MECÁNICA ESTADÍSTICA **Curso 2019**

Trabajo práctico N° 3

Entropía - 25/03/19

Entropía. 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

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

y en el límite clásico, como

$$\boxed{S[D_N] = -k_B \int d\tau D_N \log D_N = -k_B \langle \log D_N \rangle,}$$

en donde $k_B \approx 1{,}3806503 \times 10^{-23} Joule/K$ es la constante de Boltzmann.

Bibliografía sugerida: R. Balian

Problema 1.

a) Muestre que la entropía es nula para un estado puro (es decir, la información es completa).

b) Supongamos que los kets posibles pertenecen a un subespacio de dimensión W. Mostrar que la entropía es máxima e igual a $k_B \log W$ si las probabilidades de todos los kets son iguales (es decir, la información sobre el sistema es mínima, o el desorden máximo).
Ayuda: utilice la desigualdad, válida para operadores semidefinidos positivos, $\mathrm{Tr}\hat{X} \ln \hat{Y} - \mathrm{Tr}\hat{X} \ln \hat{X} \leq \mathrm{Tr}\hat{Y} - \mathrm{Tr}\hat{X}$*).*

c) La entropía del agua a temperatura ambiente es 70 J/mol K. Calcule el número de microestados que corresponden al macroestado de 1 mg de agua a temperatura ambiente, suponiendo que son todos equiprobables.

d) Supongamos que tenemos un retículo de N_A momentos magnéticos o *espines* cuya proyección en el eje z puede solamente tomar los valores $\pm\hbar/2$. Encontrar el operador $\hat{D}$ que describe a un macroestado en que todos los microestados son equiprobables, y calcular su entropía. (¿Por qué es importante que hablemos de un *retículo*?)

Problema 2. Demuestre las siguientes propiedades de la entropía $S(\hat{D}) = -k_B \mathrm{Tr}(\hat{D} \ln \hat{D})$:

a) Para un sistema compuesto de dos subsistemas independientes a y b, $S(\hat{D}_{ab}) = S(\hat{D}_a) + S(\hat{D}_b)$.

b) Si hay correlaciones entre los subsistemas, entonces $S(\hat{D}_{ab}) \leq S(\hat{D}_a) + S(\hat{D}_b)$.

c) El resultado del item anterior permite que el grado de desorden de una parte sea mayor que la de todo el sistema. Verificar la veracidad de lo anterior, aplicandolo al caso de los dos espines acoplados en el estado singulete, estudiado en la primera práctica (la entropía de un subsistema puede utilizarse para medir el grado de entrelazamiento en un dado sistema).

Problema 3.

a) Cierto sistema clásico compuesto por una sola partícula está descripto por una densidad de probabilidad $D_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. 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 achicamos aún más el volumen del espacio de fases donde puede existir el sistema?

c) Supongamos que tenemos N partículas idénticas cuyas posiciones e impulsos son conocidos, $\{\mathbf{r}_0^N\} \equiv \{\mathbf{r}_1^0, ..., \mathbf{r}_N^0\}$, y $\{\mathbf{p}_0^N\} \equiv \{\mathbf{p}_1^0, ..., \mathbf{p}_N^0\}$.

   (I) Convénzase de que la densidad de probabilidad en el espacio de las fases debe estar dada por $D_N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = h^{3N} \sum_{(i_1,...,i_N)=perm(1,...,N)} \delta(\mathbf{r}_{i_1} - \mathbf{r}_1^0)\delta(\mathbf{p}_{i_1} - \mathbf{p}_1^0 -)...\delta(\mathbf{r}_{i_N} - \mathbf{r}_N^0)\delta(\mathbf{p}_{i_N} - \mathbf{p}_N^0)$

   (II) Muestre que $S(D_N) \longrightarrow -\infty$. Relacione esto con el punto *b)* anterior.