FÍSICA da MATÉRIA CONDENSADA

Mestrado em Engenharia Física Tecnológica

Série 1c

1. Em teoria da informação [1] a função medindo a falta de conhecimento, ou entropia, de um dado sistema, descrito pela distribuição de probabilidades p_i, deve satisfazer os seguintes quatro axiomas:

1. $S(1/M, 1/M, \ldots, 1/M) = f(M)$ é uma função monótona crescente de M $(M = 1, 2, \ldots)$,

2. $f(ML) = f(M) + f(L)$ $(M, L = 1, 2, \ldots)$,

3.
$$\begin{aligned} S(p_1, \ldots, p_M) &= S(p_1 + \cdots + p_r, p_{r+1} + \cdots + p_M) \\ &+ (p_1 + \cdots + p_r) S(\frac{p_1}{\sum_{i=1}^{r} p_i}, \ldots, \frac{p_r}{\sum_{i=1}^{r} p_i},) \\ &+ (p_{r+1} + \cdots + p_M) S(\frac{p_{r+1}}{\sum_{i=r+1}^{M} p_i}, \ldots, \frac{p_M}{\sum_{i=r+1}^{M} p_i}) \end{aligned}$$

$(r = 1, 2, \ldots, M-1)$,

4. $S(p, 1-p)$ é uma função contínua de p.

Demonstra-se então que a única função satisfazendo estes quatro axiomas é $S = -k \sum_{i=1}^{M} p_i \log p_i$.

a) Admitindo que conhecemos os valores expectáveis de várias funções f_i^α, $\alpha = 1, \ldots, P$, dados por $\sum_{i=1}^{M} p_i f_i^\alpha =< f^\alpha >$ e que a distribuição de probabilidade deve estar normalizada, i.e. que $\sum_{i=1}^{M} p_i = 1$, maximize a entropia sujeita a estas restrições, usando o método dos multiplicadores de Lagrange. Mostre que as probabilidades são dadas por $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\sum_\alpha \lambda_\alpha f_i^\alpha}$.

b) Obtenha Z a partir da condição de normalização da probabilidade.

c) Calcule a entropia e obtenha a relação $Z = e^{\frac{S}{k} - \sum_{\alpha=1}^{P} \lambda_\alpha < f^\alpha >}$

d) Considere uma variação do sistema em que tanto as médias $< f^\alpha >$, como as próprias funções f^α podem variar. A partir da variação das expressões obtidas nas duas alíneas anteriores conclua que devemos ter $\delta \frac{S}{k} = \sum_{\alpha=1}^{P} \lambda_\alpha [< \delta f^\alpha > - \delta < f^\alpha >]$

e) Aplique os resultados obtidos a sistemas termodinâmicos descritos pelos conjuntos canónico e grande canónico. Obtenha a expressão combinada da primeira e da segunda lei da termodinâmica. Considere ainda que esses sistemas são extensos e que pode portanto aplicar o teorema de Euler das funções homogéneas aos potenciais termodinâmicos.

f) Faça um tratamento análogo para um sistema magnético na presença de um campo magético, de modo a termos uma dada magnetização do sistema.

References

[1] R. Ash, *Information Theory*, Interscience Publishers, John Wiley and Sons.

2. a) Considere um sistema de bosões $\alpha = (\vec{k}, s, \ldots)$, com estados de partículas simples de energia ϵ_α, no conjunto grande canónico. Utilize a teoria da informação (princípio de Jaynes e entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon), em que $S = -k_B \sum_{\alpha, n_\alpha} p_{\alpha, n_\alpha} \ln p_{\alpha, n_\alpha}$, e obtenha a expressão da função de partição Z, dos números de ocupação N_α e das energias médias E_α. Mostre que a entropia se pode escrever como

$$S = k_B \sum_\alpha [(1 + N_\alpha) \ln(1 + N_\alpha) - N_\alpha \ln N_\alpha]$$

b) Considere um sistema de fermiões nas mesmas condições e mostre que neste caso

$$S = k_B \sum_\alpha [-(1 - N_\alpha) \ln(1 - N_\alpha) - N_\alpha \ln N_\alpha]$$

c) Tomando como ponto de partida estas expressões para a entropia de um sistema bosónico ou fermiónico, verifique que as populações N_α para um sistema no conjunto canónico são dadas pelas expressões usuais das distribuições de Bose-Einstein ou de Fermi-Dirac.

3. Prove the Baker-Campbell-Hausdorff formula

$$e^{A+B} = e^A e^{-\frac{1}{2}C} e^B$$

if the commutator $C = [A, B]$ commutes with A and B, ie $[A, C] = [B, C] = 0$, using parameter differentiation, assuming that

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{x(\lambda)A} e^{y(\lambda)C} e^{z(\lambda)B}$$

and determining $x(\lambda), y(\lambda), z(\lambda)$.

4. Obtain the disantangling theorem of the type

$$e^{t(\alpha J_+ + \beta J_0 + \alpha^* J_-)} = e^{\mu(t) J_+} e^{\nu(t) J_0} e^{\mu^*(t) J_-}$$

for the SU(2) group, characterized by $[J_0, J_\pm] = \pm J_\pm$, $[J_+, J_-] = 2J_0$, with α, α^* and μ, μ^* two sets of independent variables, Determine $\mu(t), \nu(t), \mu^*(t)$, using parameter differentiation.

Solution:
$\mu = \frac{\alpha \sinh(\delta t)}{\delta \cosh(\delta t) - \frac{\beta}{2}\sinh(\delta t)}$, $e^\nu = \frac{1}{(\cosh(\delta t) - \frac{\beta}{2\delta}\sinh(\delta t))^2}$, $\mu = \frac{\alpha^* \sinh(\delta t)}{\delta \cosh(\delta t) - \frac{\beta}{2}\sinh(\delta t)}$,
where $\delta^2 = \left(\frac{\beta}{2}\right)^2 + \alpha^*\alpha$.