Termodinámica y Mecánica Estadística II

http://www.famaf.unc.edu.ar/∼serra/termoII_2017.html

Guía 2 - Agosto de 2017

Problema 1: Pruebe que el operador de Liouville clásico es Hermitiano. Escriba la solución de la ecuación de Liouville en término de las autofunciones y autovalores del operador de Liouville. Muestre que estas ecuaciones **no** decaen a un estado de equilibrio único para $t \to \infty$.

Problema 2: Para un gas de N partículas no interactuantes en una caja cúbica de dimensión lineal L, encuentre la solución de la ecuación de Liouville al tiempo t suponiendo condiciones de contorno periódicas.

Problema 3: Considere una partícula de masa m. Describa la región accesible del espacio de las fases si la energía está entre E y $E + \delta E$, para los casos

- Una partícula libre en una "caja" de longitud L.
- Una partícula en un potencial armónico unidimensional.

Problema 4: En general, cuando un sistema está en un dado estado cuántico, es decir cuando su función de onda está dada, el valor observado de cualquier variable no puede ser predicho exactamente, sino que fluctúa alrededor de cierto valor medio entre una observación y la siguiente.

a) ¿Puede un sistema ser puesto en tal estado cuántico en el que *alguna* variable tenga un valor definido, predecible y reproducible que nunca fluctúe?

b) Pruebe que un sistema revelará un valor definido A_i y no otro cuando se mida la magnitud $\widehat{A}$ si y sólo si está en un estado representado por la autofunción ψ_i. ¿Qué ocurre si el autovalor A_i es degenerado?

Problema 5: Al estudiar el significado de las funciones de onda, suele pensarse en términos de un conjunto de M sistemas, todos en un mismo estado cuántico, conformando un "ensamble puro". Sin embargo, en general esta situación no se da en los casos prácticos, siendo más comunes los ensambles en los cuales M_i sistemas se encuentran en cierto estado normalizado $|\phi_i\rangle$ ($i = 1...k$; <u>no</u> nos restringimos a los casos en los que las $|\phi_i\rangle$ forman una base ortonormal). Una forma conveniente de sintetizar esta información es a través del operador densidad:

$$\widehat{\rho} \;=\; \sum_i \omega_i \, |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \;,$$

donde $\omega_i = M_i/M$ es la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|\phi_i\rangle$.

a) Muestre que el promedio de $\widehat{A}$ sobre todo el ensamble se calcula como

$$\langle\widehat{A}\rangle_M \;=\; \mathrm{Tr}\,(\widehat{A}\,\widehat{\rho}\,) \;.$$

b) Muestre que los elementos diagonales ρ_n de la matriz densidad son números reales que cumplen $0 \leq \rho_n \leq 1$.

c) Muestre que el operador $\widehat{\rho}$ es hermitiano.

d) Muestre que si $\widehat{\rho}^{\,2} = \widehat{\rho}$ entonces el estado del ensamble descripto es puro.

e) Muestre que $\mathrm{Tr}\,(\widehat{\rho}^{\,2}) \leq 1$, donde la igualdad vale solo para ensambles puros.

Problema 6: Se desea describir un ensamble de N partículas no interactuantes de spin 1/2.

a) Calcule la matriz densidad en la base de autofunciones comunes a S_z (y S^2) para <u>un</u> spin 1/2 en un estado $|\chi\rangle$, y use el operador rotación para llevarla a la base en que ésta es diagonal.

b) Muestre que existe un vector $\vec{P}$ tal que para el ensamble el operador densidad puede ser escrito como

$$\widehat{\rho} = \frac{1}{2}\left(1 + \vec{P}\cdot\vec{\sigma}\right) \;,$$

donde σ_i son las *matrices de Pauli*.

c) Muestre que $\vec{P}$ es la polarización media $\langle\vec{\sigma}\rangle$.

d) Calcule el vector polarización $\vec{P}$ y P_z para los siguientes ensambles:

- N partículas polarizadas en la dirección $+x$.
- $N/2$ partículas polarizadas en la dirección $+z$ y $N/2$ partículas polarizadas en la dirección $-z$.

Compare ambos resultados. Discuta.

Problema 7: Suponga que en $t = 0$, cierto sistema está representado por el operador densidad

$$\widehat{\rho}(0) \;=\; \sum_n W_n |\psi_n(0)\rangle\langle\psi_n(0)| \;.$$

Muestre que

$$\widehat{\rho}(t) \;=\; U(t)\,\widehat{\rho}(0)\,U^\dagger(t) \;,$$

es solucion de la eq. de von Neumann donde $U(t)$ es el operador de evolución temporal

Problema 8: Mostrar que las siguientes expresiones para la entropía son equivalentes:

$$S \;=\; k_B \ln\Gamma(E), \qquad\qquad S \;=\; k_B \ln\Sigma(E),$$

donde $\Sigma(E)$ es el volumen del espacio de las fases encerrado por la superficie de energía E y $\Gamma(E)$ el volumen del espacio de las fases encerrado por una cascara entre E y $E + \Delta$

Problema 9: Un gas ideal que consiste de N masas puntuales está contenido en una caja de volumen V.
(a) Encuentre clásicamente el número de estados $\Sigma(E)$, y usando esto encuentre la ecuación de estado.
(b) Determine además una expresión para la entropía de este gas, analice su extensividad y justifique la inclusión del contaje correcto de Boltzmann.

Problema 10: *Sistema de dos niveles:* Considere un gas de N partículas no interactuantes, cada una de las cuales puede estar en dos estados posibles: con energía cero y energía $\epsilon > 0$.
(a) Calcule el número de estados accesibles para una energía total E. De una expresión para la entropía en función de $u = E/N$, y grafíquela.
(b) Asuma que ϵ depende del volumen como

$$\epsilon = \epsilon(v) = \frac{a}{v^\gamma} \quad ; \quad a, \gamma > 0.$$

Obtenga la ecuación de estado para la presión: $p = p(T, v)$.

Problema 11: Considere un gas ideal de N partículas ultra-relativistas encerradas en una caja cúbica de lado L ($V = L^3$), esto es, partículas cuyo espectro de energías esta dado por

$$\epsilon(n_x, n_y, n_z) = \frac{hc}{2\,L}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \;\; ; \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots$$

donde h es la constante de Planck y c la velocidad de la luz.

a) Muestre que la entropía $S(N, V, E)$, definida como el logaritmo del número de microestados con energía total E, depende de E y V de la forma $S(N, V, E) = S(N, E\,V^{1/3})$

b) Muestre que para este gas $C_p/C_v = 4/3$ (en vez del valor $5/3$ para el caso no relativista).