Mecánica Estadística II - Curso 2016
Práctica 2: Estadística cuántica y clásica - Coherencia en el gas ideal.

1 Preguntas Previas

a ¿Cuál es el valor mínimo que puede tomar la entropía de un sistema físico? ¿Puede ser negativa?

b Eisberg y Resnick discuten en el libro de física Moderna (*Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei and particles*, Segunda Edición, Ed. John Wiley & sons, 1985, pág. 252) sobre la imposibilidad de "encontrar" experimentalmente el eje z de un átomo de hidrógeno aislado (todas las direcciones son equivalentes: por qué el lóbulo del orbital de un átomo iba a elegir una en particular?). Desde ese punto de vista, evalúe; en un condensado de Bose a muy baja temperatura, existe una función de onda macroscópica que describe al conjunto de $N \approx 10^{23}$ partículas. ¿Qué fase global espera que tenga esa función de onda?

c Pensando en las unidades y recordando que debe haber un logaritmo (¿por qué?), reconstruya sin hacer la cuenta la entropía de un gas idea (como para el caso del potencial químico piense: ¿de qué cantidades dispone con unidades de longitud?). Pensando en la entropía microcanónica como $k_B ln(\Omega)$ interprete la forma tomada por Ω. Luego de obtenida esta expresión, y a modo de chequeo: recupere la dependencia en T, y a partir de ella y conociendo las ecuaciones de estado, la dependencia de S en los parámetros extensivos.

d ¿Qué interpretación se le da a la longitud de onda térmica? Discuta a partir de esto su comportamiento con la masa y la temperatura.

e ¿Qué miden los elementos diagonales del operador densidad de una partícula? ¿Qué miden los no diagonales?

2 Problemas

Cuando tratamos con sistemas cuánticos, solemos representar un microestado por un vector de un espacio de Hilbert, mientras que el estado macroscópico se representa mediante el operador (o matriz) densidad.

$$\hat{D} = \sum_{\lambda} |\psi_\lambda\rangle p_\lambda \langle\psi_\lambda|$$

donde p_λ es la probabilidad del microestado $|\psi_\lambda\rangle$, y por tanto $\sum_\lambda p_\lambda = 1$. Los elementos diagonales de este operador en una base ortonormal $|u_n\rangle$, D_{u_n,u_n}, son las llamadas poblaciones asociadas a esa base, mientras que los elementos no diagonales D_{u_n,u_m} son las coherencias. El valor medio de un observable en un sentido general (que combina tanto a los valores esperados cuánticos como al promedio estadístico clásico) puede escribirse $\langle A\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{D}\hat{A})$.

1. **Poblaciones, coherencias, e interferencia cuántica.** Sea un observable $\hat{A}$ cuyos autoestados $\{|a_j\rangle, \hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle\}$, conforman una base ortonormal del espacio de estados. Sea otro observable $\hat{B}$, con una base ortonormal de autoestados $\{|b_i\rangle\}$, tal que $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$. Supondremos que p_1 y p_2 son dos números reales y positivos, con $p_1 + p_2 = 1$.

(a) Tenemos un sistema que se encuentra en el estado dado el por $|\Psi\rangle = \sqrt{p_1}|a_1\rangle + \sqrt{p_2}|a_2\rangle$, mientras el estado de otro sistema está descripto por el operador densidad $\hat{D} = |a_1\rangle p_1 \langle a_1| + |a_2\rangle p_2 \langle a_2|$. Encontrar $P(a_1)$ (la probabilidad de medir el autovalor a_1) y $P(a_2)$ en ambos sistemas.

(b) Utilizando los ingredientes dados al comienzo del problema (esto es, pensando en realizar medidas de los observables $\hat{A}$ y $\hat{B}$) muestre una diferencia escencial entre ambos estados. Ayuda: piense en el fenómeno de interferencia cuántica.

(c) Escribir el operador densidad $\hat{D}'$ (notar que es único: a diferencia de los vectores de estado, no hay fases globales) que tenga el mismo contenido físico que el $|\Psi\rangle$. Calcular las poblaciones $\hat{D}^{'}_{a_j a_j}$ y las coherencias $\hat{D}^{'}_{a_j a_k}$ de este operador. Escribir $P'(a_1)$ y $P'(b_i)$ en términos de las anteriores. Calcular poblaciones y coherencias del operador $\hat{D}$, y comparar con las de $\hat{D}'$.

(d) Supongamos ahora que el sistema está descripto por un operador densidad más general, $\hat{D} = \sum_\lambda |\Psi_\lambda\rangle\, p_\lambda \langle \Psi|$ i) Muestre que las poblaciones $\hat{D}_{a_j a_j}$ seguirán siendo positivas. ii) Si midiera N veces el observable $\hat{A}$, en N sistemas idénticos preparados en idénticas condiciones ¿En cuántos sistemas espera medir el autovalor a_j? iii) ¿Puede decirse algo a priori del valor de las coherencias?

2. Consideremos el elemento de matriz en la representación de coordenadas de la matriz densidad $\rho_1(\vec{r}, \vec{r}') = N\langle \vec{r}|\hat{D}_1|\vec{r}'\rangle$, donde $\hat{D}_1$ es la matriz reducida de una partícula.

   (a) ¿Bajo que condiciones se satisface $\rho_1(\vec{r}, \vec{r}') = \rho_1(\vec{r} - \vec{r}')$?.

   (b) En esas condiciones y considerando partículas no interactuantes muestre que $\rho_1(\vec{r} - \vec{r}')$ se puede escribir como la anti-transformada de Fourier del número de partículas en el espacio de momentos.

   (c) Muestre que $\rho_1(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{N}{V} e^{-\pi|\vec{r}-\vec{r}'|^2/\lambda_T^2}$. ¿Cuál es el significado de λ_T?.

   (d) En el caso de un gas ideal partículas bosónicas conservadas ¿ cuál es el límite $|\vec{r} - \vec{r}'| \to \infty$ de $\rho_1(\vec{r} - \vec{r}')$?. ¿Qué interpretación tiene?

3. **Longitud de onda térmica y límite clásico.** El operador densidad condensa la información que tenemos del macroestado de un sistema. La entropía asocia un número $S(\hat{D})$ a cada posible operador $\hat{D}$. $S(\hat{D})$ cuantifica la cantidad de información o, de otro modo, el grado de desorden del macroestado. Definimos la entropía estadística como

$$S(\hat{D}) = -k_B \mathrm{Tr}(\hat{D} \log \hat{D}).$$

   En el límite clásico, la expresión anterior toma la forma

$$S(D_N) = -k_B \int d\tau D_N \log D_N.$$

   (a) Cierto sistema clásico compuesto por una sola partícula está descrito por una densidad de probabilidad $D_1(\vec{r}; \vec{p})$. Esta densidad es constante dentro de una región cúbica del espacio de fases de tamaño $\hbar^3$, y se anula fuera de ella. Muestre que este macroestado clásico tiene asociada una entropía nula.

   (b) Siguiendo el item anterior, ¿Qué sucede con la entropía si achicáramos aún más el volumen del espacio de fases donde puede existir el sistema? ¿Puede corresponder esa situación a algún sistema físico real?

   (c) Si suponemos que la partícula es libre y de masa m en equilibrio canónico, dentro de un volumen cúbico $V = L^3$: cuál es el orden de magnitud del rango de impulsos Δp en el que es probable encontrar a la partícula, ? Teniendo en cuenta el ítem anterior, cuál será entonces el rango mínimo Δx (en unidades de λ_T) en que será posible definir la posición de esa partícula clásica? Qué pasaría si $\Delta x \approx L$?

4. **Interferencia en ondas de materia.** La figura 1 muestra la densidad de dos condensados de Bose -Einstein que se mueven el uno hacia el otro (arriba-abajo) y comienzan a superponerse. Las franjas de interferencia tiene un espaciado de 1.5×10^{-5}cm

(a) Si se tratara de un gas ideal clásico: estimar la longitud dentro de la cual espera encontrar coherencia (i.e., capacidad de interferencia entre dos puntos distintos de la misma función de onda). Es ese número consistente con las distancias dentro de las cuales se observa interferencia? Explique cómo la distribución de partículas en el espacio de impulsos entra en la interpretación del fenómeno observado.

(b) Dada la figura, encontrar la velocidad relativa entre los dos condensados.

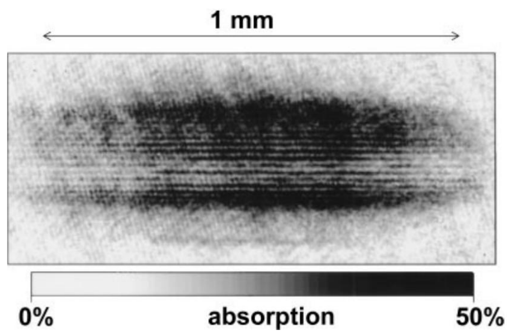

Figure 1: Problema 4 - Dos condesados de Bose-Einstein