الباب الحادي عشر

مؤثر الكثافة

(The density operator)

تعاملنا سابقاً مع حالات لأنظمة تتكون دوالها المميزة من دالة فريدة (نسميها حالة نقية pure state **) مثال على ذلك جسيم يتحرك داخل صندوق أحادي، ثنائي أو ثلاثي الأبعاد، الهزاز التوافقي، ذرة الهيدروجين، ألخ. ووجدنا أن دالة النظام تتكون من دوال تعتمد على الإحداثيات المستعملة ويمكن فصل متغيراتها. لكن إذا تصورنا أن النظام يوجد بداخل خزان يمثل مجال خارجي، حراري أو كهربائي أو مغناطيسي ألخ، سوف نجد أن دالة النظام لن نستطيع أن نضعها كحاصل ضرب دوال منفصلة من الإحداثيات والمجال الخارجي. في هذه الحالة تكون دوال النظام مختلطة، ولا نستطيع التمييز بينها، فكيف نتعامل مع هذه الأنظمة؟ وكيف نحدد أن هذا النظام يتكون من دوال نقية أو مختلطة (ممزوجة)** mixed state **؟ هذا هو الهدف من هذا الباب وهذا هو الهدف من تقديم وتعريف مؤثر الكثافة أو مؤثر الحالة.**

اعتبر الحالة العامة لنظام يتكون من عدد n من الدوال $|\psi_i\rangle$ المعيرة، وليست من الضروري متعامدة. مع تعريف القيمة المتوسطة (المتوقعة) لمؤثر $\hat{A}$ حينما يكون النظام في حالة محددة $|\psi_i\rangle$ بالقيمة A_i حيث

$$A_i = \langle \hat{A} \rangle_i = \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$$

هنا سوف نعرف قيمة متوقعة اخري وهي weighted average of $\langle \hat{A} \rangle_i$ وذلك عندما نتعامل مع فئة من الأنظمة تسمي ensemble **وهي مجموعة من الأنظمة المتشابهة:**

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i p_i A_i = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle.$$

حيث p_i هي احتمالية تواجد النظام بالحالة المعيرة $|\psi_i\rangle$، والتجميع هنا يكون على جميع المستويات المسموح بها في النظام. الاحتمالية الإحصائية p_i يجب أن تحقق العلاقات التالية:

$$0 \le p_i \le 1, \qquad \sum_i p_i = 1, \qquad \sum_i p_i^2 \le 1$$

الأن نستطيع أن نعرف مؤثر الكثافة، الذي يدل على أفضل “optimal” وصف للنظام، ويعرف بالمعادلة:

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

وله الخواص التالية:

1- $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$

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

3- في الحالات النقية نجد أن $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ و $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$.

4- في الحالات الممزوجة نجد أن $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) < 1$.

(The density operator)

5- القيم المميزة لمؤثر الكثافة λ_i تحقق العلاقة $0 \le \lambda_i \le 1$.
6- لأي مؤثر $\hat{A}$ نجد أن:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n | \hat{A} | \psi_i \rangle$$
$$= \sum_n \langle \varphi_n | \left[\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right] \hat{A} | \varphi_n \rangle = \sum_n \langle \varphi_n | \hat{\rho}\hat{A} | \varphi_n \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$$

قبل أن نبدأ في استعراض بعض الأمثلة دعونا ندرس نظام ذو حالة لها دالة وحيدة $\langle \psi |$ ومفكوكها مع قواعدها هو:

$$|\psi\rangle = c_1 |u_1\rangle + c_2 |u_2\rangle + \cdots + c_n |u_n\rangle$$

ومنها نستطيع أن نحسب مصفوفة الكثافة بالشكل:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 |u_i\rangle\langle u_i| + \sum_{i \ne j}^{n} c_i c_j^* |u_i\rangle\langle u_j|$$

لنجد أن مصفوفة الكثافة قد انقسمت إلي حدين، الحد الأول منها يعطي:

$$\langle u_i | \hat{\rho} | u_i \rangle = |c_i|^2$$

وهو يمثل العناصر القطرية لمصفوفة الكثافة، ويعطي احتمالية تواجد الجسيم في الحالة $|u_i\rangle$.

لكي نعلم المعنى الفيزيائي للحد الثاني، دعونا نستخدم التعريف المركب التالي:

$$c_i = |c_i| e^{i\varphi_i}$$

ومن هذا التعريف نجد أن:

$$\langle u_i | \hat{\rho} | u_j \rangle = c_i c_j^* e^{i \overbrace{(\varphi_i - \varphi_j)}^{\text{Phase difference}}}$$

حيث يعبر الفرق الطوري [Phase difference $(\varphi_i - \varphi_j)$] عن مدى الترابط أو مقدرة تداخل الحدود مع بعضها البعض في هذه الحالة. هذه الخاصية هي إحدى خواص النظام الكمي النقي والتي تتمثل بالعناصر غير القطرية لمصفوفة الكثافة. لا تظهر هذه الحدود بمصفوفة الكثافة في الحالات المختلطة ويكون النظام تقليدي.

لذلك فإن العناصر غير القطرية بمصفوفة الكثافة تكون أصفاراً بالمستويات المختلطة، ولها قيم بالمستويات النقية. لا حظ أيضاً أن العناصر غير القطرية بمصفوفة الكثافة تعتمد على مركبات الدالة. وللتأكد من نقاء الحالة يجب أن نتأكد من أن $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$.

نعرف هنا أيضاً الحالة المختلطة التامة، وهي الحالة التي يكون احتمالية تواجد الجسيم بأي مستوي متساوية. مثال على ذلك مصفوفة الكثافة:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

تمثل حالة تامة الاختلاط حيث نجد أن النظام له احتمالية وجودة 50% إما بالمستوى $\langle 0|$ أو المستوى $|1\rangle$.

(The density operator)

واجب منزلي: للحالة $|\psi\rangle \equiv a_1|\alpha\rangle + a_2|\beta\rangle$ مع الشرط $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$ تحقق من التالي:

$$\hat{\rho} = \left(a_1|\alpha\rangle + a_2|\beta\rangle\right)\left(a_1^*\langle\alpha| + a_2^*\langle\beta|\right)$$

$$= \begin{pmatrix} |a_1|^2 & a_1 a_2^* \\ a_2 a_1^* & |a_2|^2 \end{pmatrix}$$

مثال: كون مصفوفة الكثافة لجسيم مستقطب بحيث أن اتجاه حركته المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور Z، ومنها احسب كل من $\langle \hat{s}_x \rangle$ و $\langle \hat{s}_y \rangle$ و $\langle \hat{s}_z \rangle$ و $\langle\alpha|\hat{\rho}|\alpha\rangle$ و $\langle\beta|\hat{\rho}|\beta\rangle$.

الحل: حيث أن الجسيم مستقطب بحيث أن اتجاه حركته المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور Z فإن دالة هذا الجسيم هي $\alpha \equiv |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ وتكون دالة نقية. لذلك نجد أن مصفوفة الكثافة:

$$\hat{\rho} = |+\rangle\langle+| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

لاحظ هنا أن $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ و $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ حيث أن الدالة نقية.

ومن مصفوفة الكثافة نجد التالي:

$$\langle \hat{s}_x \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_x\right) = \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{s}_y \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_y\right) = \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_z\right) = \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2};$$

$$\langle\alpha|\hat{\rho}|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1;$$

$$\langle\beta|\hat{\rho}|\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0;$$

وكما هو متوقع فإن القيمة المتوقعة الوحيدة هي $\langle \hat{s}_z \rangle$ باتجاه المحور الموجب Z .

مثال: كون مصفوفة الكثافة لجسيم مستقطب بحيث أن اتجاه حركته المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور X. ومنها احسب كل من $\langle \hat{s}_x \rangle$ و $\langle \hat{s}_y \rangle$ و $\langle \hat{s}_z \rangle$ و $\langle +_x | \hat{\rho} | +_x \rangle$.

الحل: حيث أن الجسيم مستقطب بحيث أن اتجاه حركته المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور X فإن دالة هذا الجسيم هي $|+_x\rangle$ وتكون حالة نقية. يمكن وضع الدالة $|+_x\rangle$ بدلالة القواعد α و β بالشكل:

$$|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

لذلك نجد أن مصفوفة الكثافة:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\alpha+\beta\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}\langle \alpha+\beta| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}$$

لاحظ هنا أن العناصر غير القطرية لمصفوفة الكثافة غير منعدمة وأن $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ و $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ حيث أن الدالة نقية .

ومن مصفوفة الكثافة نجد التالي:

$$\langle \hat{s}_x \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_x\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2};$$

$$\langle \hat{s}_y \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_y\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}i & -i\\i & -i\end{pmatrix} = 0;$$

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_z\right) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}1 & -1\\1 & -1\end{pmatrix} = 0;$$

$$\langle +_x | \hat{\rho} | +_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\\2\end{pmatrix} = 1$$

واجب منزلي: تحقق من العلاقة $\hat{\rho} = \hat{\rho}^2$ لهذا المثال.

مثال: كون مصفوفة الكثافة لجسيمات 50% منها اتجاه حركتها المغزلية تأخذ الاتجاه الموجب للمحور Z و50% الأخرى تأخذ الاتجاه السالب للمحور Z . ومنها احسب كل من $\langle \hat{s}_x \rangle$ و $\langle \hat{s}_y \rangle$ و $\langle \hat{s}_z \rangle$.

الحل: هذه حالة ممزوجة من جسيمات نصفها اتجاه حركته المغزلية لأعلى والنصف الأخر اتجاه حركته المغزلية لأسفل.

تأخذ مصفوفة الكثافة للنظام الشكل:

$$\hat{\rho} = \left(\tfrac{1}{2}|+\rangle\langle+|\right) + \left(\tfrac{1}{2}|-\rangle\langle-|\right) = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} + \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}$$

$$= \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\hat{\text{I}}$$

لاحظ هنا أن العناصر غير القطرية لمصفوفة الكثافة منعدمة وأن $\hat{\rho}^2 = \dfrac{1}{2}\hat{\rho} \neq \hat{\rho}$ ، حيث أن الدالة ممزوجة .

$$\langle \hat{s}_x \rangle = \text{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_x\right) = \text{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\text{Tr}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{s}_y \rangle = \text{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_y\right) = \text{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\text{Tr}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \text{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{s}_z\right) = \text{Tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\times\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{4}\text{Tr}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} = 0$$

ملحوظة: نجد أن مصفوفة الكثافة السابقة يمكن وضعها أيضاً بصيغ عديدة مختلفة، منها على سبيل المثال:

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}|+_x\rangle + \frac{1}{2}|-_x\rangle$$

ماذا تعني هذا الصيغة لنا؟ هذه الصيغة تعني أيضاً أن 50% من الجسيمات تأخذ اتجاه $|+_x\rangle$ و50 % تأخذ اتجاه $|-_x\rangle$. هذا يعني أن الجسيمات لها اتجاهات مغزلية عشوائية وتتحرك في جميع الاتجاهات، ونحن نجهل اتجاهها.

مثال: إذا علم أن الهملتونيان لجسيم مغزلة في مجال مغناطيسي خارجي ثابت B_z باتجاه المحور Z يعرف بالمعادلة:

$$\hat{H} = -\gamma B_z S_z$$

(The density operator)

حيث γ ثابت.

أ- اوجد الدالة بتغير الزمن.

ب- إذا تم قياس S_x عند الزمن t، فما هو احتمال الحصول على $\pm\frac{\hbar}{2}$؟

ت- إذا تم قياس S_z عند الزمن t، فما هو احتمال الحصول على $\pm\frac{\hbar}{2}$؟

الحل:

أ- إذا علمنا أن الجسيم عند بداية الحركة يعرف بالدالة المميزة $\left|+_x\right\rangle$ حيث:

$$\left|\psi(0)\right\rangle = \left|+_x\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\right\rangle + \left|-\right\rangle\right)$$

فإن تأثير الهملتونيان على كل جزء من هذه الدالة هو:

$$\hat{H}\left|+\right\rangle = -\gamma B_z S_z\left|+\right\rangle = -\gamma B_z\frac{\hbar}{2}\left|+\right\rangle = E_+\left|+\right\rangle, \qquad E_+ = -\gamma B_z\frac{\hbar}{2},$$

$$\hat{H}\left|-\right\rangle = -\gamma B_z S_z\left|-\right\rangle = -\gamma B_z\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\left|-\right\rangle = E_-\left|-\right\rangle, \qquad E_- = \gamma B_z\frac{\hbar}{2}$$

بالتالي فإن التطور الزمني للدالة تحت تأثير هذا الهملتونيان هو:

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_+t/\hbar}\left|+\right\rangle + e^{-iE_-t/\hbar}\left|-\right\rangle\right)$$

ث- احتمال الحصول على $\frac{\hbar}{2}$ باتجاه المحور الموجب X يحسب من العلاقة $\left\langle +_x \middle| \psi(t)\right\rangle$. ولحساب هذه العلاقة يجب أن نحسب القيم التالية:

$$\left\langle + \middle| \psi(t)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_+t/\hbar}\left\langle + \middle| + \right\rangle + e^{-iE_-t/\hbar}\left\langle + \middle| - \right\rangle\right)$$

$$= \frac{e^{-iE_+t}}{\sqrt{2}} = \frac{e^{-i\gamma B_z t/2}}{\sqrt{2}}$$

$$\left\langle - \middle| \psi(t)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_+t/\hbar}\left\langle - \middle| + \right\rangle + e^{-iE_-t/\hbar}\left\langle - \middle| - \right\rangle\right)$$

$$= \frac{e^{-iE_-t}}{\sqrt{2}} = \frac{e^{i\gamma B_z t/2}}{\sqrt{2}}$$

والآن نحسب السعة:

$$\langle +_x |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle +| + \langle -|\right)|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle +|\psi(t)\rangle + \langle -|\psi(t)\rangle\right)$$
$$= \cos\left(\frac{\gamma B_z t}{2}\right)$$

والاحتمالية:

$$\left|\langle +_x |\psi(t)\rangle\right|^2 = \cos^2\left(\frac{\gamma B_z t}{2}\right)$$

وبنفس الطريقة نحصل على:

$$\langle -_x |\psi(t)\rangle = i\,\sin\left(\frac{\gamma B_z t}{2}\right) \quad \Rightarrow \quad \left|\langle -_x |\psi(t)\rangle\right|^2 = \sin^2\left(\frac{\gamma B_z t}{2}\right)$$

وهذه النتيجة تعتبر مشوقة حيث وجدنا أن الاحتمالية تتذبذب مع الزمن.

ت- لحساب القيم $\left|\langle \pm_x |\psi(t)\rangle\right|^2$ **فقد تم حساب القيم** $\left|\langle \pm|\psi(t)\rangle\right|^2 = \frac{1}{2}$ **وهي قيم احتمالية متوقعة للحصول على** $\pm\frac{\hbar}{2}$ **عند قياسنا** S_z**.**

(The density operator)

تمارين عامة

-1

H.W. If the density operator for the spin ½ particles is:

$$\hat{\rho}=c_o\hat{\text{I}}+c_1\hat{s}_x+c_2\hat{s}_y+c_3\hat{s}_z$$

with $\hat{\text{I}}$ **is the unit** 2×2 **matrix and** c_i **are constants, prove that:**

$$\hat{\rho}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}+\langle\hat{s}_x\rangle & \langle\hat{s}_X\rangle-i\langle\hat{s}_y\rangle \\ \langle\hat{s}_x\rangle+i\langle\hat{s}_y\rangle & \frac{1}{2}-\langle\hat{s}_z\rangle\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\hat{\text{I}}+2\langle\hat{\text{s}}\rangle.\hat{\text{s}}=\frac{1}{2}\left[\hat{\text{I}}+\langle\hat{\sigma}\rangle.\hat{\sigma}\right]$$

and $\hat{\sigma}$ **are the Pauli's matrices.**

1- اثبت أنه للمستويات المختلطة

$$\frac{d\,\hat{\rho}}{dt}=-\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H}\,,\hat{\rho}\right]\right\rangle$$

2- إذا علم أن

$$\hat{H}=-\mu\cdot\boldsymbol{B}=-\mu B\,\hat{\sigma}_z=-\mu B\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

أوجد $\langle\hat{\sigma}_z\rangle$.

الحل: نبدأ بالمعادلة:

$$e^{-\beta\hat{H}}=e^{-\mu B\,\hat{\sigma}_z}=\hat{1}+(\beta\mu B)\hat{\sigma}_z+\frac{1}{2!}(\beta\mu B)^2\hat{\sigma}_z^2+\frac{1}{3!}(\beta\mu B)^3\hat{\sigma}_z^3+\cdots$$

$$=\hat{1}\left(1+\frac{1}{2!}(\beta\mu B)^2+\cdots\right)+\hat{\sigma}_z\left((\beta\mu B)+\frac{1}{3!}(\beta\mu B)^3+\cdots\right)$$

$$=\hat{1}\cosh(\beta\mu B)+\hat{\sigma}_z\,\sinh(\beta\mu B)$$

$$=\begin{pmatrix}\cosh(\beta\mu B) & 0\\ 0 & \cosh(\beta\mu B)\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\sinh(\beta\mu B) & 0\\ 0 & -\sinh(\beta\mu B)\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}e^{\beta\mu B} & 0\\ 0 & e^{-\beta\mu B}\end{pmatrix}$$

من التعريف $\hat{\sigma}_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

من السهل اثبات أن:

$$\hat{\sigma}_z^2 = \hat{\sigma}_z^4 = \hat{\sigma}_z^6 = \cdots = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1},$$

$$\hat{\sigma}_z^3 = \hat{\sigma}_z^5 = \hat{\sigma}_z^7 = \cdots = \hat{\sigma}_z ,$$

ومنه نجد:

$$\mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{H}}) = e^{\beta\mu B} + e^{-\beta\mu B} = 2\cosh(\beta\mu B)$$

$$\Rightarrow \hat{\rho} = \frac{1}{2\cosh(\beta\mu B)}\begin{pmatrix} e^{\beta\mu B} & 0 \\ 0 & e^{-\beta\mu B} \end{pmatrix}$$

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{\sigma}_z\right) = \frac{1}{2\cosh(\beta\mu B)}\mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix} e^{\beta\mu B} & 0 \\ 0 & e^{-\beta\mu B} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right)$$

$$= \frac{1}{2\cosh(\beta\mu B)}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} e^{\beta\mu B} & 0 \\ 0 & -e^{-\beta\mu B} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{e^{\beta\mu B} - e^{-\beta\mu B}}{2\cosh(\beta\mu B)} = \frac{2\sinh(\beta\mu B)}{2\cosh(\beta\mu B)} = \tanh(\beta\mu B)$$