

Física Estadística

Relación 2: Teorema de Liouville y postulados de la Física Estadística

Problema 1. Consideremos una partícula que se mueve en el seno de un potencial unidimensional

$$V(x) = -Ax^2 + Bx^4$$

con $A, B > 0$.

1. Dibujar el potencial $V(x)$ y las trayectorias correspondientes en el espacio de las fases (x, p) para diferentes valores de la energía ¿Hay cortes de trayectorias en el diagrama?
2. Discutir si existe algún punto de inestabilidad ¿Qué ocurre en dicho(s) punto(s)?

Apartado 1: Veamos en primer lugar los ceros del potencial, i.e. los puntos donde corta al eje x . Estos ceros, que denotamos como $x_2^{(k)}$, son solución de la ec. $V(x) = 0 = x^2(Bx^2 - A)$, de donde obtenemos $x_2^{(0)} = 0$ y $x_2^\pm = \pm\sqrt{A/B}$. Cuando $|x| \ll 1$, cerca del punto de corte $x_2^{(0)}$, tenemos que $x^2 \gg x^4$, por lo que en esta región $V(x) \approx -Ax^2$, una parábola hacia abajo con máximo en $x_2^{(0)} = 0$. De igual forma, para $|x| \gg 1$ se cumple que $x^4 \gg x^2$, por lo que en esa zona $V(x) \approx Bx^4$, que diverge a $+\infty$ conforme $x \rightarrow \pm\infty$. Por tanto en algún punto intermedio en los intervalos $(x_2^{(0)}, x_2^+)$ y $(x_2^-, x_2^{(0)})$ debemos tener sendos mínimos del potencial $V(x)$.

Para calcular los extremos, que denotamos como $x_1^{(k)}$, hacemos $V'(x) = 0 = 2x(2Bx^2 - A)$ de donde obtenemos $x_1^{(0)} = 0$ y $x_1^\pm = \pm\sqrt{A/2B}$. Haciendo la segunda derivada del potencial y estudiando su signo en estos extremos se comprueba que $x_1^{(0)}$ es un máximo local con valor $V(x_1^{(0)} = 0) = 0$ mientras que x_1^\pm son mínimos locales con valor $V(x_1^\pm) = -A^2/4B \equiv V_{\min}$. Se deduce entonces que la representación gráfica del potencial es la siguiente:

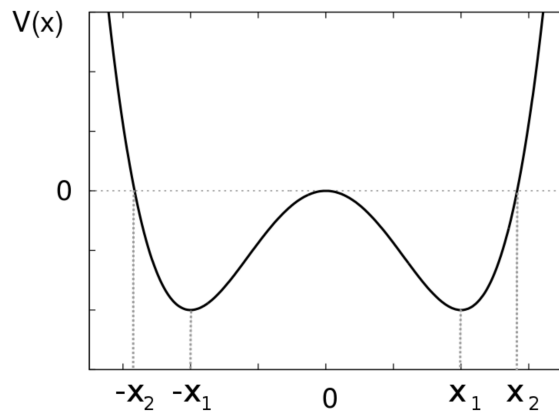


Figura 1. Potencial $V(x)$

Para obtener las trayectorias en el espacio de las fases $\Gamma = (x, p)$, con $p \equiv m\dot{x} = m\frac{dx}{dt}$ el momento conjugado a la coordenada x y donde suponemos una partícula de masa m , usamos que el sistema es conservativo por lo que su energía es constante,

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \text{cte.}$$

Resolviendo para el momento en función de la coordenada, $p(x)$, obtenemos

$$p(x) = \pm\sqrt{2m[E - V(x)]} = \pm\sqrt{2m(E + Ax^2 - Bx^4)}.$$

Definimos los puntos de retorno de la trayectoria (x_0) como aquellos puntos en los que $p(x) = 0$. De la ecuación anterior vemos que estos puntos se corresponden con los de corte del potencial con una línea de altura constante E , i.e. $E = V(x_0)$, de donde

$$E + Ax^2 - Bx^4 = 0 \quad \Rightarrow \quad x_0 = \pm\sqrt{\frac{A}{2B} \pm \frac{1}{2B}\sqrt{A^2 + 4BE}}$$

De las cuatro posibles soluciones, no todas tienen por qué ser físicas, dependiendo esto último del valor de la energía, E . Consideremos ahora los tres casos posibles de E :

- **$E > 0$:** En este caso tenemos que $(A^2 + 4BE) > A^2$ por lo que $\frac{A}{2B} - \frac{1}{2B}\sqrt{A^2 + 4BE} < 0$, lo que nos lleva a descartar las dos soluciones con signo $(-)$ en el interior de la raíz como no-físicas (raíces imaginarias). En este caso tenemos sólo dos puntos de retorno

$$x_0 = \pm\sqrt{\frac{A}{2B} + \frac{1}{2B}\sqrt{A^2 + 4BE}}$$

que se corresponden con los dos extremos donde el potencial $V(x)$ corta una línea $E > 0$. Veamos ahora los puntos de corte de la trayectoria con el eje de momentos en el espacio de las fases, i.e. los valores del momento para $x = 0$. Partiendo de la ecuación para la energía, $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, obtenemos por tanto $p_0 = p(x = 0) = \pm\sqrt{2mE}$. Finalmente, puesto que el potencial exhibe sendos mínimos en $x_1^\pm = \pm\sqrt{A/2B}$ con $V(x_1^\pm) = -A^2/4B < 0$, deducimos que $|p(x_1^\pm)| > |p_0|$, lo que completa la imagen de la trayectoria $p(x)$ en el espacio de las fases para $E > 0$, ver Fig. 2.

- **$E < 0$:** En este caso $(A^2 + 4BE) < A^2$ por lo que existen cuatro puntos de corte reales de la trayectoria $p(x)$ con el eje x ,

$$x_0 = \pm\sqrt{\frac{A}{2B} \pm \frac{1}{2B}\sqrt{A^2 + 4BE}}.$$

Por otra parte, no existen puntos de corte de la curva $p(x)$ con el eje de momentos ya que la ecuación $E = p_0^2/2m$ no tiene solución real para $E < 0$. Por tanto la trayectoria $p(x)$ queda dividida para $E < 0$ en dos trayectorias disjuntas, cada una entorno a uno de los mínimos del potencial, oscilando entre los puntos de retorno de cada mínimo, y con $|p(x)|$ tomando valores máximos en los mínimos x_1^\pm , ver Fig. 2.

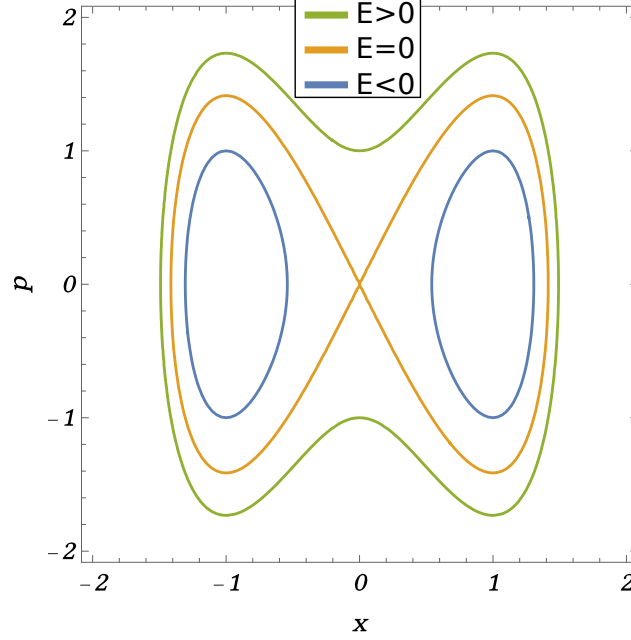


Figura 2. Curvas en el espacio de fases para distintos valores de E .

- **$E = 0$:** En este caso, límite entre los dos anteriores, tenemos tres puntos de corte con el eje x , i.e. $x_0 = 0, \pm\sqrt{A/2B}$, y un único punto de corte con el eje de momentos, $p_0 = 0$, solución de la ecuación $E = p^2/2m = 0$. La Fig. 2 representa la trayectoria en este caso.

Apartado 2: A continuación pasamos a discutir la estabilidad de los diferentes puntos fijos del potencial. Un punto fijo de la dinámica se define aquel donde $\dot{x} = 0 = \dot{p}$. Para determinarlos, partimos del hamiltoniano del sistema, $H = p^2/2m + V(x)$, y escribimos las ecuaciones de Hamilton asociadas

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad , \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -V'(x) .$$

Por tanto los puntos fijos del sistema se corresponden con los extremos del potencial, $x_1^{(0)} = 0$ y $x_1^\pm = \pm\sqrt{A/2B}$, cuando empezamos en ellos con momento nulo, $p = 0$, lo que implica $E = 0$ para $x = x_1^{(0)}$ o $E = -A^2/4B = V_{\min}$ para $x = x_1^\pm$. Para estudiar la estabilidad de estos puntos fijos, añadimos una perturbación infinitesimal $(\delta x, \delta p)$ a la condición inicial, $x = x_0^{(k)} + \delta x$ con $k = (0, \pm)$ y $p = \delta p$, y vemos cómo evoluciona en el tiempo. El punto fijo será estable si la perturbación decae en el tiempo, e inestable en caso contrario. De las ecuaciones de Hamilton

$$\dot{x} = \dot{\delta x} = \delta p \quad , \quad \dot{\delta p} = -V'(x_0^{(k)} + \delta x) \approx -V''(x_0^{(k)})\delta x$$

donde hemos usado que $\dot{x}_0^{(k)} = 0$ para $k = (0, \pm)$, ya que son puntos fijos, y hemos desarrollado en serie de Taylor hasta primer orden la función $V'(x_0^{(k)} + \delta x)$, teniendo en cuenta

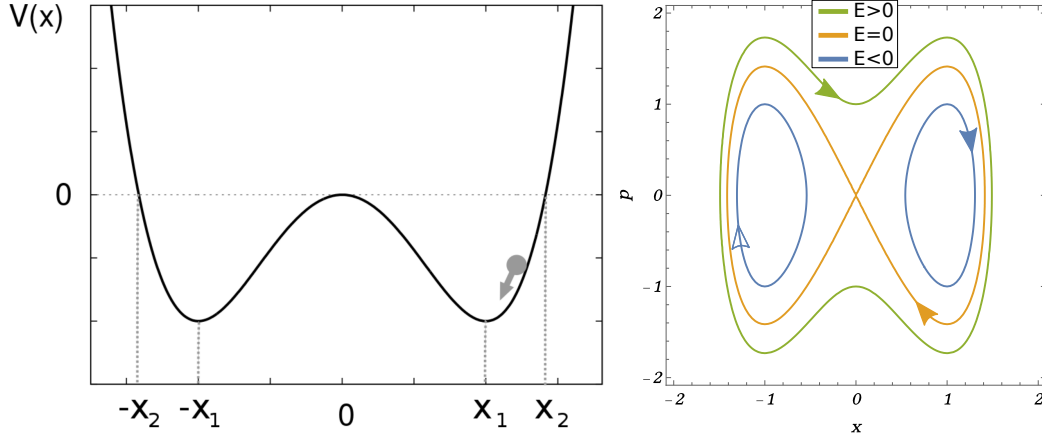


Figura 3. Trayectorias

que $V'(x_0^{(k)}) = 0$ al ser $x_0^{(k)}$ extremos del potencial. Vemos por tanto que en los puntos fijos correspondientes a los mínimos del potencial, x_1^\pm , donde $V''(x_0^{(\pm)}) > 0$, la evolución temporal de la perturbación en el momento, $\dot{\delta p}$, tiene signo contrario a δx , por lo que si δx aumenta entonces δp disminuye, y viceversa, lo que implica que estos puntos fijos son estables. Por el contrario, el punto fijo correspondiente al máximo local del potencial, $x_1^0 = 0$, es inestable, ya que ahí $V''(x_0^{(\pm)}) < 0$ por lo que $\dot{\delta p}$ tiene el mismo signo que δx : si la coordenada aumenta ($\delta x > 0$) el momento también aumenta ($\delta p > 0$), lo que a su vez implica que x sigue aumentando, etc., un mecanismo que magnifica la perturbación inicial*. Podemos visualizar la estabilidad o inestabilidad del punto fijo pensando en la respuesta de una partícula sita en dicho punto fijo y perturbada infinitesimalmente: oscilará alrededor de los mínimos y rodará *pendiente abajo* desde el máximo local.

Por último, analicemos con un poco más de detalle el punto fijo inestable, que se corresponde con el punto $x = 0 = p$ para $E = p^2/2m + V(x) = 0$. Si volvemos a la

* Podemos entender mejor esta idea solucionando el sistema de ecuaciones diferenciales linealizado para la perturbación. Si representamos el estado de la perturbación a tiempo t a través del vector columna $\vec{\Delta}(t) \equiv \begin{pmatrix} \delta x(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix}$, las ecuaciones de Hamilton para la perturbación se pueden escribir de manera compacta como $d\vec{\Delta}(t)/dt = \hat{L}\vec{\Delta}(t)$, con \hat{L} la matriz

$$\hat{L} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -V_0'' & 0 \end{pmatrix}$$

siendo $V_0'' = V''(x_1^{(0)})$. La solución de esta ecuación diferencial es simplemente $\vec{\Delta}(t) = \exp(+t\hat{L})\vec{\Delta}(0)$. Si $\vec{\varphi}_\pm$ son los dos autovectores de \hat{L} , con autovalores $\lambda_\pm = \pm\sqrt{-V_0''}$, tales que $\hat{L}\vec{\varphi}_\pm = \lambda_\pm\vec{\varphi}_\pm$, siempre podemos escribir la solución como $\vec{\Delta}(t) = \sum_{k=\pm} c_k e^{+t\lambda_k} \vec{\varphi}_k$, con $c_k = \vec{\varphi}_k \cdot \vec{\Delta}(0)$, donde hemos usado la descomposición espectral del estado inicial en la base de autovectores de \hat{L} . Si $V_0'' > 0$ (condición de mínimo local), entonces λ_\pm son imaginarios puros y la solución es oscilante (localmente estable). En cambio, si $V_0'' < 0$ (condición de máximo local), entonces λ_\pm son reales puros, con $\lambda_+ > 0$, por lo que la solución explota exponencialmente y resulta localmente inestable.

Fig. 2, para $E = 0$ la trayectoria en el espacio de las fases, $p(x)$, parece cortarse a sí misma en el punto fijo inestable $x = 0 = p$. Esto es una (aparente) violación de la unicidad de la solución de las ecuaciones de Hamilton, cuyas soluciones ya vimos que no podían cortarse entre sí ni a sí mismas. Para entender esta aparente violación y la paradoja que plantea, estudiemos el tiempo que la partícula tarda en alcanzar el punto $x = 0$ cuando comienza desde cualquier otro valor de $x_0 \neq 0$ con $E = 0$. Partiendo de la ecuación para la energía, $E = p^2/2m + V(x) = 0$, obtenemos que $p(x) = \pm\sqrt{2m(Ax^2 - Bx^4)}$. Usando esto en la primera ecuación de Hamilton $dx(t)/dt = p(t)/m = \pm\frac{1}{m}\sqrt{2m(Ax^2 - Bx^4)}$. This equation can be written as

$$dt = \pm \frac{m dx}{\sqrt{2m(Ax^2 - Bx^4)}}$$

Integrando esta ecuación un durante un tiempo arbitrario t obtenemos

$$\int_0^t dt = \pm m \int_{x_0}^{x(t)} \frac{dx}{\sqrt{2m(Ax^2 - Bx^4)}} = \pm \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{x_0}^{x(t)} \frac{dx}{x\sqrt{A - Bx^2}}$$

Por tanto el tiempo necesario para alcanzar un punto x_f es

$$t(x_0 \rightarrow x_f) = \pm \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{\mp|x_0|}^{|x_f|} \frac{dx}{x\sqrt{A - Bx^2}}$$

Esta integral es de tipo elíptico y se puede demostrar que diverge cuando $x_f \rightarrow x_1^{(0)} = 0$, i.e. cuando el punto de destino es el punto fijo inestable. Por tanto, si empezamos con $E = 0$ en cualquier punto $x_0 \neq 0$ del sistema, la partícula nunca alcanzará el punto $x_1^{(0)} = 0$, evitando de esta manera dinámica violar la unicidad de las soluciones de las ecuaciones de Hamilton. Si en cambio empezamos en el punto fijo inestable $x_1^{(0)} = 0$, siempre nos quedaremos ahí puesto que $x = 0 = p$.

Problema 2. Una partícula libre de masa m está restringida a moverse en una dimensión. Considerando que su Hamiltoniano es $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m}$ (partícula libre), demuestre que el área del recinto rectangular en el espacio de las fases 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 temporal del sistema (esto es, las ecuaciones de Hamilton preservan el volumen del espacio de las fases).

Las ecuaciones de Hamilton para este sistema unidimensional con Hamiltoniano $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m}$ admiten solución trivial

$$\begin{cases} \dot{p} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} = 0 & \Rightarrow p(t) = \text{cte} = p_i \\ \dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m} = \frac{p_0}{m} & \Rightarrow q(t) = \frac{p_i}{m}t + q_i \end{cases}$$

con la condición inicial (q_i, p_i) . Por tanto, los vértices del rectángulo en el espacio de las fases que define el enunciado evolucionan en el tiempo de la siguiente manera

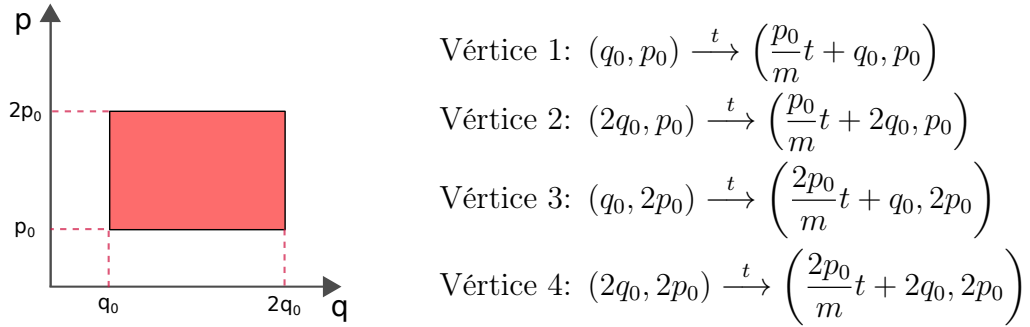


Figura 4. Espacio fásico

Inicialmente, el área del rectángulo es simplemente $A(0) = q_0 p_0$. Para calcular el área del paralelogramo que resulta al evolucionar un tiempo t la región inicial, calculamos los vectores que conectan los vértices $(1, 2)$ y $(1, 3)$ arriba a tiempo t ,

$$\vec{12} = (q_0, 0) \quad \vec{13} = \left(\frac{p_0 t}{m}, p_0\right)$$

El área del paralelogramo no es más que el módulo del vector que resulta del producto vectorial $\vec{12} \times \vec{13}$. Usando la fórmula del determinante para el producto vectorial

$$\vec{12} \times \vec{13} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ q_0 & 0 & 0 \\ \frac{p_0 t}{m} & p_0 & 0 \end{vmatrix} = (q_0, p_0) \hat{k} \quad \Rightarrow \quad A(t) = q_0 p_0 = A(0)$$

Por tanto el área de la región evolucionada un tiempo t es idéntica a la inicial y por tanto, se verifica el teorema de Liouville.

Problema 3. Consideremos un péndulo simple, formado por una masa m que cuelga de una cuerda sin masa de longitud ℓ , que oscila con una amplitud pequeña. Se supone que no hay rozamiento y que el sistema está aislado. Si la energía total del péndulo es E , encontrar la ecuación que describe el movimiento del péndulo en el espacio de fases (θ, p_θ) , donde θ es el ángulo de oscilación y p_θ es el momento conjugado. Calcular $\gamma(E)$, i.e. el número de estados con energía menor o igual a E .

Por simplicidad, vamos a fijar el origen para la energía potencial en el punto de suspensión del hilo, donde hacemos $U = 0$. La simetría del problema sugiere trabajar en coordenadas polares, $x = \ell \sin \theta$ e $y = \ell \cos \theta$. La energía cinética (T) y potencial (U) se pueden escribir en estas coordenadas como

$$T = \frac{1}{2}m \left[\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dt} \right)^2 \right] = \frac{1}{2}m\ell^2\dot{\theta}^2 \quad , \quad U = -mg\ell \cos \theta$$

donde $\dot{\theta} = d\theta/dt$. El Lagrangiano del sistema es $L(\theta, \dot{\theta}) = T - U$, y el momento conjugado a la coordenada generalizada θ se obtiene como,

$$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = m\ell^2\dot{\theta}$$

por lo que el Hamiltoniano del sistema se escribirá como

$$H(\theta, p_\theta) = T + U = \frac{p_\theta^2}{2m\ell^2} - mg\ell \cos \theta$$

En el límite de oscilaciones pequeñas, podemos aproximar $\cos \theta \approx 1 - \frac{\theta^2}{2}$, y por tanto

$$H(\theta, p_\theta) = \frac{p_\theta^2}{2m\ell^2} - mg\ell + \frac{1}{2}mg\ell\theta^2$$

Puesto que el sistema es conservativo, el Hamiltoniano se corresponde con la energía del sistema, y la trayectoria del péndulo en el espacio de las fases viene dada por la ecuación

$$E + mg\ell = \frac{p_\theta^2}{2m\ell^2} + \frac{1}{2}mg\ell\theta^2$$

o equivalentemente

$$\frac{p_\theta^2}{2m\ell^2(E + mg\ell)} + \frac{\theta^2}{\frac{2}{mg\ell}(E + mg\ell)} = 1$$

que es la ecuación de una elipse de semiejes $a = \ell\sqrt{2m(E + mg\ell)}$ y $b = \sqrt{\frac{2(E + mg\ell)}{mg\ell}}$. El número de microestados con energía menor o igual que E no es más que el área encerrada por esta elipse, i.e.

$$\gamma(E) = \pi ab = 2\pi\sqrt{\frac{\ell}{g}}(E + mg\ell)$$

Problema 4. 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 sólo a lo largo del eje vertical z . El Hamiltoniano viene dado por $H = \frac{p^2}{2} + z$, y la solución de las ecuaciones de Hamilton para la altura y el momento es $z(t) = z_0 + p_0 t - \frac{1}{2}t^2$ y $p(t) = p_0 - t$, respectivamente. Se pide:

1. Comprobar que este sistema dinámico verifica el teorema de Liouville
2. Suponiendo que cuando la partícula alcanza el suelo rebota elásticamente para volver a ascender, calcula la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en la posición z en función de la energía E (Sugerencia: utiliza la hipótesis ergódica y calcula dicha probabilidad como un promedio temporal).

Apartado 1: El teorema de Liouville afirma que el volumen de cualquier región del espacio de las fases se conserva bajo la evolución temporal Hamiltoniana. Para que se cumpla este teorema, ya sea en su versión integral o diferencial (ver notas), vimos en clase que es condición necesaria y suficiente que el Jacobiano de la transformación temporal, $(z_0, p_0) \rightarrow (z(t), p(t))$ en este caso, fuera la unidad. Si éste es el caso entonces $dq(t)dp(t) = dq_0dp_0$ y se conserva el volumen fásico. Comprobar que se cumple el teorema de Liouville se reduce por tanto a comprobar que el Jacobiano asociado a la evolución temporal en este sistema es la unidad. Usando la solución de las ecuaciones del movimiento para este sistema, el Jacobiano se escribe como

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial z(t)}{\partial z_0} & \frac{\partial z(t)}{\partial p_0} \\ \frac{\partial p(t)}{\partial z_0} & \frac{\partial p(t)}{\partial p_0} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1$$

Por tanto, se cumple el teorema de Liouville.

Apartado 2: La hipótesis ergódica establece la igualdad entre el promedio estadístico sobre el espacio de las fases y el promedio temporal sobre la dinámica. Esto es, para cualquier función dinámica $b(\alpha)$ dependiente del microestado $\alpha \in \Gamma$, esperamos que

$$\langle b \rangle \equiv \int_{\Gamma} d\alpha b(\alpha) \rho(\alpha) = \bar{b} \equiv \frac{1}{T} \int_0^T dt b(\alpha_t)$$

donde $\rho(\alpha)$ es una densidad de probabilidad definida sobre el espacio de las fases, T es el tiempo macroscópico de evolución, y $\alpha_t = U(t)\alpha_0$ es el microestado a tiempo t con condición inicial α_0 , con $U(t)$ el operador de evolución temporal.

Para usar la hipótesis ergódica para calcular la probabilidad $P(z')$ de que la partícula se encuentre a cierta altura z' en nuestro problema, lo primero es escribir el observable de interés $-P(z')$ como un promedio estadístico. De manera trivial, se cumple la identidad

$$P(z') = \int dz P(z) \delta(z - z') = I_1$$

Por tanto, la probabilidad que nos interesa no es más que el promedio estadístico de la función dinámica $\delta(z - z')$, la *función* delta de Dirac. Usando ahora la hipótesis ergódica, podemos escribir

$$P(z') = \int dz P(z) \delta(z - z') = \frac{1}{T} \int_0^T dt \delta[z(t) - z'] = I_2$$

La idea ahora es hacer un cambio de variable en la última integral I_2 para integrar sobre z en vez de sobre el tiempo, y comparando lo que resulte de este cambio con la primera integral en z , I_1 , poder leer cual es la distribución de probabilidad $P(z)$. Para realizar el cambio de variable, notamos que la energía del sistema es constante, por lo que

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

donde hemos usado que $p = \frac{dz}{dt}$, y nos hemos quedado sólo con la rama ascendente de la solución (de ahí el signo $+$ en la segunda ecuación). Por tanto

$$I_2 = \frac{1}{T} \int_0^T dt \delta[z(t) - z'] = \frac{1}{T} \int_{z(0)}^{z(T)} \frac{dz}{\sqrt{2(E - z)}} \delta(z - z') = \frac{1}{T \sqrt{2(E - z)}}$$

Comparando esta última integral con I_1 , queda claro que

$$P(z) = \frac{A}{\sqrt{2(E - z)}}$$

donde A es cierta constante que podemos fijar imponiendo la normalización de esta distribución de probabilidad. Teniendo en cuenta que el valor mínimo de z es 0 y que la altura máxima para una energía E es $z_{\max} = E$ (ya que en la altura máxima el momento es $p = 0$), tenemos que

$$1 = \int_0^E dz \frac{A}{\sqrt{2(E - z)}} = 2A\sqrt{E} \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{2\sqrt{E}} \quad \Rightarrow \quad P(z) = \frac{1}{2\sqrt{E(E - z)}}$$

Problema 5. Consideremos un oscilador armónico unidimensional de masa $m = 1$ y frecuencia $\omega = 1$, con Hamiltoniano $H = \frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2}$. Se pide:

1. Obtener la ecuación de movimiento del oscilador aplicando las ecuaciones de Hamilton
2. Demostrar que el Jacobiano de la transformación que relaciona las coordenadas $q(t)$ y $p(t)$ en un instante t con sus valores iniciales p_0 y q_0 es igual a la unidad.
3. Demostrar que el área de un recinto regular se conserva.
4. Haciendo uso del hecho de que el sistema es ergódico (lo cual implica que el promedio en la colectividad es igual al promedio en el tiempo), demostrar que la densidad de probabilidad de encontrar al oscilador de energía E en la posición q viene dada por

$$P(q) = \frac{1}{\pi \sqrt{2E - q^2}}$$

Apartado 1: En primer lugar obtenemos las ecuaciones del movimiento a partir de las ecuaciones de Hamilton aplicadas a este sistema. En particular,

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = p \quad , \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -q \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} p(t) = \dot{q}(t) \\ \dot{p}(t) = -q(t) \end{cases} \Rightarrow \ddot{q}(t) + q(t) = 0$$

La solución general de esta ecuación diferencial es $q(t) = A \sin(t + \alpha)$, con A y α una amplitud y una fase arbitrarias, respectivamente, que quedarán fijadas más abajo a través de las condiciones iniciales. Usando que $p = \dot{q}$, obtenemos asimismo que $p(t) = A \cos(t + \alpha)$, y utilizando las fórmulas trigonométricas para la suma de ángulos llegamos a

$$q(t) = A \sin \alpha \cos t + A \cos \alpha \sin t$$

$$p(t) = A \cos \alpha \cos t - A \sin \alpha \sin t$$

Las condiciones iniciales (q_0, p_0) a tiempo $t = 0$ han de cumplir

$$\begin{cases} q_0 = A \sin \alpha \\ p_0 = A \cos \alpha \end{cases} \Rightarrow \tan \alpha = \frac{q_0}{p_0}$$

de donde finalmente tenemos

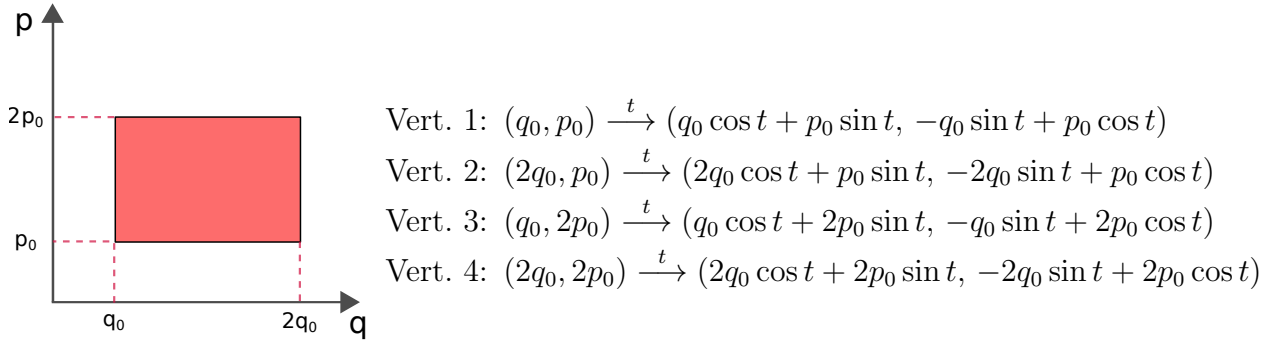
$$q(t) = q_0 \cos t + p_0 \sin t$$

$$p(t) = p_0 \cos t - q_0 \sin t$$

Apartado 2: Demostremos ahora que el Jacobiano de la transformación $(q_0, p_0) \rightarrow (q(t), p(t))$ es la unidad. Para ello

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial q(t)}{\partial q_0} & \frac{\partial q(t)}{\partial p_0} \\ \frac{\partial p(t)}{\partial q_0} & \frac{\partial p(t)}{\partial p_0} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{vmatrix} = \sin^2 t + \cos^2 t = 1 \quad \text{q.e.d.}$$

Apartado 3: El que el Jacobiano anterior sea la unidad implica que el volumen de una region del espacio de las fases permanece invariante a lo largo de la evolución temporal del sistema (teorema de Liouville). Para verlo explícitamente, consideremos un rectángulo en el espacio de las fases, y calculemos la evolución de sus vértices,



Calculemos ahora el área del romboide resultante tras la evolución temporal,

$$\vec{12} = (q_0 \cos t, -q_0 \sin t), \quad \vec{13} = (p_0 \sin t, p_0 \cos t)$$

$$\vec{12} \times \vec{13} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ q_0 \cos t & -q_0 \sin t & 0 \\ p_0 \sin t & p_0 \cos t & 0 \end{vmatrix} = (q_0 p_0 \cos^2 t + q_0 p_0 \sin^2 t) \hat{k} = q_0 p_0 \hat{k} \Rightarrow A = q_0 p_0$$

Por tanto vemos que el área es idéntica a la inicial y se verifica el teorema de Liouville.

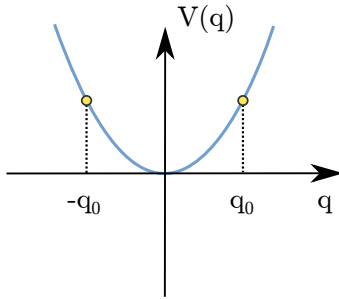
Apartado 4: Nos preguntamos ahora por la densidad de probabilidad $P(q')$ de encontrar al oscilador en q' . Al igual que en el problema 4, podemos escribir trivialmente

$$P(q') = \int dq P(q) \delta(q - q') = \langle \delta(q - q') \rangle = I_1$$

Por tanto podemos interpretar $P(q')$ como el promedio estadístico de la función dinámica $\delta(q - q')$. Usando ahora la hipótesis ergódica, esperamos que

$$P(q') = \int dq P(q) \delta(q - q') = \frac{1}{T} \int_0^T dt \delta[q(t) - q'] = I_2$$

A continuación vamos a cambiar la variable de integración en la segunda integral a q . Para ello, acudimos a la ecuación para la energía del oscilador, que se conserva, luego



$$p = \frac{dq}{dt} \quad E = \frac{1}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} q^2 \Rightarrow \frac{dq}{dt} = \sqrt{2E - q^2}$$

$$dt = \frac{dq}{\sqrt{2E - q^2}}$$

donde los puntos de retorno del oscilador son $\pm q_{\max}$, con $q_{\max} = \sqrt{2E}$. Por tanto

$$P(q') = \int dq P(q) \delta(q - q') = \frac{1}{T} \int_{-q_{\max}}^{q_{\max}} dq \frac{\delta(q - q')}{\sqrt{2E - q^2}} = \frac{A}{\sqrt{2E - q'^2}}$$

donde $A = 1/\pi$ es una constante que obtenemos normalizando la distribución anterior, usando la integral

$$\int_0^a \frac{dq}{a^2 - q^2} = \frac{\pi}{2}$$

Por tanto, hemos encontrado que

$$P(q) = \frac{1}{\pi \sqrt{2E - q^2}} \quad \text{q.e.d.}$$

Problema 6. Estudiar la ergodicidad de un movimiento rectilíneo y uniforme

$$\begin{aligned}x(t) &= t \\ y(t) &= \omega t\end{aligned}$$

en un rectángulo bidimensional donde $0 \leq x \leq L_x$, $0 \leq y \leq L_y$, y $x + L_x \equiv x$, $y + L_y \equiv y$, es decir, con condiciones periódicas de contorno ¿Cuándo es ergódico el sistema? Demostrar analíticamente.

Demostrar la ergodicidad de un sistema equivale a probar la igualdad de los promedios temporales y sobre el espacio de las fases. En este caso, queremos estudiar bajo qué condiciones el valor medio de una función arbitraria $f(x, y)$, analítica sobre el plano, es igual al promedio temporal de dicha función a lo largo de una trayectoria $(x(t), y(t))$ resultado de la dinámica del sistema. Si el sistema es ergódico, debe cumplirse por tanto que

$$\bar{f} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt f[x(t), y(t)] = \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy f(x, y) \equiv \langle f \rangle$$

donde hemos supuesto una densidad de probabilidad constante en todo el plano ya que el enunciado no dice nada al respecto. Puesto que $x(t)$ e $y(t)$ son variables periódicas, la función $f(x, y)$ ha de ser también periódica. Admite por tanto un desarrollo en serie de Fourier

$$f(x, y) = \sum_{m, n \in \mathbb{Z}} a_{mn} e^{2\pi i(mx/L_x + ny/L_y)}$$

donde los coeficientes a_{mn} vienen dados por

$$a_{mn} = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} f(x, y) e^{-2\pi i(mx/L_x + ny/L_y)} dx dy$$

Partiendo de este desarrollo, podemos realizar el promedio temporal de $f[x(t), y(t)]$,

$$\begin{aligned}\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt f[x(t), y(t)] &= a_{00} + \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{m, n \neq 0} a_{mn} \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{2\pi i[mx(t)/L_x + ny(t)/L_y]} \\ &= a_{00} + \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{m, n \neq 0} a_{mn} \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{2\pi i(mt/L_x + n\omega t/L_y)} \\ &= a_{00} + \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{m, n \neq 0} \frac{a_{mn}}{2\pi i \left(\frac{m}{L_x} + \omega \frac{n}{L_y} \right)} \left[e^{2\pi i T \left(\frac{m}{L_x} + \omega \frac{n}{L_y} \right)} - 1 \right]\end{aligned}$$

donde en la primera ecuación hemos separado el término con $n = 0 = m$ el resto de términos de la serie, en la segunda ecuación hemos usado que $x(t) = t$ e $y(t) = \omega t$, resolviendo de manera sencilla la integral en la tercera ecuación. Una vez llegados a este punto, pueden ocurrir dos cosas:

- Si $(\frac{m}{L_x} + \omega \frac{n}{L_y}) \neq 0 \forall n, m \in \mathbb{Z}$ con $n, m \neq 0$, entonces ningún término de la serie de la ecuación anterior diverge, por lo que el resultado de la suma será una función periódica y acotada. En ese caso

$$\bar{f} = a_{00} + \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\text{func. periódica y acotada}}{T} = a_{00} = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} f(x, y) dx dy = \langle f \rangle$$

lo que demuestra la ergodicidad del sistema ($\bar{f} = \langle f \rangle$) en este caso. La condición $(\frac{m}{L_x} + \omega \frac{n}{L_y}) \neq 0$ equivale a imponer que $\frac{L_x}{L_y} \omega \neq -\frac{m}{n} \forall n, m \neq 0$, o lo que es equivalente, imponer que el parámetro $\frac{L_x}{L_y} \omega$ sea irracional.

- Si $\exists (m_0, n_0) : (\frac{m_0}{L_x} + \omega \frac{n_0}{L_y}) = 0$, o equivalentemente si $\frac{L_x}{L_y} \omega = -\frac{m_0}{n_0}$ es racional, el término de la serie anterior asociado al par (m_0, n_0) será indeterminado $(0/0)$, y resolviendo dicha indeterminación usando la regla de L'Hopital $[(e^x - 1)/x \rightarrow 1 \text{ cuando } x \rightarrow 0]$ se comprueba que dicho término resulta en una contribución no nula, en cuyo caso $\bar{f} \neq a_{00} = \langle f \rangle$ y el sistema no es ergódico.

¿Qué sucede a nivel físico cuando $\frac{L_x}{L_y} \omega$ es racional y por tanto el sistema no es ergódico? En este caso, volviendo a las ecuaciones del movimiento, tenemos que $x(t) = t$ e $y(t) = \omega t = -\frac{m_0 L_y}{n_0 L_x} t$. Por tanto existe un tiempo $t_0 = n_0 L_x$ en el cual $x(t_0) = t_0 = n_0 L_x = 0$ e $y(t_0) = -\frac{m_0 L_y}{n_0 L_x} t_0 = -m_0 L_y = 0$ por la periodicidad del sistema, i.e. volvemos al origen después de un tiempo finito y a partir de ahí repetimos la misma trayectoria. Por tanto, el sistema no es ergódico cuando no explora **densamente** todo el espacio de las fases, sino sólo una fracción de él (de medida nula en este caso). Por otra parte, cuando $\frac{L_x}{L_y} \omega$ es irracional la trayectoria explora densamente el plano a lo largo del tiempo y el sistema es ergódico.

Problema 7. El Hamiltoniano de un electrón en un campo magnético de magnitud B aplicado en la dirección del eje z viene dado por $\hat{H} = -\mu_B \hat{\sigma}_z B$ donde $\hat{\sigma}_z$ es el operador de espín de Pauli y μ_B el magnetón de Bohr. Calcula:

1. La matriz densidad en la base en la que $\hat{\sigma}_z$ es diagonal. El promedio de $\hat{\sigma}_z$ en esta representación.
2. La matriz densidad en la base en la que $\hat{\sigma}_x$ es diagonal. El promedio de $\hat{\sigma}_z$ en esta representación.

Las componentes $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ y $\hat{\sigma}_z$, del operador vectorial de espín de Pauli son operadores que satisfacen las siguientes relaciones,

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1, & \quad \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_z \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = -\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_x, & \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = -\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_y\end{aligned}$$

Como $\hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ es el producto escalar de dos vectores, el Hamiltoniano para un campo magnético en la dirección z es simplemente $\hat{H} = -\mu_B B \hat{\sigma}_z$. La matriz densidad de un sistema cuántico en equilibrio con un entorno macroscópico con el que puede intercambiar energía se escribe como (colectividad canónica)

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$$

donde $Z = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})$ es la función de partición canónica, que normaliza la matriz de densidad anterior. Nos piden calcular esta matriz densidad canónica en diferentes bases del espacio de Hilbert.

Apartado 1: En este apartado trabajamos en la base en la que $\hat{\sigma}_z$ es diagonal. Como $\hat{\sigma}_z^2 = 1$, los autovalores de $\hat{\sigma}_z$ son $\lambda_z^\pm = \pm 1$, con autovectores

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

En esta base, los operadores de Pauli se escriben como

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

La matriz densidad $\rho = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})}$ puede escribirse por tanto como**,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{e^{\beta \mu_B B} + e^{-\beta \mu_B B}} \begin{pmatrix} e^{\beta \mu_B B} & 0 \\ 0 & e^{-\beta \mu_B B} \end{pmatrix}$$

**Si \hat{A} es una matriz diagonal con autovalores a_k , con $k \in [1, n]$, tenemos $e^{\hat{A}} = \begin{pmatrix} e^{a_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{a_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{a_n} \end{pmatrix}$.

El valor medio de $\hat{\sigma}_z$ viene dado por

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\sigma}_z) = \frac{e^{\beta\mu_B B} - e^{-\beta\mu_B B}}{e^{\beta\mu_B B} + e^{-\beta\mu_B B}} = \tanh(\beta\mu_B B)$$

Apartado 2: Diagonalizando en primer lugar el operador de Pauli $\hat{\sigma}_x$, obtenemos que sus autovalores son $\lambda_x^\pm = \pm 1$, con autovectores en la base z

$$|X_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |X_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Por tanto, la matriz de cambio de base se escribe como

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Podemos comprobar que efectivamente ésta es la matrix de cambio de base correcta aplicando la transformación de similitud al operador $\hat{\sigma}_x$, i.e.

$$\hat{\sigma}'_x = \hat{A}^T \hat{\sigma}_x \hat{A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

De la misma manera, aplicando la transformación \hat{A} a la matriz densidad antes obtenida, llegamos a

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\tanh(\beta\mu_B B) \\ -\tanh(\beta\mu_B B) & 1 \end{pmatrix}$$

En esta representación, $\hat{\sigma}_z$ se escribe como

$$\hat{\sigma}'_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Y por tanto su valor medio vendrá dado por

$$\langle \hat{\sigma}'_z \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}' \hat{\sigma}'_z) = \text{Tr} \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\tanh(\beta\mu_B B) \\ -\tanh(\beta\mu_B B) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \tanh(\beta\mu_B B)$$

esto es, el mismo valor medio que en el apartado 1. Vemos por tanto que el valor medio de un observable no depende de la base en la que se mida, una propiedad física que resulta de la invariancia de la traza bajo cambios de base.