

## تعمیم معادله جازینسکی برای سیستمی با دمای متغیر

سمیه زارع، زهرا عبادی و بهروز میرزا

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

(دریافت مقاله: ۸۶/۱۲/۲۲؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۷/۱۱/۲۰)

### چکیده

اخیراً معادله جازینسکی مورد توجه زیادی قرار گرفته است. در این معادله ارتباطی بین میانگین تابع نمایی کار انجام شده روی سیستم تحت شرایط غیر تعادلی و تفاوت انرژی آزاد تعادلی برقرار می‌شود. در مقالات گوناگون این معادله را به شرایط متفاوتی تعمیم داده‌اند. ما در این مقاله معادله جازینسکی را به وضعیتی تعمیم می‌دهیم که علاوه بر انجام کار طی یک فرآیند غیر تعادلی، دمای سیستم نیز متغیر باشد. سپس این رابطه تعمیم یافته را برای نوسانگر هماهنگ کلاسیکی و همچنین کوانتومی یک بعدی به کار می‌بریم.

واژه‌های کلیدی: معادله جازینسکی، مکانیک آماری غیر تعادلی

### ۱. مقدمه

بسیاری از فرآیندهایی که در طبیعت اتفاق می‌افتند غیر تعادلی‌اند. این‌گونه فرآیندها را نمی‌توان بر طبق قوانین ترمودینامیک کلاسیک توصیف کرد. خواص افت و خیزی سیستم‌های فیزیکی غیر تعادلی اهمیت زیادی در مکانیک آماری دارند. پیشرفت‌های اخیر در این زمینه، به نتایج و نظریه‌های دقیقی منجر شده که به نظریه‌های افت و خیزی معروفند. این نظریه‌ها به ما این امکان را می‌دهند که خواص آنسامبلی تعادلی یک سیستم دینامیکی را به تحول آن تحت شرایط غیر تعادلی، ارتباط دهیم. این نظریه‌ها شامل نظریه‌های تولید آنتروپی [۱]، معادله جازینسکی [۲، ۳، ۴]، معادله کروکس [۵، ۶]، تساوی هاتانو- ساسا [۷] و... است. معادله جازینسکی یا قضیه کار غیر تعادلی، میانگین نمایی کار انجام شده روی یک سیستم را که لازم است تا سیستم را از وضعیت تعادلی A طی یک فرآیند غیر تعادلی و در دمای ثابت، به وضعیت تعادلی B برساند، به تفاوت انرژی آزاد تعادلی بین این دو حالت ارتباط می‌دهد.

$$\langle \exp(-\beta W) \rangle = \exp(-\beta \Delta F), \quad (1)$$

که در آن،  $\beta = \frac{1}{K_B T}$ ، ثابت بولتزمن، T دمای مطلق سیستم و  $\Delta F = F(B) - F(A)$  تفاوت انرژی آزاد بین دو حالت تعادلی سیستم می‌باشد. در ضمن W کاری است که در طول یک فرآیند غیر تعادلی از A به B انجام می‌شود و به صورت تغییر هامیلتونی سیستم بین این دو وضعیت تعریف می‌شود:

$$W = H(B) - H(A), \quad (2)$$

از آنجا که این سیستم تحت معادلات معین هامیلتونی از لحظه اولیه تا لحظه نهایی تحول می‌یابد، یک کپی داده شده از سیستم به طور یکتا توسط یک مختصات اولیه مشخص تعیین می‌شود. بنابراین منظور از عبارت  $\langle \exp(-\beta W) \rangle$  در معادله جازینسکی، میانگین‌گیری روی یک آنسامبل از مجموعه آماری از چنین سیستمی است که فرآیندی که در بالا توضیح داده شد، روی آن اعمال شده باشد یا در واقع انتگرال‌گیری روی مسیری است که حالت اولیه سیستم در آنها از توزیع کانونیک

کوانتومی [۱۴ - ۱۸] و سیستمهای اتلافی در حالت مانا تعمیم داد [۱۲ و ۱۹ و ۲۰].

در ضمن معادله جازینسکی به طور آزمایشگاهی نیز بررسی شده است و می توان از این معادله برای تعیین تفاوت انرژی آزاد در آزمایشها استفاده کرد. اولین بررسی آزمایشگاهی معادله جازینسکی توسط لیفارت و همکارانش انجام شده که در آن کار برگشت ناپذیر انجام شده را برای کشش یک مولکول منفرد RNA اندازه گیری کرده اند [۲۱].

در مرجع [۱۷] یک روش واحد و ساده برای استخراج قضیه کار در مورد سیستمهایی که با یک منبع گرمایی در تماس هستند اعم از کوانتومی و کلاسیکی، تحت شرایط تعادلی و حالت مانا ارائه شده و با استفاده از این روش می توان معادله جازینسکی و نظریه های افت و خیزی را به دست آورد. در قسمت دیگری از این مقاله با استفاده از این فرض که سیستم و منبع گرمایی در ابتدا در دماهای متفاوتی قرار داشته باشند، به رابطه تعمیم یافته جازینسکی برای چنین سیستمی رسیده است:

$$\langle \exp(-\beta_s W - (\beta_s - \beta) Q) \rangle_{\rho} = \frac{Z_{\beta_s}}{Z_{\beta}} \quad (6)$$

در این رابطه  $W$  کل کاری است که روی سیستم انجام می شود،  $Q$  گرمای داده شده به سیستم،  $\beta_s$  دمای اولیه سیستم و  $\beta$  دمای منبع است. در استخراج معادله جازینسکی فرض بر این بوده که سیستم ابتدا در تماس با یک منبع گرمایی در دمای  $T$  قرار داشته، سپس از آن منبع جدا می شود و در حالی که کار روی سیستم انجام می شود، هیچ مبادله گرمایی هم با محیط صورت نمی گیرد.

در موردی که دمای سیستم با زمان تغییر می کند (در اثر تغییر دمای منبع) و کار روی آن انجام نمی گیرد، رابطه تعمیم یافته ای به صورت

$$\exp(-\Delta(\beta F)) = \langle \exp(-\int dt E(t) \dot{\beta}) \rangle, \quad (7)$$

برای سیستم کلاسیک به دست آمده [۸] که حالت خاصی از رابطه تعمیم یافته ای است که ما آن را به روش دیگری به دست می آوریم.

$$P^{eq}(\Gamma_0) = \frac{1}{Z_0} \exp(-\beta H(\Gamma_0, 0)), \quad (3)$$

پیروی کند.  $Z_0$  و  $H_0$  به ترتیب تابع پارش و هامیلتونی سیستم در وضعیت اولیه هستند.  $\Gamma_0$  متغیرهای فضای فاز یعنی  $p$  و  $q$  را در لحظه شروع مشخص می کند.

### ۱.۱. مروری بر اثبات معادله جازینسکی

سیستمی را در تعادل گرمایی با یک منبع در دمای  $T$  در نظر می گیریم. با انجام کار طی یک فرآیند غیر تعادلی وضعیت سیستم تغییر می کند و بعد از آن سیستم به حالت تعادل جدید می رسد. به دلیل اینکه کار غیر تعادلی انجام شده به مسیر بستگی دارد، میانگین  $e^{-\beta W}$  را با توجه به تابع توزیع اولیه سیستم روی تمام مسیرهای ممکن به دست می آوریم. با توجه به تعریف میانگین داریم:

$$\begin{aligned} \langle \exp(-\beta W) \rangle &= \int d\Gamma_0 P^{eq}(\Gamma_0) \exp(-\beta W) \\ &= \frac{1}{Z_0} \int d\Gamma_0 \exp(-\beta H(\Gamma_0, 0)) \exp(-\beta W) \\ &= \frac{1}{Z_0} \int d\Gamma_t \exp(-\beta H(\Gamma_t, t)) \\ &= \frac{1}{Z_0} \int d\Gamma_t \exp(-\beta H(\Gamma_t, t)) = \frac{Z_t}{Z_0}. \end{aligned} \quad (4)$$

در مراحل بالا، از تعریف کار و همچنین تساوی  $d\Gamma_0 = d\Gamma_t$  (بنا به قضیه لیوویل) استفاده شده است.

تابع پارش به صورت  $Z = e^{-\beta F}$  تعریف می شود، بنابراین:

$$\langle \exp(-\beta W) \rangle = \exp(-\beta \Delta F), \quad (5)$$

جازینسکی در اولین مقاله خود این رابطه را برای مجموعه ای از ذرات که بر اساس قوانین مکانیک نیوتنی رفتار می کنند به دست آورده است [۲]. این معادله، اکنون در مطالعات عددی [۸] و آزمایشگاهی نه فقط در فیزیک، بلکه در شیمی و زیست شناسی هم به کار می رود [۹ و ۱۰ و ۱۱].

علاوه بر آن جازینسکی نشان داده که این رابطه در دینامیکهای مختلفی مثل دینامیک مونت کارلو، دینامیک نوز-هورر، دینامیک تصادفی از نوع لانژوین [۱۲] یا از نوع مارکوفین [۶]، دینامیک جفت شده با انواع مختلف ترموستا [۱۳] قابل اثبات است و نیز می توان این رابطه را به سیستمهای

$$\langle \rho_0^{-1}(\Gamma_0) \rho_t(\Gamma_t) \rangle_{\rho_0} = 1. \quad (12)$$

با توجه به تعریف تابع توزیع در رابطه (۸) و تعریف انرژی آزاد هلمولتز در لحظه  $t$ :

$$F_t = -\frac{1}{\beta_t} \ln Z_t, \quad (13)$$

خواهیم داشت:

$$\langle \exp(\beta_0 H(\Gamma_0, 0)) \exp(-\beta_t H(\Gamma_t, t)) \rangle_{\rho_0} = \exp(-\Delta(\beta F)) \quad (14)$$

که در آن:

$$\Delta(\beta F) = \beta_t F_t - \beta_0 F_0. \quad (15)$$

اگر کاری که روی یک سیستم کلاسیکی انجام می شود را به صورت  $W = H(\Gamma_t, t) - H(\Gamma_0, 0)$  در نظر بگیریم رابطه (۱۴) به شکل زیر نوشته می شود:

$$\langle \exp(\beta_t W + (\beta_t - \beta_0) H_0) \rangle = \exp(-\Delta(\beta F)) \quad (16)$$

### ۳. بررسی کلاسیکی رابطه (۱۴)

می دانیم که مشتق زمانی هر تابع  $A(\Gamma_t, t)$  به صورت

$$\frac{d}{dt} A(\Gamma_t, t) = \frac{\partial}{\partial t} A(\Gamma_t, t) + \{A(\Gamma_t, t), H(\Gamma_t, t)\} \quad (17)$$

است و {...} نشان دهنده کروشه پواسن است، که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\{A(\Gamma_t, t), H(\Gamma_t, t)\} = \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (18)$$

$i$  نشان دهنده تعداد درجات آزادی سیستم است. اگر از رابطه (۱۷) روی  $dt$  انتگرال گیری کنیم خواهیم داشت:

$$A(\Gamma_t, t) - A(\Gamma_0, 0) = \int_0^t dA(\Gamma_t, t) = \int_0^t dt' \frac{\partial}{\partial t'} A(\Gamma_{t'}, t') + \int_0^t dt' \{A(\Gamma_{t'}, t'), H(\Gamma_{t'}, t')\} \quad (19)$$

ما در این رابطه  $A(\Gamma_t, t)$  را به صورت  $A(\Gamma_t, t) = \beta_t H(\Gamma_t, t)$  تعریف می کنیم و با توجه به صفر بودن کروشه پواسن داریم:

$$\beta_t H(\Gamma_t, t) - \beta_0 H(\Gamma_0, 0) = \int_0^t dt' \beta_{t'} \frac{\partial}{\partial t'} H(\Gamma_{t'}, t') + \int_0^t dt' \dot{\beta}_{t'} H(\Gamma_{t'}, t'), \quad (20)$$

در این مقاله، رابطه تعمیم یافته‌ای را برای سیستمی با دمای متغیر و تحت تأثیر کار غیر تعادلی به دست می آوریم. در این وضعیت طی یک فرآیند غیر تعادلی، سیستم از حالت تعادل  $A$  در زمان  $t=0$  به حالت تعادلی  $B$  در زمان  $t=\tau$  برده می شود و در عین حال، تغییر دمای سیستم نیز اتفاق می افتد. سپس با توجه به تعریف کلی که برای تغییرات یک تابع نسبت به زمان داریم، این رابطه تعمیم یافته را به دو صورت کلاسیکی و کوانتومی به دست می آوریم. و به عنوان مثال اعتبار هر دو صورت آن را برای یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی که نقطه تعادل و دمای آن با زمان تغییر می کند بررسی می کنیم.

### ۲. معادله تعمیم یافته جازینسکی برای سیستمی با دمای متغیر

یک سیستم با هامیلتونی  $H(p_t, q_t, t)$  و دمای معکوس  $\beta_t$  در نظر می گیریم که  $p_t, q_t$  متغیرهای فضای فاز هستند و آنها را با  $\Gamma_t$  نشان می دهیم. هامیلتونی این سیستم به طور صریح به زمان وابسته است. این سیستم را در تماس با یک منبع گرمایی با دمای متغیر قرار می دهیم و سپس طی یک فرآیند غیر تعادلی آن را از حالت تعادل  $A$  در زمان  $t=0$  به حالت تعادلی  $B$  در زمان  $t=\tau$  می بریم. با فرض اینکه دمای چنین سیستمی با زمان تغییر می کند، می توان تابع توزیع آن را در هر لحظه به صورت زیر نوشت:

$$\rho_t(\Gamma_t, t) = \frac{1}{Z_t} \exp(-\beta_t H(\Gamma_t, t)), \quad (8)$$

که در آن

$$Z_t = \int d\Gamma_t \exp(-\beta_t H(\Gamma_t, t)), \quad (9)$$

تابع پارش سیستم در لحظه  $t$  می باشد. با توجه به برقراری رابطه زیر:

$$\int d\Gamma_0 \rho_0(\Gamma_0) \rho_0^{-1}(\Gamma_0) \rho_t(\Gamma_t) = \int d\Gamma_t \rho_t(\Gamma_t) = 1, \quad (10)$$

که در آن از تساوی  $d\Gamma_0 = d\Gamma_t$  (بنا به قضیه لیوویل) استفاده شده است و با در نظر گرفتن تعریف میانگین به صورت

$$\int d\Gamma_0 \rho_0(\Gamma_0) \dots \equiv \langle \dots \rangle_{\rho_0}, \quad (11)$$

می توان تساوی زیر را نوشت [۱۷]:

$$p_t = p_0 \cos(\omega_0 t) - \omega_0 q_0 \sin(\omega_0 t) + \frac{\chi}{\omega_0^2 \tau} [1 - \cos(\omega_0 t)] \quad (25\text{-ب})$$

این مسئله در مرجع [۲۲] بدون در نظر گرفتن تغییر دما و به صورت کلاسیکی بررسی شده است. برای بررسی صحت رابطه (۲۱) نیاز به محاسبه  $H_t$  داریم، بنابراین با جایگذاری روابط (۲۵-الف) و (۲۵-ب) در رابطه (۲۳) خواهیم داشت:

$$H_t = \frac{p_0^2}{2} + \frac{\omega_0^2 q_0^2}{2} - \frac{\chi^2 t^2}{2 \omega_0^2 \tau^2} + \left( -\frac{\chi^2}{\omega_0^2 \tau^2} - \frac{\chi q_0}{\omega_0^2 \tau} \right) (1 - \cos \omega_0 t) - \frac{\chi q_0}{\omega_0 \tau} \sin \omega_0 t \quad (26)$$

با توجه به اینکه رابطه (۲۰) برای این نوسانگر به صورت زیر در می آید:

$$\beta_\tau H(\Gamma_\tau, \tau) - \beta_0 H(\Gamma_0, 0) = \int_0^\tau dt (\beta_0 + \frac{\varepsilon}{\tau} t) \frac{\partial}{\partial t} H(\Gamma_t, t) + \frac{\varepsilon}{\tau} \int_0^\tau dt H(\Gamma_t, t), \quad (27)$$

با جایگذاری  $H_t$  از رابطه (۲۶) در عبارت بالا داریم:

$$\beta_\tau H(\Gamma_\tau, \tau) - \beta_0 H(\Gamma_0, 0) = \frac{-\chi^2}{2\omega_0^2} \beta_\tau + \varepsilon H(\Gamma_0, 0), \quad (28)$$

بنابراین میانگین گیری در رابطه (۲۱) با کمک روابط (۲۸) و (۱۱) به صورت زیر در می آید:

$$\begin{aligned} < \exp(\frac{\chi^2}{2\omega_0^2} \beta_\tau - \varepsilon H(\Gamma_0, 0)) >_\rho \\ &= \frac{1}{Z_0} \int d\Gamma_0 \exp(-\beta_0 H(\Gamma_0, 0)) \exp((\frac{\chi^2}{2\omega_0^2} \beta_\tau - \varepsilon H(\Gamma_0, 0))) \\ &= \frac{1}{Z_0} \int d\Gamma_0 \exp(-\beta_0 H(\Gamma_0, 0)) \exp(\frac{\chi^2}{2\omega_0^2} \beta_\tau) \\ &= \frac{\beta_0}{\beta_\tau} \exp(\frac{\chi^2}{2\omega_0^2} \beta_\tau) = \frac{\beta_0}{\beta_\tau} \exp(-W \beta_t), \end{aligned} \quad (29)$$

در این محاسبه از

$$Z_0 = \int d\Gamma_0 \exp(-\beta_0 H(\Gamma_0, 0)) = \frac{2\pi}{\beta_0 \omega_0} \quad (30)$$

استفاده کرده ایم. با توجه به اینکه تابع پارش نوسانگر در لحظه  $t = \tau$  عبارت است از:

$$Z_\tau = \int d\Gamma_\tau \exp(-\beta_\tau H(\Gamma_\tau, \tau)) = \frac{2\pi}{\beta_\tau \omega_0} \exp(-\frac{\chi^2}{2\omega_0^2}), \quad (31)$$

و از طرفی رابطه بین انرژی آزاد هلمولتز و تابع پارش  $Z = e^{-\beta F}$  می باشد، داریم:

بنابراین رابطه (۱۴) به صورت زیر

$$< \exp(\int_0^t dt' \dot{\beta}_{t'} H(\Gamma_{t'}, t') - \int_0^t dt' \beta_{t'} \frac{\partial}{\partial t'} H(\Gamma_{t'}, t')) > = \exp(-\Delta(\beta F)) \quad (21)$$

تبدیل می شود. اگر هامیلتونی وابستگی صریح به زمان نداشته باشد رابطه بالا به صورت  $< \exp(-\int_0^t dt' \dot{\beta}_{t'} H(\Gamma_{t'}, t')) > = \exp(-\Delta(\beta F))$  در می آید که در مرجع [۸] از طریق دیگری به دست آمده است.

#### ۴. نوسانگر هماهنگ یک بعدی

در این قسمت درستی و اعتبار رابطه (۲۱) را در مورد یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی با جرم واحد که نقطه تعادل و دمای آن با زمان تغییر می کند، بررسی می کنیم. هامیلتونی خالص یا مختل نشده این نوسانگر را به صورت زیر می نویسیم:

$$H_0(\Gamma_t, t) = \frac{p_t^2}{2} + \frac{\omega_0^2 q_t^2}{2}, \quad (22)$$

اگر یک اختلال را به صورت  $\frac{-\chi t}{\tau} q$  در نظر بگیریم که نشان دهنده نیروی است که در جهت  $q$  به این نوسانگر اعمال می شود، هامیلتونی مختل شده یا هامیلتونی کل نوسانگر به این شکل خواهد بود:

$$H_t = H_0(t) - \frac{\chi t}{\tau} q(t), \quad (23)$$

که در آن  $\chi$  یک ثابت است،  $\tau$  کل مدت زمانی است که این نیرو به نوسانگر اعمال می شود و برای سادگی می توان آن را دوره تناوب نوسانگر مختل نشده یعنی  $\tau = \frac{2\pi}{\omega_0}$  در نظر گرفت.

در ضمن فرض می کنیم که بسامد نوسانگر بدون تغییر و همان  $\omega_0$  باقی بماند و معکوس دمای نوسانگر به صورت  $\beta_t = \beta_0 + \frac{\varepsilon}{\tau} t$  تغییر کند. با حل معادلات کانونیک حرکت که به صورت

$$\dot{p} = -\omega_0^2 q + \frac{\chi t}{\tau}, \quad (24)$$

می باشند، خواهیم داشت:

$$\dot{q} = p,$$

$$q_t = q_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{p_0}{\omega_0} \sin(\omega_0 t) + \frac{\chi}{\omega_0^2 \tau} [\omega_0 t - \sin(\omega_0 t)] \quad (25\text{-الف})$$

$$\begin{aligned}
& \langle \exp(\beta_0 H(\Gamma_0, \cdot)) \exp(-\beta_t H(\Gamma_t, t)) \rangle_\rho \\
&= \sum_n p_n^{(0)} \sum_m W_{mn} \exp(\beta_0 E_n^{(0)} - \beta_t E_m^{(1)}) \\
&= \exp(\beta_0 F_0) \sum_{n,m} \exp(-\beta_0 E_n^{(0)}) \\
&\quad \times \langle \psi_m^{(1)} | U(\tau) | \psi_n^{(0)} \rangle \exp(\beta_0 E_n^{(0)} - \beta_t E_m^{(1)}) \\
&= \exp(\beta_0 F_0) \\
&\quad \times \sum_{n,m} \langle \psi_m^{(1)} | U(\tau) | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_n^{(0)} | U^\dagger | \psi_m^{(1)} \rangle \exp(-\beta_t E_m^{(1)}) \\
&= \exp(\beta_0 F_0) \sum_m \exp(-\beta_t E_m^{(1)}) = \exp(-\Delta(\beta F)) . \quad (34)
\end{aligned}$$

در به دست آوردن این نتیجه، فرض کرده‌ایم که هامیلتونیها با هم جابه‌جا می‌شوند، با دقت در نتیجه به دست آمده دیده می‌شود که رابطه (۱۴) به صورت نیمه کلاسیکی برقرار است.

در تعریف دوم، مسئله به صورت کاملاً کوانتومی بررسی می‌شود، یعنی کار به عنوان یک عملگر در نظر گرفته می‌شود و میانگین هر تابع  $f$  به صورت  $\langle f \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_0 f)$  تعریف می‌شود.

در اینجا برای مثالی که در قسمت قبل مطرح کردیم، اعتبار رابطه (۱۴) را به صورت کاملاً کوانتومی بررسی می‌کنیم:

$$\begin{aligned}
& \langle \exp(\beta_0 \hat{H}(\Gamma_0, \cdot)) \exp(-\beta_\tau \hat{H}(\Gamma_\tau, \tau)) \rangle_\rho \\
&= \text{Tr}(\hat{\rho}_0 \exp(\beta_0 \hat{H}(\Gamma_0, \cdot)) \exp(-\beta_\tau (\hat{H}_0 + \hat{W}))) \\
&= \exp(-\beta_\tau W) \int dq \langle q | \hat{\rho}_0 \exp((\beta_0 - \beta_\tau) \hat{H}_0) | q' \rangle \langle q' | q \rangle \\
&= \exp(-\beta_\tau W) \int dq dq' \langle q | \hat{\rho}_0 | q' \rangle \langle q' | \exp(-(\beta_\tau - \beta_0) \hat{H}_0) | q \rangle \\
&\quad (35)
\end{aligned}$$

با توجه به تعریف عملگر چگالی  $\hat{\rho}_0 = \frac{\exp(-\beta_0 H_0)}{\text{Tr}(\exp(-\beta_0 H_0))}$ ،

برای یک نوسانگر با  $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_0^2}{2} + \frac{1}{2} \omega_0^2 \hat{q}_0^2$  عنصر ماتریسی این عملگر در نمایش مکان به صورت زیر است:

$$\langle q | \hat{\rho}_0 | q' \rangle = \frac{\langle q | \exp(-\beta_0 H_0) | q' \rangle}{\text{Tr}(\exp(-\beta_0 H_0))} , \quad (36)$$

که صورت این کسر را می‌توان با استفاده از توابع پایه نوسانگر به شکل زیر محاسبه کرد:

$$\frac{Z_\tau}{Z_0} = \exp(-(\beta_\tau F_\tau - \beta_0 F_0)) , \quad (32)$$

با توجه به روابط (۳۰)، (۳۱) و (۳۲) خواهیم داشت:

$$\exp(-\Delta(\beta F)) = \frac{\beta_0}{\beta_\tau} \exp(-W \beta_\tau) , \quad (33)$$

بنابراین با توجه به روابط (۲۹) و (۳۳) دیده می‌شود که رابطه (۲۱) برای این نوسانگر هماهنگ برقرار است. و بدین ترتیب درست بودن رابطه (۱۴) برای این نوسانگر کلاسیکی به اثبات رسید.

## ۵. بررسی کوانتومی رابطه (۱۴)

برای بررسی کوانتومی این رابطه می‌توان از دو تعریفی که برای کار در مرجع [۱۸] مطرح شده استفاده کرد. با توجه به تعریف اول، کل کار انجام شده روی سیستم برابر با تغییر انرژی سیستم بین دو وضعیت اولیه و نهایی است:  $\Delta E = E_\tau - E_0$ . فرض می‌کنیم هامیلتونی سیستم در  $t=0$  با  $H_0$  مشخص می‌شود و  $|\Psi_n^{(0)}\rangle$  ویژه حالت این سیستم با ویژه مقدار  $E_n^{(0)}$  باشد. اگر عملگر تحول زمانی سیستم را با  $U(t)$  نشان دهیم، بعد از گذشت زمان  $\tau$ ، ویژه حالت  $|\Psi_n^{(0)}\rangle$  به حالت  $|\Psi_m^{(1)}\rangle = U(\tau) |\Psi_n^{(0)}\rangle$  متحول می‌شود، که  $|\Psi_m^{(1)}\rangle$  ویژه حالت هامیلتونی سیستم،  $H(\tau)$ ، در لحظه  $t=\tau$  می‌باشد که ویژه مقدار آن را با  $E_m^{(1)}$  نشان می‌دهیم. برای محاسبه میانگین هر تابع  $f$  در چنین سیستمی، از تعریف  $\langle f \rangle = \sum_n p_n^{(0)} \sum_m W_{mn} f$  استفاده می‌کنیم، که در آن  $p_n^{(0)} = \exp(\beta_0 (F_0 - E_n^{(0)}))$  احتمال این است که در  $t=0$  سیستم در ویژه حالت  $|\Psi_n^{(0)}\rangle$  باشد و  $W_{mn} = \langle \Psi_m^{(1)} | U(\tau) | \Psi_n^{(0)} \rangle$  احتمال گذار از این ویژه حالت به ویژه حالت  $|\Psi_m^{(1)}\rangle$  را نشان می‌دهد، در واقع حاصل ضرب  $p_n W_{mn}$ ، یک تابع توزیع احتمال را مشخص می‌کند که با استفاده از آن می‌توان میانگین توابع مورد نظر را به دست آورد، بنابراین سمت چپ رابطه (۱۴) را می‌توان به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\langle \exp(\beta_s \hat{H}(\Gamma_s, \cdot)) \exp(\beta_\tau \hat{H}(\Gamma_\tau, \tau)) \rangle_\rho = \exp(-\beta_\tau W) \frac{\sinh \beta_s \omega_s / 2}{\sinh \beta_\tau \omega_s / 2} \quad (42)$$

از طرف دیگر اگر سمت راست رابطه (۱۴) را با توجه به اینکه انرژی آزاد هلمولتز نوسانگر به صورت

$$F_t = -\frac{1}{\beta_t} \ln Z_t = -\frac{1}{\beta_t} \ln \sum_n \exp(-\beta_t (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_s) = -\frac{1}{\beta_t} \ln (\sinh \beta_t \omega_s), \quad (43)$$

می‌باشد حساب کنیم، خواهیم داشت:

$$\exp(-\Delta(\beta F)) = \exp(-\beta_\tau W) \frac{\sinh(\beta_s \omega_s / 2)}{\sinh(\beta_\tau \omega_s / 2)}. \quad (44)$$

بنابراین با توجه به روابط (۴۲) و (۴۴) دیده می‌شود که برای این مثال رابطه (۱۴) به صورت کوانتومی نیز برقرار است. در ضمن می‌توان در حالت کلی اعتبار رابطه (۱۴) را به صورت کوانتومی بررسی کرد:

$$\begin{aligned} & \langle \exp(\beta_s \hat{H}(\Gamma_s, \cdot)) \exp(-\beta_\tau \hat{H}(\Gamma_\tau, \tau)) \rangle_\rho \\ &= Tr(\hat{\rho}_s \exp(\beta_s \hat{H}(\Gamma_s, \cdot)) \exp(-\beta_\tau \hat{H}(\Gamma_\tau, \tau))) \\ &= \exp(\beta_s F_s) Tr(\exp(-\beta_\tau \hat{H}(\Gamma_\tau, \cdot))) \\ & \times \exp(\beta_s \hat{H}(\Gamma_s, \cdot)) \exp(-\beta_\tau \hat{H}(\Gamma_\tau, \tau)) \\ &= \exp(\beta_s F_s) Tr(\exp(-\beta_\tau \hat{H}(\Gamma_\tau, \tau))) \\ &= \exp(\beta_s F_s) \exp(-\beta_\tau F_\tau) = \exp(-\Delta(\beta F)). \end{aligned} \quad (45)$$

این نتیجه نشان‌دهنده کلیت رابطه به دست آمده در این مقاله است.

### ۶. نتیجه‌گیری

در بین نظریه‌های افت و خیزی معادله جازینسکی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار شده و تعمیم‌هایی از این معادله نیز در مقالات گوناگون مطرح شده است. ما در این مقاله تعمیم دیگری از این معادله را به وضعیتی به دست آوردیم که علاوه بر اینکه طی یک فرآیند غیر تعادلی، روی سیستم کار انجام می‌شود، دمای آن نیز تغییر می‌کند. حاصل کار ما به دست آوردن رابطه (۱۴) بود که درستی و صحت آن برای یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی کلاسیکی و کوانتومی به اثبات رسید. درستی این مطلب از

$$\begin{aligned} & \langle q | \exp(-\beta_s \hat{H}_s) | q'' \rangle \\ &= \sum_n \exp(-\beta_s E_n) \Phi_n(q) \Phi_n^*(q'') \\ &= \left( \frac{\omega_s}{\sqrt{2\pi} \sinh \beta_s \omega_s} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-\omega_s}{4} [(q + q'')^\gamma \tanh\left(\frac{\beta_s \omega_s}{2}\right) \right. \\ & \left. + (q - q'')^\gamma \coth\left(\frac{\beta_s \omega_s}{2}\right)]\right), \end{aligned} \quad (37)$$

که در آن

$$\Phi_n(q) = \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{H_n(\zeta)}{(\sqrt{n} n)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \zeta^2\right), \quad (38)$$

تابع پایه نوسانگر می‌باشد. بنابراین

$$\begin{aligned} \langle q | \hat{\rho}_s | q'' \rangle &= \alpha \exp\left(\frac{-\omega_s}{4} [(q + q'')^\gamma \tanh\left(\frac{\beta_s \omega_s}{2}\right) \right. \\ & \left. + (q - q'')^\gamma \coth\left(\frac{\beta_s \omega_s}{2}\right)]\right), \end{aligned} \quad (39)$$

$\alpha$  به صورت زیر تعریف شده است:

$$\alpha \equiv \left(\frac{\omega_s}{\pi} \tanh \frac{\beta_s \omega_s}{2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

اکنون به کمک رابطه (۳۷) و با جایگذاری  $\beta_\tau - \beta_s$  به جای  $\beta_s$  در این رابطه، عنصر ماتریسی عملگر  $\exp(-(\beta_\tau - \beta_s) \hat{H}_s)$  نمایش مکان به صورت زیر به دست خواهد آمد:

$$\begin{aligned} \langle q'' | \exp(-(\beta_\tau - \beta_s) \hat{H}_s) | q \rangle &= \gamma \exp\left(\frac{-\omega_s}{4} [(q + q'')^\gamma \tanh(\beta_\tau - \beta_s) \frac{\omega_s}{2} \right. \\ & \left. + (q - q'')^\gamma \coth(\beta_\tau - \beta_s) \frac{\omega_s}{2}]\right), \end{aligned} \quad (40)$$

که در آن  $\gamma$  به صورت

$$\gamma \equiv \left(\frac{\omega_s}{\sqrt{2\pi} \sinh(\beta_\tau - \beta_s) \omega_s}\right)^{\frac{1}{2}},$$

می‌باشد. با جایگذاری این روابط در رابطه (۳۵) حاصل انتگرال به صورت زیر به دست می‌آید:

$$I = \alpha \gamma \frac{\sqrt{2\pi}}{\omega_s} \sqrt{\frac{1}{\mu \lambda}} = \frac{\sinh \beta_s \omega_s / 2}{\sinh \beta_\tau \omega_s / 2} \quad (41)$$

که  $\lambda, \mu$  بنا بر روابط زیر تعریف شده‌اند:

$$\begin{aligned} \lambda &\equiv \tanh \frac{\beta_s \omega_s}{2} + \tanh(\beta_\tau - \beta_s) \frac{\omega_s}{2}, \\ \mu &\equiv \coth \frac{\beta_s \omega_s}{2} + \coth(\beta_\tau - \beta_s) \frac{\omega_s}{2}, \end{aligned}$$

بنابراین رابطه (۳۵) به این شکل خواهد بود:

کوانتومی به صورت کاملاً کلی به دست آمدند. در پایان قابل ذکر است که به دست آوردن تعمیمهای دیگری از رابطه جارزینسکی همچنان یک مسئله باز و قابل بررسی است.

روابط (۲۹) و (۳۳) برای نوسانگر کلاسیکی و از روابط (۴۲) و (۴۴) برای نوسانگر کوانتومی به وضوح قابل مشاهده است. در ضمن روابط (۳۴) و (۴۵) نتایجی هستند که از بررسی

## مراجع

1. D J Evans and D J Searls, *Adv. Phys.* **51** (2002) 1529.
2. C Jarzynski, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 2690.
3. C Jarzynski, *J. Stat. Mech.:Theor. Exp.* (2004) P09005.
4. A Imparato and L Peliti, *Euro. Phys. Lett.* **69** (2005) 643.
5. G E Crooks, *J. Stat. Phys.* **90** (1998) 1481.
6. G E Crooks, *Phys. Rev. E* **61**, (2000) 2361.
7. F Hatano and S Sasa, *Phys. Rev. Lett.* **86** (2000) 3463.
8. C chatelin *J. Stat. Mech.* (2007) P0 4011.
9. A Szabo, Hummer, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **98** (2001) 3658.
10. F Douarache, S Ciliberto, A Petrosyan, and I Rabbiosi, *Euro. Phys. Lett.* **70** (2005) 593.
11. V Blickle et al., *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 070603.
12. U Seifert, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 040602.
13. C Jarzynski, *J. Stat. Phys.* **98**, (2000) 77.
14. S Mukamel, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 170604.
15. W De Roeck and C maes, *Phys. Rev. E* **69** (2004) 026115.
16. T Monnai, *Phys. Rev. E* **72** (2005) 027102.
17. M F Gelin and D S Kosov, arxiv:0711.4176v1.
18. A Engel and R Nolte, *Euro. Phys. Lett.* **79** (2007) 10003; arXiv:0612527v2
19. K H Kim and H Qian, *Phys. Rev. E* **75** (2007) 022102.
20. T Taniguchi and E G D Cohen, *J. Stat. Phys.* **126** (2007) 1.
21. J Liphardt, S Dumont, S B Smith, I Tinoco and C Bustamante, *Science* **296** (2002) 1832.
22. C Jarzynski, *Comparison of far-from-equilibrium work relations*; arXiv:0612305v1.