Termodinámica y Mecánica Estadística II

Guía 2 - 27 de agosto de 2021

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. ¿Muestran estas ecuaciones alguna tendencia a decaer a un estado de equilibrio único?

Problema 2: 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 3: 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 al realizar mediciones *en condiciones idénticas*.

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 $\hat{A}$ si y sólo si se encuentra en un estado ψ_i autofunción de $\hat{A}$. ¿Qué ocurre si el autovalor A_i es degenerado?

Problema 4: 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 $|\phi_i\rangle$ ($i = 1...k$; no 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:

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

donde $\omega_i = M_i/M$ es la probabilidad de tomar un elemento del ensamble que ocupe el estado $|\phi_i\rangle$.

a) Muestre que el promedio de $\hat{A}$ sobre todo el ensamble se calcula como $\langle\hat{A}\rangle_M = \mathrm{Tr}\,(\hat{A}\,\hat{\rho}\,)$.

b) Pruebe que $\mathrm{Tr}\,(\hat{\rho}) = 1$. Muestre además que los elementos diagonales ρ_n de la matriz densidad son números reales que cumplen $0 \le \rho_n \le 1$.

c) Demuestre que el operador $\hat{\rho}$ es hermitiano.

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

Problema 5: Se estudia una partícula de espín 1/2 realizando N observaciones independientes (e idénticas).

a) Escriba la matriz densidad para un solo espín 1/2 en un estado $|\chi\rangle$ arbitrario, en la base de autoestados de $\hat{S}_z$, y en la base en que la matriz densidad es diagonal.

b) Muestre que existe un vector $\boldsymbol{P}$ tal que el operador densidad para el sistema puede ser escrito en términos de las *matrices de Pauli* $\hat{\sigma}_i$ como

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(1 + \boldsymbol{P}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \; .$$

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

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

- 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 con el resultado anterior. Discuta.
- Muestre que la matriz densidad del ítem anterior es igual a la de $N/2$ partículas polarizadas en $+x$ y $N/2$ polarizadas en $-x$. ¿Qué significa esto?

Problema 6: Suponga que en $t = 0$, cierto sistema está representado por el operador densidad

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

Utilizando el operador de evolución temporal $\hat{U}(t)$, demuestre que para un tiempo arbitrario t, el sistema evolucionará de acuerdo a

$$\hat{\rho}(t) \;=\; \hat{U}(t)\,\hat{\rho}(0)\,\hat{U}^{\dagger}(t) \; , \qquad \text{o lo que es equivalente,} \qquad i\hbar\,\frac{\partial\hat{\rho}(t)}{\partial t} \;=\; [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \; .$$

¿Se refleja algún relajamiento hacia el equilibrio termodinámico mediante esta descripción?