

Evaluación I. Física Estadística

Rubén Carrión Castro

Marzo 2025

1. Una partícula libre de masa m está obligada a moverse en una dimensión. Considerando que su Hamiltoniano es $H = p^2/2 + q^2/2$, correspondiente a un oscilador armónico unidimensional de masa $m = 1$ y frecuencia $\omega = 1$, demuestre que el área del recinto rectangular con vértices (q_0, p_0) , $(q_0, 2p_0)$, $(2q_0, p_0)$ y $(2q_0, 2p_0)$ permanece invariante frente a la evolución natural del sistema (es decir, las ecuaciones de Hamilton preservan el volumen del espacio de las fases).

Planteamos las ecuaciones de Hamilton,

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = p; \quad \dot{p} = \frac{\partial H}{\partial q} = q$$

Luego, tenemos la ecuación diferencial,

$$\ddot{q} = \dot{p} = -q \Rightarrow \ddot{q} + q = 0$$

que es la ecuación de un movimiento armónico simple, del cuál sabemos la solución, que es

$$q(t) = A \sin(\omega t + \alpha) \stackrel{\{\omega=1\}}{=} A \sin(t + \alpha)$$

Por tanto, como $p = \dot{q}$, entonces

$$p(t) = A \cos(t + \alpha)$$

Tenemos las condiciones iniciales,

$$\begin{aligned} q(t=0) &= q_0 = A \sin \alpha \\ p(t=0) &= p_0 = A \cos \alpha \end{aligned}$$

Por tanto, la solución será,

$$\begin{aligned} q(t) &= p_0 \sin t + q_0 \cos t \\ p(t) &= p_0 \cos t - q_0 \sin t \end{aligned}$$

Elevando al cuadrado ambas soluciones y sumando, llegamos a

$$q^2(t) + p^2(t) = p_0^2 + q_0^2 = cte$$

Luego, tenemos la ecuación de una circunferencia, es decir, los puntos se moverán siguiendo una trayectoria totalmente circular. Para ver si el área se preserva, calculamos el área inicial,

$$S_0 = q_0 p_0$$

pues se trata de un rectángulo de lados q_0 y p_0 . Ahora, calculamos el área para un cierto t , tal que

$$\begin{aligned}(q_0, p_0) &\xrightarrow{t} (p_0 \sin t + q_0 \cos t, p_0 \cos t - q_0 \sin t) \\(2q_0, p_0) &\xrightarrow{t} (2p_0 \sin t + 2q_0 \cos t, p_0 \cos t - q_0 \sin t) \\(q_0, 2p_0) &\xrightarrow{t} (p_0 \sin t + q_0 \cos t, 2p_0 \cos t - 2q_0 \sin t) \\(2q_0, 2p_0) &\xrightarrow{t} (2p_0 \sin t + 2q_0 \cos t, 2p_0 \cos t - 2q_0 \sin t)\end{aligned}$$

Luego, vemos que sigue preservando la forma de rectángulo, pero esta vez de lados,

$$\overrightarrow{1,4} = (q_0 \cos t, -q_0 \sin t)$$

$$\overrightarrow{2,3} = (p_0 \sin t, p_0 \cos t)$$

Vamos a multiplicarlos y ver si el área se preserva,

$$\begin{aligned}S(t) &= |\overrightarrow{1,4} \times \overrightarrow{2,3}| = |(q_0 \cos t, -q_0 \sin t) \times (p_0 \sin t, p_0 \cos t)| = \\&= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ q_0 \cos t & -q_0 \sin t & 0 \\ p_0 \sin t & p_0 \cos t & 0 \end{vmatrix} = |p_0 q_0 \sin^2 t \hat{k} + p_0 q_0 \cos^2 t \hat{k}| = |p_0 q_0 \hat{k}| = p_0 q_0\end{aligned}$$

Luego se preserva el área en el espacio de fases.

2. Un sistema mecánico está formado por una partícula de masa $m = 1$ sometida a la aceleración de la gravedad, $g = 1$, y que puede moverse solo a lo largo del eje vertical z . Se sabe que el Hamiltoniano viene dado por

$$H = p^2/2 + z$$

y que la solución a las ecuaciones de Hamilton es

$$\begin{cases} z(t) = z_0 + p_0 t - \frac{1}{2}t^2 \\ p(t) = p_0 - t \end{cases}$$

- (a) Compruebe que este sistema dinámico verifica la ecuación de Liouville.

Sabemos que la ecuación de Liouville es,

$$\frac{d\rho}{dt} = 0$$

Expandiendo tenemos,

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial z}\dot{z} + \frac{\partial \rho}{\partial p}\dot{p} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\} = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial \rho}{\partial z} - \frac{\partial H}{\partial z}\frac{\partial \rho}{\partial p}$$

Suponiendo que el sistema está en equilibrio termodinámico, $\rho(z, p; t) = \rho(z, p)$, luego, $\partial \rho / \partial t = 0$. Además,

$$\frac{\partial H}{\partial p} = p; \quad \frac{\partial H}{\partial z} = 1$$

Luego,

$$\dot{p} = -1; \quad \dot{z} = p$$

Por tanto, el flujo del sistema en el espacio de fases es $v = (\dot{z}, \dot{p}) = (p, -1)$, luego, la divergencia del flujo será,

$$\nabla \cdot v = \frac{\partial \dot{z}}{\partial z} + \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} = 0$$

Por tanto, se satisface el Teorema de Liouville.

- (b) **Suponiendo que cuando la partícula alcanza el suelo *rebota elásticamente* sobre él para volver a ascender, encuentre la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en la posición z en función de la energía, E (sugerencia: utilice la hipótesis ergódica y calcule dicha probabilidad a partir de un promedio temporal).**

Como estamos en una situación clásica, el Hamiltoniano corresponde con la energía, es decir, $H = E$.

Tomamos un dz , luego $dP(z) = \rho(z)dz$ que es la probabilidad de que la partícula tenga posición entre z y $z + dz$. Luego,

$$dP(z) = \rho(z)dz = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\Delta t}{T}$$

donde Δt es el tiempo que el sistema está en dz y T es el tiempo total de evolución. Por tanto, como la partícula baja y sube, tendremos que

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\Delta t}{T} = \frac{2dt}{\tau}$$

donde $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ es el periodo. Calculamos z_{max} , que será cuando la energía potencial sea máxima y la cinética se anule, es decir, $p = 0$, luego

$$E = z_{max}$$

En general,

$$E = \frac{p^2}{2} + z = \{p = \dot{z}\} = \frac{1}{2}\dot{z}^2 + z = \frac{1}{2}\left(\frac{dz}{dt}\right)^2 + z$$

Luego,

$$\frac{dz}{dt} = \sqrt{2(E - z)} \Rightarrow dt = \frac{dz}{\sqrt{2(E - z)}}$$

Así, el periodo queda

$$\tau = 2 \int dt = 2 \int_{z_{min}=0}^{z_{max}=E} \frac{dz}{\sqrt{2(E - z)}}$$

Por tanto,

$$\rho(z)dz = \frac{2dt}{\tau} = \frac{2\omega}{2\pi} \frac{dz}{\sqrt{2(E - z)}}$$

Por comparación tenemos que

$$\rho(z) = \frac{\omega}{\pi\sqrt{2(E - z)}}$$

3. Considere una fuente emisora de partículas de espín 1, de modo que puede emitir en tres posibles estados ortonormales, que notaremos por $| -1 \rangle$, $| 0 \rangle$ y $| 1 \rangle$. Calcule la matriz densidad para estos tres posibles casos:

Tenemos espín 1, luego, tendremos bosones; la base del espacio de Hilbert será,

$$\{ | -1 \rangle, | 0 \rangle, | 1 \rangle \}$$

Nos piden calcular la matriz densidad, que viene dada por

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\Psi^{(i)}(t)\rangle \langle \Psi^{(i)}(t)| \Rightarrow \rho_{mn}(t) = \sum_i p_i c_m^{(i)}(t) c_n^{(i)*}(t)$$

donde p_i es la probabilidad de ocurrencia de cada microestado $\Psi^{(i)}(t)$.

- (a) La fuente emite partículas $| -1 \rangle$, $| 0 \rangle$ y $| 1 \rangle$ con probabilidad 1/3 cada una.

Tendremos que las probabilidades son,

$$p(-1) = \frac{1}{3} = p(0) = p(1)$$

Por tanto

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3} | -1 \rangle \langle -1 | + \frac{1}{3} | 0 \rangle \langle 0 | + \frac{1}{3} | 1 \rangle \langle 1 |$$

Luego, la matriz densidad queda,

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{pmatrix}$$

- (b) La fuente emite partículas en los siguientes dos estados, con probabilidad 1/2 en cada caso:

$$|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [| -1 \rangle + i | 0 \rangle]$$

$$|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [-i | -1 \rangle + | 0 \rangle + i | 1 \rangle]$$

Ahora tendemos que

$$\rho = \frac{1}{2} |\varphi_1\rangle \langle \varphi_1| + \frac{1}{2} |\varphi_2\rangle \langle \varphi_2|$$

Luego,

$$\rho = \begin{pmatrix} 2/3 & -2i/3 & 1/6 \\ 2i/3 & 2/3 & -i/6 \\ 1/6 & i/6 & 1/6 \end{pmatrix}$$

- (c) Compruebe que en ambos casos la matriz densidad posee traza unidad y es autoadjunta.

Vemos que

$$Tr(\rho_a) = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = 1$$

$$Tr(\rho_b) = \frac{2}{3} + \frac{2}{3} + \frac{1}{6} = 1$$

Veamos que son adjuntas, es decir, $\rho = \rho^\dagger = (\rho^T)^*$. La primera al ser diagonal y real es trivial que sea adjunta. Vemos la otra,

$$(\rho^T)^* = \begin{pmatrix} 2/3 & 2i/3 & 1/6 \\ -2i/3 & 2/3 & i/6 \\ 1/6 & -i/6 & 1/6 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} 2/3 & -2i/3 & 1/6 \\ 2i/3 & 2/3 & -i/6 \\ 1/6 & i/6 & 1/6 \end{pmatrix} = \rho$$

Luego, es autoadjunta.

- (d) Para cada uno de los dos casos anteriores, determine el *valor medio* del observable momento angular de espín en la componente z , que viene dado por la siguiente matriz de Pauli:

$$\mathbf{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

El valor medio del operador momento angular de espín viene dado por,

$$\langle J_z \rangle = \text{Tr}(\rho J_z)$$

Luego,

$$\rho J_z = \hbar \begin{pmatrix} 2/3 & -2i/3 & 1/6 \\ 2i/3 & 2/3 & -i/6 \\ 1/6 & i/6 & 1/6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 2/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/6 \end{pmatrix}$$

Luego,

$$\langle J_z \rangle = \hbar \frac{2}{3} - \hbar \frac{1}{6} = \frac{\hbar}{2}$$

4. Considere el oscilador armónico cuántico unidimensional, para el cual los autovalores del Hamiltoniano vienen dados por

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle = (n + 1/2)\hbar\omega |\varphi_n\rangle \quad \forall n = 0, 1, \dots, \infty$$

Para este sistema se define el operador densidad $\hat{\rho} = A e^{-\beta \hat{H}}$, donde A y β son dos constantes.

- (a) Demuestre que, tomando como base del espacio de Hilbert a las funciones φ_n , el operador densidad viene representado por una matriz diagonal de dimensión infinita. Determine los elementos de la diagonal, $\rho_{nn} = \langle \varphi_n | \hat{\rho} | \varphi_n \rangle$.

Tenemos que

$$e^{-\beta \hat{H}} |\varphi_n\rangle = e^{-\beta E_n} |\varphi_n\rangle = e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} |\varphi_n\rangle$$

Luego,

$$\hat{\rho} |\varphi_n\rangle = A e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} |\varphi_n\rangle$$

Los elementos de $\hat{\rho}$ vendrán dados por,

$$\rho_{mn} = \langle \varphi_m | \hat{\rho} | \varphi_n \rangle$$

donde vemos que si $m \neq n$, entonces $\rho_{mn} = 0$, pues los φ_n son base y $\hat{\rho}$ es constante. Luego, tendremos una matriz diagonal de dimensión infinita.

Los elementos de la diagonal vendrán dados por,

$$\rho_{nn} = \langle \varphi_n | \hat{\rho} | \varphi_n \rangle = \bar{\varphi}_n A e^{-\beta \hat{H}} |\varphi_n\rangle = A e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = A e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega}$$

que serán los elementos de la diagonal

(b) Determine la constante de normalización, A , sabiendo que $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$.

Sabemos que $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$, luego

$$\sum_n A e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} = 1$$

Por tanto,

$$A = \frac{1}{\sum_n e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega}}$$

Tomándolo como una serie geométrica llegamos a

$$A = \frac{e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}(1 - e^{-\beta\hbar\omega})}{1}$$

(c) Demuestre que el promedio de la energía es $\langle E \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{H}] = \hbar\omega \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \right]$

El operador Hamiltoniano será una matriz diagonal cuyos elementos son los $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, luego,

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_n \langle \varphi_n | \hat{\rho}\hat{H} | \varphi_n \rangle = \sum_n \bar{\varphi}_n \hat{\rho} E_n | \varphi_n \rangle = \\ &= \sum_n (n + 1/2)\hbar\omega \rho_{nn} = \sum_n (n + 1/2)\hbar\omega \frac{e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega}}{e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}(1-e^{-\beta\hbar\omega})} = \\ &= \hbar\omega \sum_n \frac{(ne^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} + \frac{1}{2}e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega})}{e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}(1-e^{-\beta\hbar\omega})} = \\ &= \hbar\omega \left[\frac{e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}(1-e^{-\beta\hbar\omega})e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}e^{-\beta\hbar\omega}}{(1-e^{-\beta\hbar\omega})^2} + \frac{\frac{1}{2}e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}(1-e^{-\beta\hbar\omega})e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \right] = \\ &= \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \right) \end{aligned}$$