

# CONTROL 1 (2021)

Isto está mellor explicado nos meus apuntes: TEMA 4

ENTROPÍA MÁXIMA E ESTADÍSTICAS CUÁNTICAS. → "Obtención dos estadísticos FD e BE mediante a efectividade microcanónica" (Páx. 4)

Considérese un gas ideal de fermións con un espectro discreto de niveis de enerxía, cada un cunha enerxía  $\epsilon_i$ , número de ocupación  $n_i$  e degeneración  $g_i$ . Calcúlese:

1) O número de configuracións asociadas á ocupación dos  $g_i$  estados do nivel  $i$ -ésimo con  $n_i$  partículas ( $\Omega_i$ ).

Ao tratarse de fermións, en cada estado  $g_i$  só pode haber 0 ou 1 partícula. Podemos permutar todos os estados entre si, pero temos que descontar as permutacións que son iguais (permutar estados cheos entre si ou baleiros entre si).

$$\Omega_i = \frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!} = \binom{g_i}{n_i}$$

Chaos Boleiros

2) Calcular o número total de estados do sistema  $\Omega = \prod_i \Omega_i$  e a súa entropía,  $S\{n_i\}$ .

Nº total de estados do sistema:  $\Omega = \prod_i \frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!}$

Entropía:  $\frac{S}{k_B T} = \ln(\Omega) = \sum_i \ln \left( \frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!} \right)$

$$S = \ln(g_i!) - \ln(n_i!) - \ln[(g_i - n_i)!] \approx g_i \ln(g_i) - g_i - n_i \ln(n_i) + n_i - (g_i - n_i) \ln(g_i - n_i) + (g_i - n_i)$$

$$S = g_i \ln(g_i) - n_i \ln(n_i) - (g_i - n_i) \ln(g_i - n_i)$$

3) Úsese o principio de entropía máxima de Jaynes para calcular a distribución máis probable de números de ocupación do sistema illado con  $N$  fermións e enerxía  $E$ .

O principio de entropía máxima de Jaynes establece que a distribución de probabilidade máis probable é aquela que maximiza a entropía:  $\delta S = 0$ .

$$\delta S = \sum_k \left( \frac{\partial S}{\partial n_k} \right) \delta n_k = 0 \quad \xrightarrow[\text{entre si}]{\text{Variación independentes}} \left( \frac{\partial S}{\partial n_k} \right) = 0$$

Sen embargo, as  $n_k$  teñen que cumprir as restricións de  $N = \sum n_i = \text{cte.}$  e  $E = \sum n_i \epsilon_i = \text{cte.}$  por ser un sistema illado, polo que nos atopamos con problema de multiplicadores de Lagrange:

$$L = S + \alpha \sum n_i + \beta \sum n_i \epsilon_i \Rightarrow \delta L = 0 \Rightarrow \boxed{\frac{\partial L}{\partial n_k} = 0}$$

$$\frac{\partial L}{\partial n_k} = -\ln(n_k) + \ln(g_k - n_k) + \alpha + \beta \epsilon_k = 0$$

$$\ln\left(\frac{g_k - n_k}{n_k}\right) = -\alpha - \beta \epsilon_k \Rightarrow \frac{g_k - n_k}{n_k} = e^{-\alpha - \beta \epsilon_k} \Rightarrow \frac{g_k}{n_k} - 1 = e^{-\alpha - \beta \epsilon_k}$$

$$n_k = \frac{g_k}{e^{-\alpha - \beta \epsilon_k} + 1}$$

4) Como cambiarían os resultados se as partículas eran bosóns?

Se fosen bosóns poderíamos ter máis de unha partícula en cada estado, polo que poderíamos permutar partículas ( $n_i$ ) e divisións de estados ( $g_i - 1$ ):

$$\Omega_i = \frac{n_i + g_i - 1}{n_i! (g_i - 1)!} = \binom{n_i + g_i - 1}{n_i} = \binom{n_i + g_i - 1}{g_i - 1}$$

5) E se fosen partículas clásicas, é dicir, idénticas e distinguibles?

Se temos  $g_i$  estados e  $n_i$  partículas:  $\Omega_i = (g_i)^{n_i}$

Para calcular  $\Omega$  temos que saber de cantas formas se pode poñer  $\{n_1, n_2, \dots, n_M\}$ , xa que iso dána a mesma enerxía  $\Rightarrow N!$

$$\Omega = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_M!} \prod_i (g_i)^{n_i} = \frac{N!}{\prod_i n_i!} \prod_i (g_i)^{n_i} = N! \prod_{i=1}^M \frac{(g_i)^{n_i}}{n_i!}$$

## RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Consideremos un conxunto de  $N$  spins nucleares de  $^{13}\text{C}$  ( $I = 1/2$ ) localizados e independentes en equilibrio térmico á temperatura  $T$ , sometidos á acción dun campo magnético estático,  $B$ , de xeito que  $H_i = -g_N \mu_N I_{z_i} B / \hbar$ .

a) Calcule o espectro de enerxías asociadas ás orientacións a favor (+) e en contra (-) do campo, ( $E_{\pm}$ ), a función de partición canónica dun espín e a do sistema de espíns.

Como  $I = \frac{\hbar}{2} \Rightarrow I_E = -\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}$

Además, sabemos que  $H\psi = E\psi$ , por lo que el espectro de energías será:

$$E_{\pm} = \mp g_N \mu_N \frac{B}{2}$$

Ahora, tendo en cuenta que se trata de espines localizados ( $E_i \rightarrow E_1$ ), podemos escribir la función de partición del espín como:

$$Z_1 = e^{-\beta E_+} + e^{-\beta E_-} \xrightarrow{E_- = -E_+} Z_1 = 2 \cosh\left(\beta g_N \mu_N \frac{B}{2}\right)$$

e la función de partición del sistema como:

$$Z = (Z_1)^N \Rightarrow Z = 2^N \cosh^N\left(\beta g_N \mu_N \frac{B}{2}\right)$$

b) Obténase la fracción de núcleos en cada uno de los posibles niveles de energía,  $N_-/N_+$ . Cal é a expresión deste ratio no caso de que  $g_N \mu_N B \ll k_B T$ ? Evalúese para un campo típico de 1T e unha temperatura de 298,15 K.

Nota:  $g_N(^{13}\text{C}) = 1,405$ ;  $\mu_N = 5,05 \cdot 10^{-29} \text{ J/T}$

$$\left. \begin{aligned} \circ \langle N_- \rangle &= N P_- = N \frac{e^{-\beta E_-}}{Z_1} \\ \circ \langle N_+ \rangle &= N P_+ = N \frac{e^{-\beta E_+}}{Z_1} \end{aligned} \right\} \frac{\langle N_- \rangle}{\langle N_+ \rangle} = e^{-\beta(E_- - E_+)} \Rightarrow \frac{\langle N_- \rangle}{\langle N_+ \rangle} = e^{-\beta g_N \mu_N B}$$

Se  $g_N \mu_N B \ll k_B T$ , entón podremos hacer un desenvolvemento de Taylor:

$$f(a) + \frac{f'(a)}{1!} (x-a) + \dots \xrightarrow{\substack{a=0 \\ x=g_N \mu_N B}} \frac{\langle N_- \rangle}{\langle N_+ \rangle} = 1 - \beta g_N \mu_N B$$

e substituíndo os valores proporcionados:

$$\frac{\langle N_- \rangle}{\langle N_+ \rangle} = 1 - \frac{1}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 298,15} \cdot 1,405 \cdot 5,05 \cdot 10^{-29} \cdot 1 \Rightarrow \frac{\langle N_- \rangle}{\langle N_+ \rangle} \approx 0,999998$$

c) Obténase a evolución temporal de  $n(t) = N_+(t) - N_-(t)$ , e o seu valor asíntotico ( $t \rightarrow \infty$ ) no caso de que o sistema nuclear estea baixo a influencia adicional dunha perturbación magnética oscilante,  $V(t)$ , de tal xeito que a probabilidade de transición por unidade de tempo é  $w_{+-} = \frac{2\pi}{\hbar} |V|^2 \delta(E_+ - E_- - \hbar\nu) = w_{-+} = w$ . Evalúese a absorción de enerxía do campo externo por unidade de tempo.

$$\frac{dE}{dt} = N_+ \omega_+ (E_+ - E_-) + N_- \omega_- (E_- - E_+)$$

Es el seu valor no límite  $t \rightarrow \infty$ .

Para obter a evolução temporal temos que derivar  $n(t)$ : 
$$\frac{dn}{dt} = \frac{dN_+}{dt} - \frac{dN_-}{dt} = N \left( \frac{dP_+}{dt} - \frac{dP_-}{dt} \right)$$

É para calcular as derivadas das probabilidades empregamos a equação maestra:

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_{m \neq i} [W_{mi} P_m(t) - W_{im} P_i(t)]$$

$$\circ \frac{dP_+}{dt} = \omega_- P_-(t) - \omega_+ P_+(t) = \omega (P_- - P_+)$$

$$\circ \frac{dP_-}{dt} = \omega_+ P_+(t) - \omega_- P_-(t) = \omega (P_+ - P_-)$$

Assí:

$$\frac{dn}{dt} = N \left[ \frac{-\omega(P_+ - P_-)}{\omega(P_- - P_+)} - \omega(P_+ - P_-) \right] = -2N\omega(P_+ - P_-) = -2\omega n$$

É integrando:

$$\int \frac{dn}{n} = -2\omega \int dt \Rightarrow \ln\left(\frac{n}{n_0}\right) = -2\omega t \Rightarrow n = n_0 e^{-2\omega t}$$

O seu valor assintótico é:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (n_0 e^{-2\omega t}) = 0$$

Por outra parte:

$$\frac{dE}{dt} = N_+ \omega_+ (E_+ - E_-) + N_- \omega_- \overbrace{(E_- - E_+)}^{-(E_+ - E_-)} = \omega (E_+ - E_-) \overbrace{(N_+ - N_-)}^n \Rightarrow \frac{dE}{dt} = \omega n (E_+ - E_-)$$

É no limite  $t \rightarrow \infty$ :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (\omega (E_+ - E_-) n) = 0$$

$\downarrow$   
 $n \rightarrow 0$

d) Do anterior siguese que para que haja absorção de ressonância, deben existir mecanismos de interação spin-rede, que provoquen transições adicionais non radiantes descritas por probabilidades de transición asimétricas que verifican  $\omega_+ + \omega_- = 1/\tau_1$ , onde  $\tau_1$  denomínase tempo de relaxación spin-rede. Repítense os cálculos do apartado anterior e demostrase que a contribución spin-rede pódese escribir como:

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{sr} = \frac{n_0 - n}{\tau_1}$$

¿Cuál es la expresión de  $n_0$ ? En presencia de ambos mecanismos de interacción, ¿cuál es la diferencia de población entre niveles en equilibrio? Demuéstrese neste caso que, cuando  $2\omega\tau_1 \ll 1$ , la absorción de energía es:

$$\frac{dE}{dt} = n_0 \frac{\omega}{1 + 2\omega\tau_1} (E_- - E_+)$$

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} &= N \left( \frac{dP_+}{dt} - \frac{dP_-}{dt} \right) = N (\omega_{-+} P_- - \omega_{+-} P_+ - \omega_{+-} P_+ + \omega_{-+} P_-) = 2N (\omega_{-+} P_- - \omega_{+-} P_+) = \\ &= 2 (\omega_{-+} N_- - \omega_{+-} N_+) \end{aligned}$$

Ahora hacemos:

$$\begin{cases} n = N_+ - N_- \\ N = N_+ + N_- \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} N_+ = \frac{N+n}{2} \\ N_- = \frac{N-n}{2} \end{cases}$$

$$\frac{dn}{dt} = 2 \left( \omega_{-+} \frac{N-n}{2} - \omega_{+-} \frac{N+n}{2} \right) = N (\omega_{-+} - \omega_{+-}) - n (\omega_{-+} + \omega_{+-}) = N (\omega_{-+} - \omega_{+-}) - \frac{n}{\tau_1} = \frac{N \frac{\omega_{-+} - \omega_{+-}}{\omega_{-+} + \omega_{+-}} - n}{\tau_1}$$

$$\frac{dn}{dt} = \frac{n_0 - n}{\tau_1}$$

Dejémosla sumando las dos contribuciones:  $\frac{dn}{dt} = -2\omega n + \frac{n_0 - n}{\tau_1} = 0 \Rightarrow n = \frac{n_0}{1 + 2\omega\tau_1}$

Por otra parte:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dE}{dt}\right)_{sr} &= N_+ \omega_{-+} (E_+ - E_-) + N_- \omega_{+-} (E_- - E_+) = (E_- - E_+) (N_- \omega_{-+} - N_+ \omega_{+-}) = (E_- - E_+) \left( \frac{N-n}{2} \omega_{-+} - \frac{N+n}{2} \omega_{+-} \right) = \\ &= \frac{1}{2} (E_- - E_+) \underbrace{\left[ N (\omega_{-+} - \omega_{+-}) + n (\omega_{-+} + \omega_{+-}) \right]}_{dn/dt} = \frac{1}{2} (E_- - E_+) \frac{n_0 - n}{\tau_1} \end{aligned}$$

$$\frac{dE}{dt} = \omega n (E_+ - E_-) - \frac{1}{2} (E_+ - E_-) \frac{n_0 - n}{\tau_1}$$

Por lo tanto, se  $2\omega\tau_1 \ll 1$ , entonces  $n \rightarrow n_0$ , e la absorción de energía es:

$$\frac{dE}{dt} = \omega \frac{n_0}{1 + 2\omega\tau_1} (E_+ - E_-)$$