**Temas avanzados de termodinámica y física estadística – 2do cuatrimestre de 2020**

**Guía 6:** *Relaciones de trabajo cuánticas*

Se trata de verificar la identidad de Jarzynski,

$$\left\langle e^{-\beta W} \right\rangle = e^{-\beta \Delta F},$$

para un sistema cuántico muy sencillo. Un spin $1/2$ es preparado en un estado térmico con temperatura $1/k\beta$ en presencia de un campo magnético constante $\boldsymbol{B}_0$ de módulo $B$ en la dirección $x$. Eligiendo un sistema de unidades adecuado, el hamiltoniano de equilibrio es

$$H_0 = -\boldsymbol{B}_0 \cdot \boldsymbol{s} = -B s_x,$$

donde $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{\sigma}/2$ es el operador de spin. En el instante $t = 0$ el sistema se aísla térmicamente y se mide su energía. En el intervalo $0 \leq t \leq \tau$ se le aplica el siguiente protocolo: se hace rotar el campo magnético en el plano $xy$ con velocidad angular $\omega$ constante, $\boldsymbol{B}(t) = B[\cos(\omega t)\hat{\boldsymbol{x}} + \sin(\omega t)\hat{\boldsymbol{y}}]$, de manera que el hamiltoniano es

$$H(t) = -\boldsymbol{B}(t) \cdot \boldsymbol{s} = -B[\cos(\omega t) s_x + \sin(\omega t) s_y].$$

En el instante $t = \tau$ se vuelve a medir la energía. Si $E_i$ es el resultado de la primera medición y $E_f$ el de la segunda, el trabajo realizado sobre el sistema es $W = E_f - E_i$. Dado que la energía sólo puede tomar dos valores, $\pm B/2$, hay tres valores posibles para el trabajo, $W = B, -B, 0$. El primer resultado se obtiene si la primera medición arroja $E_i = -B/2$ y la segunda $E_f = B/2$. Así pues, la probabilidad de ese resultado es

$$\begin{aligned} P(W = B) &= P(E_i = -B/2, E_f = B/2) = P(E_f = B/2 \,|\, E_i = -B/2) P(E_i = -B/2) \\ &= |\langle \psi_+(\tau) | U(\tau) | \psi_-(0) \rangle|^2 \langle \psi_-(0) | \rho_i | \psi_-(0) \rangle, \end{aligned} \tag{1}$$

donde $|\psi_\pm(t)\rangle$ es el autoestado de $H(t)$ con autovalor $\pm B/2$, $U$ es el operador de evolución temporal y $\rho_i$ es la matriz densidad térmica que describe el estado del sistema antes de hacer la primera medición. Su trabajo va a consistir en calcular explícitamente las probabilidades de los tres valores del trabajo, y a partir de ahí verificar la identidad de Jarzynski.

(a) Primero de todo, ¿cuánto vale $\Delta F$ en este caso?

(b) Obtenga expresiones análogas a (1) para las probabilidades de los otros dos valores del trabajo.

(c) Calcule los valores de expectación $\langle \psi_\pm(0) | \rho_i | \psi_\pm(0) \rangle$.

(d) Escriba los autovectores $|\psi_\pm(t)\rangle$ en la base de autovectores de $s_z$.

(e) Calcule la matriz $V_{ij}(t) = \langle \psi_i(t) | U(t) | \psi_j(0) \rangle$, con $i, j = \pm$. Para hacer eso, muestre primero a partir de la ecuación de Schrödinger $i\dot{U} = HU$ que el vector

$$V_j = \begin{pmatrix} V_{+j} \\ V_{-j} \end{pmatrix}$$

cumple la ecuación

$$i\dot{V}_j = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} B & -\omega \\ -\omega & -B \end{pmatrix} V_j.$$

Ésta es una ecuación de Schrödinger con un hamiltoniano independiente del tiempo, que se resuelve fácilmente diagonalizando el hamiltoniano. Resolviéndola, e imponiendo la condición inicial adecuada, obtendrá lo que se pide. A modo de ejemplo,

$$V_{++}(t) = \cos(\Omega t/2) - i\frac{B}{\Omega}\sin(\Omega t/2),$$

donde $\Omega = \sqrt{\omega^2 + B^2}$.

(f) Calcule las probabilidades de los distintos valores del trabajo, y verifique que se cumple la identidad de Jarzynski.

(g) Estudie el caso en que la rotación es infinitamente lenta ($\omega \to 0$, $\tau \to \infty$ con $\omega\tau$ fijo) y discuta sus resultados.