

Terceira Lista de Exercícios de Mecânica Estatística

Fabio de Moraes Canedo
7994642

11 de dezembro de 2018

1 P1

Esse problema pode ser atacado considerando, em primeiro lugar, a matriz densidade inicial do sistema, dada por:

$$\rho(0) = \begin{bmatrix} e^{-\Omega(\beta_a+\beta_b)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\Omega(\beta_a-\beta_b)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\Omega(\beta_a-\beta_b)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\Omega(\beta_a+\beta_b)} \end{bmatrix} \quad (1)$$

O Hamiltoniano, que descreverá a evolução do sistema, será dado por:

$$H = \begin{bmatrix} \Omega & 0 & 0 & g \\ 0 & 0 & g & 0 \\ 0 & g & 0 & 0 \\ g & 0 & 0 & -\Omega \end{bmatrix} \quad (2)$$

Esse Hamiltoniano pode ser diagonalizado, e sua forma diagonal fica:

$$H_d = \begin{bmatrix} \sqrt{\Omega^2 + g^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{\Omega^2 + g^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -g \end{bmatrix} \quad (3)$$

Isso pode ser feito com o auxílio da matriz O :

$$O = \begin{bmatrix} \frac{\Omega + \sqrt{\Omega^2 + g^2}}{\sqrt{g^2 + (\Omega + \sqrt{\Omega^2 + g^2})^2}} & 0 & 0 & \frac{g}{\sqrt{g^2 + (\Omega + \sqrt{\Omega^2 + g^2})^2}} \\ \frac{\Omega - \sqrt{\Omega^2 + g^2}}{\sqrt{g^2 + (\Omega - \sqrt{\Omega^2 + g^2})^2}} & 0 & 0 & \frac{g}{\sqrt{g^2 + (\Omega - \sqrt{\Omega^2 + g^2})^2}} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Teremos, então $O^T H_d O = H$ e $O^T O = \mathbb{1}$. Com o auxílio dessas matrizes, é possível construir a matriz de evolução temporal. Em primeiro lugar, sua forma diagonal será:

$$U_d = \begin{bmatrix} e^{-it\sqrt{\Omega^2 + g^2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{it\sqrt{\Omega^2 + g^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-igt} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{igt} \end{bmatrix} \quad (5)$$

Com o auxílio da matriz O , podemos trazer o operador de evolução para nossa representação original. Podemos então, utilizar esse operador e aplicar em nossa matriz densidade. Isso fornecerá a matriz densidade em qualquer instante do tempo:

$$\rho(t) = U^\dagger \rho U \quad (6)$$

Utilizando então, a definição de valores esperados:

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr } \rho(t) \hat{A} \quad (7)$$

Podemos, então obter o comportamento de diversos observáveis no tempo. Podemos observar na Figura 1.0.1 um exemplo. Podemos observar que há instantes no tempo em que boa parte da energia está retida na interação. Com a diminuição do parâmetro g , observamos o comportamento da Figura em 1.0.2. É possível observar também que o sistema muda mais lentamente, consequência direta da diminuição da intensidade da componente de interação do Hamiltoniano.

Quando inserimos **RWA**, o Hamiltoniano muda para:

$$H_{\text{RWA}} = \begin{bmatrix} \Omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g & 0 \\ 0 & g & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Omega \end{bmatrix} \quad (8)$$

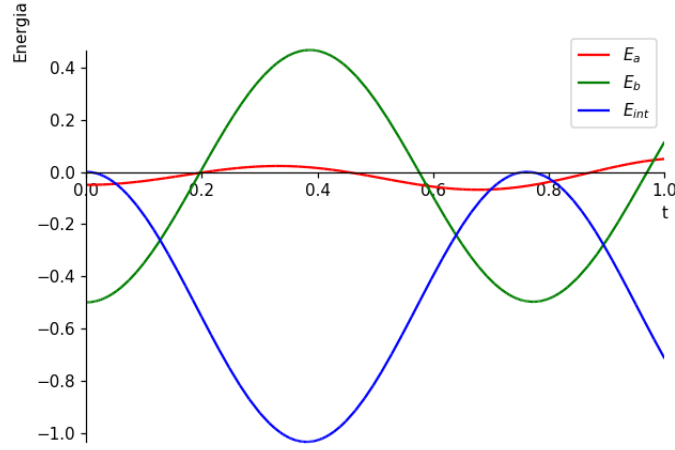


Figura 1.0.1: Comportamento dos valores esperados de energia de pedaços do sistema. Os parâmetros escolhidos foram $\Omega = 1$, $g = 4$, $\beta_b = 100$ e $\beta_a = 0.1$.

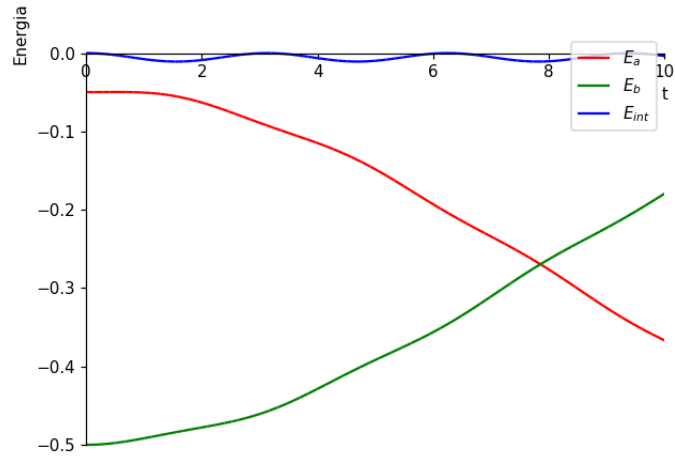


Figura 1.0.2: Comportamento dos valores esperados de energia de pedaços do sistema. Os parâmetros escolhidos foram $\Omega = 1$, $g = 0.1$, $\beta_b = 100$ e $\beta_a = 0.1$.

Os autovalores são alterados, de maneira que o Hamiltoniano diagonal fica:

$$H_{d,\text{RWA}} = \begin{bmatrix} \Omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -g \end{bmatrix} \quad (9)$$

Aplicando os métodos supramencionados, obtemos os comportamentos ilustrados pelas Figuras 1.0.3 e 1.0.4. Podemos observar que a maior diferença foi no caso da Figura 1.0.3. Nesse caso, para nenhum instante do tempo temos energia retida na interação. O que ilustra o fato de que a aproximação só é válida quando $\frac{g}{\Omega} \ll 1$.

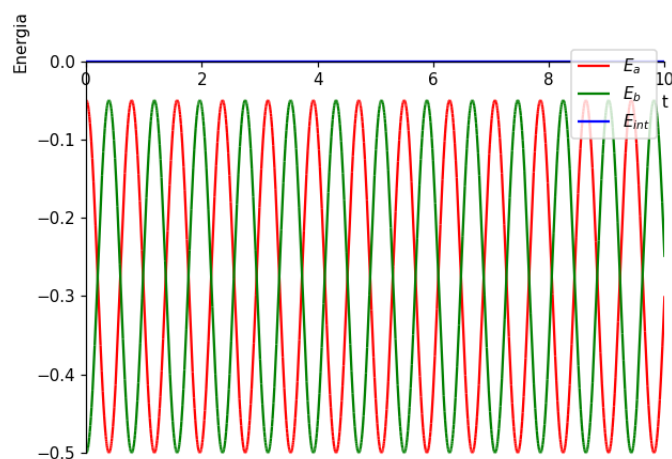


Figura 1.0.3: Comportamento dos valores esperados de energia de pedaços do sistema. Os parâmetros escolhidos foram $\Omega = 1$, $g = 4$, $\beta_b = 100$ e $\beta_a = 0.1$. Nesse caso utilizamos a aproximação **RWA**.

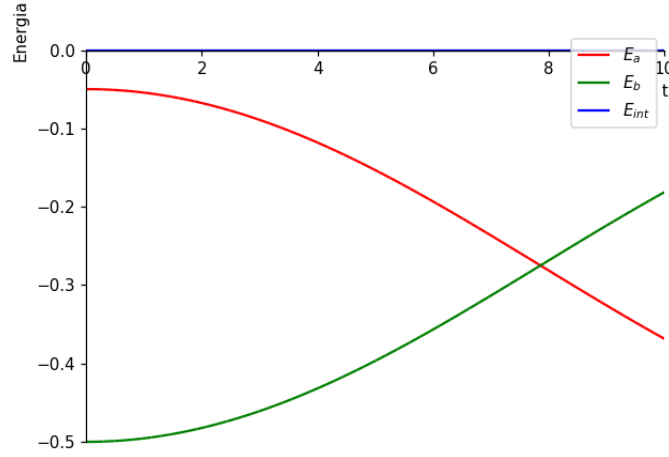


Figura 1.0.4: Comportamento dos valores esperados de energia de pedaços do sistema. Os parâmetros escolhidos foram $\Omega = 1$, $g = 0.1$, $\beta_b = 100$ e $\beta_a = 0.1$. Nesse caso utilizamos a aproximação **RWA**.

2 P2

Nesse problema, existem dois tipos de transformações que são realizadas no sistema, estas são as isotérmicas e as adiabáticas. Vamos, em primeiro lugar, estabelecer o calor e o trabalho realizado pelo sistema em cada transformação. Começemos pela adiabática. Nesse caso, o calor trocado é $Q = 0$. Teremos então, pela primeira lei da termodinâmica:

$$W = -\Delta U \quad (10)$$

Mas temos também, que:

$$\begin{aligned} \Delta U &= \langle H \rangle_f - \langle H \rangle_i \\ \Delta U &= \frac{\omega_f}{\omega_i} \langle H \rangle_i - \langle H \rangle_i \\ \Delta U &= \left(\frac{\omega_f - \omega_i}{\omega_i} \right) \langle H \rangle_i \\ \Delta U &= \left(\frac{\omega_f - \omega_i}{\omega_i} \right) \frac{\omega_i}{2} \coth \left(\frac{\omega_i}{2T_i} \right) \\ \Delta U &= \left(\frac{\omega_f - \omega_i}{2} \right) \coth \left(\frac{\omega_i}{2T_i} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

Logo:

$$W = \left(\frac{\omega_i - \omega_f}{2} \right) \coth \left(\frac{\omega_i}{2T_i} \right) \quad (12)$$

Agora, para o caso isotérmico, é melhor utilizarmos a variação da energia livre, pois temos:

$$dF = SdT - W \ln x \quad (13)$$

Portanto, em uma transformação isotérmica, teremos a seguinte relação:

$$\begin{aligned} W &= -\Delta F \\ W &= -T \left\{ \ln \sinh \left(\frac{\omega_f}{2T} \right) - \ln \sinh \left(\frac{\omega_i}{2T} \right) \right\} \\ W &= -T \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\omega_f}{2T} \right) / \sinh \left(\frac{\omega_i}{2T} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (14)$$

Podemos, portanto estabelecer os valores para cada transformação:

- $W_{ab} = -T_H \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\omega_b}{2T_H} \right) / \sinh \left(\frac{\omega_a}{2T_H} \right) \right] \right\};$
- $W_{bc} = \left(\frac{\omega_b - \omega_c}{2} \right) \coth \left(\frac{\omega_b}{2T_H} \right);$
- $W_{cd} = -T_C \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\omega_d}{2T_C} \right) / \sinh \left(\frac{\omega_c}{2T_C} \right) \right] \right\};$
- $W_{da} = \left(\frac{\omega_d - \omega_a}{2} \right) \coth \left(\frac{\omega_d}{2T_C} \right);$

Para o calor de cada processo, teremos:

- $Q_{ab} = \frac{\omega_b}{2} \coth \left(\frac{\omega_b}{2T_H} \right) - \frac{\omega_a}{2} \coth \left(\frac{\omega_a}{2T_H} \right) - T_H \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\omega_b}{2T_H} \right) / \sinh \left(\frac{\omega_a}{2T_H} \right) \right] \right\};$
- $Q_{bc} = 0;$
- $Q_{cd} = \frac{\omega_d}{2} \coth \left(\frac{\omega_d}{2T_C} \right) - \frac{\omega_c}{2} \coth \left(\frac{\omega_c}{2T_C} \right) - T_C \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\omega_d}{2T_C} \right) / \sinh \left(\frac{\omega_c}{2T_C} \right) \right] \right\};$
- $Q_{da} = 0;$

Podemos, portanto, computar a eficiência:

$$\begin{aligned}
\eta = & \left\{ -T_H \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\omega_b}{2T_H} \right) / \sinh \left(\frac{\omega_a}{2T_H} \right) \right] \right\} \right. \\
& + \left(\frac{\omega_b - \omega_c}{2} \right) \coth \left(\frac{\omega_b}{2T_H} \right) \\
& - T_C \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\omega_d}{2T_C} \right) / \sinh \left(\frac{\omega_c}{2T_C} \right) \right] \right\} \\
& + \left(\frac{\omega_d - \omega_a}{2} \right) \coth \left(\frac{\omega_d}{2T_C} \right) \left. \right\} \left\{ \frac{\omega_b}{2} \coth \left(\frac{\omega_b}{2T_H} \right) - \frac{\omega_a}{2} \coth \left(\frac{\omega_a}{2T_H} \right) \right. \\
& \left. \left. - T_H \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\omega_b}{2T_H} \right) / \sinh \left(\frac{\omega_a}{2T_H} \right) \right] \right\} \right\}^{-1} \right.
\end{aligned} \tag{15}$$

Essa expressão pode ser simplificada, percebendo que os parâmetros têm algumas relações, por exemplo, em relação às transformações adiabáticas, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{\langle H \rangle_f}{\omega_f} &= \frac{\langle H \rangle_i}{\omega_i} \\
\coth \left(\frac{\omega_f}{2T_f} \right) &= \coth \left(\frac{\omega_f}{2T_f} \right) \\
\frac{\omega_f}{T_f} &= \frac{\omega_i}{T_i}
\end{aligned} \tag{16}$$

Definimos, portanto, as variáveis:

$$r = \frac{\omega_c}{T_C} = \frac{\omega_b}{T_H} \tag{17a}$$

$$p = \frac{\omega_d}{T_C} = \frac{\omega_a}{T_H} \tag{17b}$$

$$\alpha = \frac{T_C}{T_H} = \frac{\omega_d}{\omega_a} = \frac{\omega_c}{\omega_b} \tag{17c}$$

Portanto, a eficiência fica:

$$\begin{aligned}
\eta = & \left\{ - \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{r}{2} \right) / \sinh \left(\frac{p}{2} \right) \right] \right\} \right. \\
& + \left(r \frac{1-\alpha}{2} \right) \coth \left(\frac{r}{2} \right) \\
& - \alpha \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{p}{2} \right) / \sinh \left(\frac{r}{2} \right) \right] \right\} \\
& + \left(p \frac{\alpha-1}{2} \right) \coth \left(\frac{p}{2} \right) \left. \right\} \left\{ \frac{r}{2} \coth \left(\frac{r}{2} \right) - \frac{p}{2} \coth \left(\frac{p}{2} \right) \right. \\
& \left. \left. - \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{r}{2} \right) / \sinh \left(\frac{p}{2} \right) \right] \right\} \right\}^{-1} \right.
\end{aligned} \tag{18}$$

Que pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
\eta = & \left\{ \ln \left(\sinh \left(\frac{p}{2} \right) / \sinh \left(\frac{r}{2} \right) \right)^{1-\alpha} \right. \\
& + \left(r \frac{1-\alpha}{2} \right) \coth \left(\frac{r}{2} \right) + \left(p \frac{\alpha-1}{2} \right) \coth \left(\frac{p}{2} \right) \left. \right\} \left\{ \frac{r}{2} \coth \left(\frac{r}{2} \right) - \frac{p}{2} \coth \left(\frac{p}{2} \right) \right. \\
& \left. \left. - \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{r}{2} \right) / \sinh \left(\frac{p}{2} \right) \right] \right\} \right\}^{-1} \right.
\end{aligned} \tag{19}$$

E, por fim, podemos simplificá-la para:

$$\eta = 1 - \alpha \tag{20}$$

As condições estabelecidas sobre os parâmetros para a obtenção dessa eficiência são as relações mostradas nas Equações (17). Elas vêm do fato de que estamos assumindo o teorema adiabático de processos quasi-estáticos. Isso nos permitiu conectar os trabalhos dos processos adiabáticos do ciclo em um único logaritmo, permitindo toda a simplificação realizada.

3 P3

Nesse problema, utilizamos o fato de que temos um Hamiltoniano mais simples, tal como:

$$V_{AB} = g (\sigma_+^A \sigma_-^B + \sigma_-^A \sigma_+^B) \quad (21)$$

Esse Hamiltoniano somente afeta o sistema quando temos um estado específico, advindo de combinações de estados dos dois sistemas interagentes. Pois ele aumenta o nível de um sistema enquanto abaixa o outro. Assim, quando os dois sistemas A e B estiverem no nível mais energético, eles apenas mudarão por uma fase. Quando estiverem no nível menos energético, o mesmo ocorre. Somente quando ambos estiverem com estados opostos, ou *spins* opostos, teremos uma interação mais complicada. No espaço produto dos sistemas, o operador evolução será dado por:

$$U = \begin{bmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(gt) & -i \sin(gt) & 0 \\ 0 & -i \sin(gt) & \cos(gt) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\Omega t} \end{bmatrix} \quad (22)$$

Assim, a probabilidade de troca de calor somente existe quando temos o estado em que os sistemas interagentes estão em situações opostas. Com a construção dos produtos tensoriais, podemos ilustrar, através de um cálculo numérico, o que ocorre quando variamos a situação em termos de condição inicial do sistema B . Como o sistema A carrega informação para o sistema C , seu valor final de expectativa de energia será dependente da temperatura de B . Podemos observar isso na Figura 3.0.1.

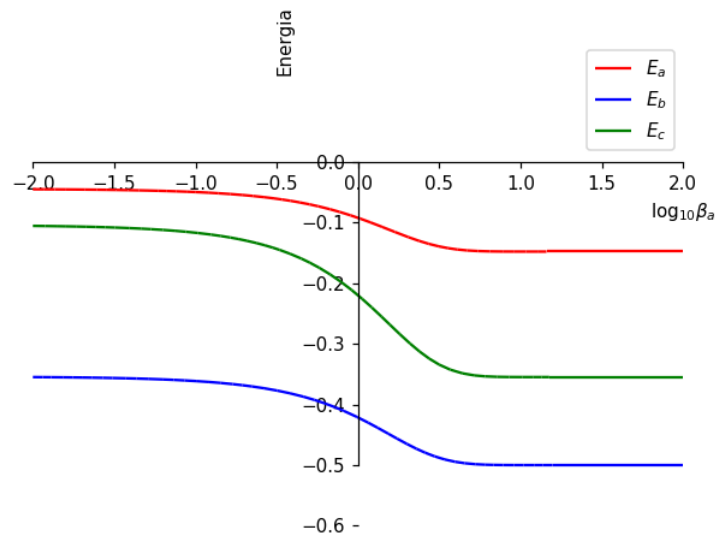


Figura 3.0.1: Valores esperados das energias finais para os três sistemas. Os parâmetros escolhidos nos cálculos foram $\Omega = 1$, $g = 0.1$, $\tau = 10$, $\beta_a = 10^2$ e $\beta_c = 10^{-2}$.