποθέσουμε ότι το φυσικό σύστημα που μελετάμε, χαρακτηρίζεται από την Hamiltonian :

$$H = H_o + H_1 \qquad (8.2)$$

όπου H_o είναι η αδιατάρακτη Hamiltonian και H_1 η διαταραχή, υποθέτοντας ότι η H_1 είναι πολύ μικρή σε σύγκριση με την H_o , δηλαδή ισχύει: $H_1 << H_o$.

Για την αδιατάρακτη Hamiltonian η (8.1) γράφεται :

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial \beta} = -H_0\rho_0 \qquad (8.3)$$

Ο σκοπός μας είναι να βρούμε μια προσέγγιση του πίνακα πυκνότητας ρ, χρησιμοποιώντας τον ρ_o. Βέβαια, αναμένουμε ο ρ να είναι κοντά στον $\rho_o = e^{-\beta H_o}$. Άρα, αναμένουμε το $e^{\beta H_o}\rho$ να μεταβάλλεται πολύ αργά με το β, οπότε :

$$\frac{\partial}{\partial \beta}(e^{H_o\beta}\rho) = H_o e^{H_o\beta}\rho + e^{H_o\beta}\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = e^{H_o\beta}H_o\rho - e^{H_o\beta}H\rho = -e^{H_o\beta}H_1\rho \qquad (8.4)$$

Ολοκληρώνουμε την εξίσωση (8.4) από 0 μέχρι το β, χρησιμοποιώντας την γνωστή σχέση : $e^{H_o\beta}\rho = 1$, για β = 0. Επομένως:

$$\int_0^\beta \frac{\partial}{\partial \beta}[e^{H_o\beta}\rho(\beta)]d\beta = e^{H_o\beta}\rho(\beta)\,|_0^\beta = e^{H_o\beta}\rho(\beta) - 1$$

$$e^{H_o\beta}\rho(\beta) - 1 = -\int_0^\beta e^{H_o\beta'}H_1\rho(\beta')d\beta' \qquad (8.5)$$

Διαιρούμε την σχέση (8.5) με $e^{\beta H_o}$, οπότε παίρνουμε :

$$\rho(\beta) - \frac{1}{e^{\beta H_o}} = -\int_0^\beta \frac{e^{\beta' H_o}}{e^{\beta H_o}}H_1\rho(\beta')d\beta' \Leftrightarrow$$

$$\rho(\beta) = \rho_o(\beta) - \int_0^\beta \rho_o(\beta - \beta')H_1\rho(\beta')d\beta' \qquad (8.6)$$

Ο τελευταίος όρος της σχέσης (8.6) είναι μικρός εφόσον η διατάραξη H_1 είναι μικρή, οπότε αποτελεί έναν διορθωτικό όρο στην προσέγγιση της εξίσωσης $\rho \approx \rho_o$. Αν ο διορθωτικός όρος είναι μικρός, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μια προσέγγιση ρ(β΄) για να βρούμε μια πιο πολύ ακριβή προσέγγιση του ρ(β). Για παράδειγμα, αν κάνουμε την προσέγγιση $\rho(\beta') \approx \rho_o(\beta')$, τότε έχουμε :

$$\rho(\beta) = \rho_o(\beta) - \int_0^{\beta} \rho_o(\beta - \beta') H_1 \rho_o(\beta') d\beta' \qquad (8.7)$$

Με την βοήθεια της εξίσωσης (8.7) σαν μια νέα προσέγγιση του ρ(β΄), μπορούμε να βρούμε μια ακόμη καλύτερη προσέγγιση του ρ(β). Συνεχίζοντας με αυτό τον τρόπο παίρνουμε :

$$\begin{aligned} \rho(\beta) &= \rho_o(\beta) - \int_0^{\beta} d\beta' [\rho_o(\beta - \beta') H_1 \rho_o(\beta')] + \\ &+ \int_0^{\beta} d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' [\rho_o(\beta - \beta') H_1 \rho_o(\beta' - \beta'') H_1 \rho_o(\beta'')] - \\ &- \int_0^{\beta} d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' \int_0^{\beta''} d\beta''' [\ldots] + \ldots \end{aligned} \qquad (8.8)$$

Μπορούμε εύκολα να ξαναγράψουμε την εξίσωση (8.8) στην αναπαράσταση των θέσεων. Για παράδειγμα :

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; \beta) &= \langle x | \rho(\beta) | x' \rangle \approx \rho_o(x, x'; \beta) - \\ &- \int_0^{\beta} \langle x | \rho_o(\beta - \beta') \left(\int | x'' \rangle \langle x'' | dx'' \right) H_1 \rho_o(\beta') | x' \rangle d\beta' \end{aligned} \qquad (8.9)$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει την σχέση :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} | x'' \rangle \langle x'' | dx'' = 1$$

Αν $H_1 = V(x)$, τότε :

$$\langle x'' | H_1 \rho_o(\beta') | x' \rangle = V(x'') \rho_o(x'', x'; \beta')$$

οπότε η εξίσωση (8.9) γίνεται :

$$\rho(x, x'; \beta) = \rho_o(x, x'; \beta) - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{\beta} \rho_o(x, x''; \beta - \beta') V(x'') \rho_o(x'', x'; \beta') d\beta' dx'' + \ldots \qquad (8.10)$$

<u>ΑΝΑΦΟΡΕΣ</u>

1. Statistical Mechanics (A set of Lectures)
   “ R. P. Feynman “
2. Thermodynamics and Statistical Mechanics
   “ Greiner – Neise – Stocker “
3. Field Quantization
   „ Greiner R. „
4. Εισαγωγή στην Κβαντική Μηχανική
   « Κ. Ε. Βαγιονάκης »
5. Statistical Mechanics
   “ R. K. Pathria “
6. Physical Review A 67, 012107 (2003)
   “Ingemar Bengssson and Asa Ericsson”
7. The density matrix and density operator
   “ Mark Tuckerman “