Temas avanzados de termodinámica y física estadística – 2do cuatrimestre de 2023

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 $1/2$ está sometido a un campo magnético de módulo B constante en una dirección $\hat{n}$ variable del plano xy, de manera que su hamiltoniano es

$$H = -\frac{1}{2}B\hat{n}\cdot\vec{\sigma} = -\frac{1}{2}B(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y),$$

donde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector formado por las tres matrices de Pauli, y hemos elegido unidades en las que tanto $\hbar$ como el factor giromagnético son iguales a 1. El sistema experimenta el siguiente proceso:

- A tiempo $t < 0$, el sistema está en equilibrio con un reservorio a temperatura T, y la dirección del campo magnético es $\hat{n} = \hat{x}$.
- A $t = 0$ el sistema se aísla del reservorio y se mide su energía.
- En el intervalo $0 < t < \tau$, con el sistema aislado del reservorio, se hace rotar la dirección del campo a velocidad angular ω constante, $\hat{n}(t) = \cos(\omega t)\hat{x} + \sin(\omega t)\hat{y}$.
- A $t = \tau$ se vuelve a medir la energía del sistema.
- A $t > \tau$, el sistema se vuelve a poner en contacto con el reservorio, con la dirección del campo constante, $\hat{n} = \hat{n}(\tau)$.

Si E_i es el resultado de la primera medición de la energía 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 que la probabilidad de ese resultado es

$$\begin{aligned} P(W = B) &= P(E_i = -B/2, E_f = B/2) = P(E_f = B/2 \,|\, E_i = -B/2)P(E_i = -B/2) \\ &= |\langle \downarrow, \hat{n}(\tau) \,|\, U(\tau) \,|\, \uparrow, \hat{x}\rangle|^2 \, \frac{e^{\beta B/2}}{Z}, \end{aligned} \tag{1}$$

donde $|\uparrow, \hat{n}\rangle$ es el autoestado de $\hat{n}\cdot\vec{\sigma}$ con autovalor 1, $|\downarrow, \hat{n}\rangle$ lo mismo con autovalor -1, $U(\tau)$ es el operador de evolución entre $t = 0$ y $t = \tau$, y Z es la función de partición correspondiente a $\hat{n} = \hat{x}$. El objetivo del problema es calcular explícitamente la probabilidad de cada valor del trabajo, y a partir de ahí verificar que se cumple la identidad de Jarzynski.

(a) Primero de todo, ¿cuánto vale ΔF en este caso?

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

(c) Calcule los vectores $|\uparrow, \hat{n}(t)\rangle$ y $|\downarrow, \hat{n}(t)\rangle$ para $0 \leq t \leq \tau$.

(d) Calcule los vectores $|\psi_\uparrow(t)\rangle = U(t)|\uparrow, \hat{x}\rangle$ y $|\psi_\downarrow(t)\rangle = U(t)|\downarrow, \hat{x}\rangle$ para $0 \leq t \leq \tau$, resolviendo la ecuación de Schrödinger $i|\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle$ con las condiciones iniciales adecuadas.

Ayuda: la ecuación de Schrödinger puede parecer complicada porque el hamiltoniano depende del tiempo, pero en realidad es sencilla. Escribiendo $|\psi\rangle = (\psi_1, \psi_2)$, se obtiene un sistema de ecuaciones acopladas para ψ_1 y ψ_2, que se pueden desacoplar multiplicando una de las ecuaciones por un factor adecuado y derivándola. Para que sirva de referencia, la primera componente de $|\psi_\uparrow(t)\rangle$ es

$$(\psi_\uparrow)_1(t) = \frac{e^{-i\omega t/2}}{2\sqrt{2}} \left[\left(1 + \frac{\omega + B}{\Omega}\right) e^{i\Omega t/2} + \left(1 - \frac{\omega + B}{\Omega}\right) e^{-i\Omega t/2} \right],$$

donde $\Omega = \sqrt{\omega^2 + B^2}$ (nótese que, con nuestra elección de unidades, ω y B tienen las mismas unidades). Se recomienda chequear sus resultados estudiando lo que pasa cuando $\omega = 0$.

(e) A partir de lo anterior, calcule la probabilidad de los distintos valores del trabajo y verifique que se cumple la identidad de Jarzynski.

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