Mecânica Quântica Avançada
Prova 1

Lucas Froguel
IFT

Prova 1

1 Exercício 1
2 Exercício 2
3 Exercício 3
4 Exercício 5

Exercício 1. *Considere uma molécula constituída de três átomos idênticos nos sítios (vértices) de um triângulo equilátero, conforme mostrado na figura. Vamos considerar que o íon desta molécula é formado adicionando-se um único elétron a ela; como vimos em aula, deve haver um efeito de delocalização, e o elétron deve se acomodar em um estado distribuído ao redor dos sítios. Suponha que o elemento de matriz da Hamiltoniana para o elétron em dois sítios adjacentes* i, j *é* $\langle i|H|j\rangle = -a, a > 0$*, para* $i \neq j$*; por simetria, os elementos diagonais são todos iguais,* $\langle i|H|i\rangle = E_0$*.*

Item 1. *Escreva a Hamiltoniana na forma matricial e calcule os níveis de energia.*
Resposta. A hamiltoniana é

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -a & -a \\ -a & E_0 & -a \\ -a & -a & E_0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

Diagonalizando a matriz (processo feito em aula), achamos que as autoenergias são

$$E_s = E_0 - 2a\cos\left(\frac{2\pi s}{3}\right) \tag{2}$$

Assim, nossas energias são

$$E_0 = E_0 - 2a, \quad E_1 = E_0 - 2a\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right), \quad E_2 = E_0 - 2a\cos\left(\frac{4\pi}{3}\right) \tag{3}$$

Item 2. *Suponha que um campo elétrico na direção* z *é aplicado, de modo que a energia potencial para o elétron na posição rotulada por "1" diminui por uma parcela* b $(b > 0)$*. Calcule os níveis de energia e os autoestados de energia.*
Resposta. Agora quebramos a simetria que fazia com que os elementos das diagonais fossem E_0, pois podemos distinguir o estado 1 dos estados 2 e 3. Logo, a hamiltoniana modificada é

$$H = \begin{pmatrix} E_0 - b & -a & -a \\ -a & E_0 + b & -a \\ -a & -a & E_0 + b \end{pmatrix} \tag{4}$$

Achar os autovalores e vetores de uma matriz 3×3 é um processo matemático bem definido e metódico. Fazendo essa operação, obtemos

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0 + a + b, & |1'\rangle &= -|2\rangle + |3\rangle \\ E_2 &= E_0 - \frac{1}{2}\left(a + \sqrt{9a^2 - 4ab + 4b^2}\right), & |2'\rangle &= c_2|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle \\ E_3 &= E_0 + \frac{1}{2}\left(-a + \sqrt{9a^2 - 4ab + 4b^2}\right), & |3'\rangle &= c_c|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} c_2 &= -\frac{a - 2b - \sqrt{9a^2 - 4ab + 4b^2}}{2a} \\ c_2 &= -\frac{a - 2b + \sqrt{9a^2 - 4ab + 4b^2}}{2a} \end{aligned}$$

Item 3. *Suponha que, no caso do item (b), o elétron está no estado fundamental. Quase instantaneamente, o campo roda de 120° e passa a apontar na direção rotulada como "2". Calcule a probabilidade do elétron permanecer no estado fundamental.*
Resposta. Nesse caso, o estado 2 ocupa o antigo estado 1, o estado 3 ocupa o antigo 2 e o estado 1 o antigo 3. Assim,

$$p = |\langle\rangle|^2 \tag{5}$$

Exercício 2. *Para cada estado $|\psi\rangle$ de dois spins 1/2 abaixo, escrito em termos dos autovetores de S_z, diga se o estado é emaranhado ou não (justificando sua resposta), calcule seu operador estado (matriz densidade) explicitamente, e calcule o operador estado reduzido referente à particula 1 (na notação $|1,2\rangle$).*

1. $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$
   Resposta. Logo de cara vemos que esse é um estado de Bell, um estado que é notoriamente emaranhado. Isso é verdade, pois é impossível escrever esse estado como um produto tensorial disjunto de dois estados de $|1\rangle$ e de $|2\rangle$. O operador de densidade é

$$\begin{aligned} \rho &= |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= \frac{1}{2}(|+-\rangle - |-+\rangle)(\langle+-| - \langle-+|) \\ &= \frac{1}{2}\Big(|+-\rangle\langle+-| - |+-\rangle\langle-+| - |-+\rangle\langle+-| + |-+\rangle\langle-+|\Big) \\ &\doteq \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

   onde usamos a sequência $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$. Tomando o traço parcial

$$\rho_1 = \mathrm{tr}_2(\rho) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

---

2. $|\psi\rangle = |{+}{+}\rangle$
Resposta. O estado é claramente não emaranhado, pois podemos escrevê-lo como

$$|\psi\rangle = |+\rangle \otimes |+\rangle \tag{7}$$

Seu operador de estado é

$$\rho = |{+}{+}\rangle \langle{+}{+}| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

e o operador de estado reduzido é

$$\rho_1 = \mathrm{tr}_2\, \rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

---

3. $|\psi\rangle = \frac{1}{5\sqrt{2}}\big(|{+}{+}\rangle + 3i\,|{+}{-}\rangle - 2i\,|{-}{+}\rangle + 6\,|{-}{-}\rangle \big)$
Resposta. Podemos reescrever esse estado como

$$|\psi\rangle = \frac{1}{5\sqrt{2}}\big(|+\rangle - 2i\,|-\rangle \big) \otimes \big(|+\rangle + 3i\,|-\rangle \big) \tag{10}$$

de modo que vemos que ele não é emaranhado. Seu operador de estado é

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{50} \\ &= \frac{1}{50} \begin{pmatrix} 1 & -3i & 2i & 6 \\ 3i & 9 & -6i & -18i \\ -2i & 6i & 4 & -12i \\ 6 & -18i & 12i & 36 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Tomando o traço parcial

$$\rho_1 = \frac{1}{50} \begin{pmatrix} 10 & -16i \\ -20i & 40 \end{pmatrix} = \frac{1}{25} \begin{pmatrix} 5 & -8i \\ -10i & 20 \end{pmatrix} \tag{11}$$

Exercício 3. *Considere um ensemble estatístico de sistemas de um spin-*1/2.

Item 1. *Considere que o ensemble é um estado puro, apontando em uma direção $\hat{n}$ (ver figura), e descrito por um ket α. Suponha que os valores esperados $\langle S_x \rangle$ e $\langle S_z \rangle$ são conhecidos, mas apenas o sinal de $\langle S_y \rangle$ é conhecido. Construa explicitamente a matriz densidade 2×2 que descreve o sistema.*
Resposta. Basicamente precisamos aplicar essas condições dos valores médios e montar um sistema de equações que nos darão as restrições necessárias sobre o estado puro

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle + e^{i\alpha} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) |-\rangle \tag{12}$$

Para S_z:

$$\frac{\hbar}{2}\left(\cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\right)=\frac{\hbar}{2}\cos\beta=\langle S_z\rangle \tag{13}$$

Para S_x:

$$\begin{aligned}
\langle S_x\rangle &= \langle\psi|S_x|\psi\rangle\\
&= \frac{\hbar}{2}\left\langle\psi\left|(|+\rangle\langle-|+|-\rangle\langle+|)\right|\psi\right\rangle\\
&= \frac{\hbar}{2}\left(\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{-i\alpha}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)+\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{i\alpha}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right)\\
&= \frac{1}{2}\frac{\hbar}{2}\sin(\beta)\left(e^{i\alpha}+e^{-i\alpha}\right)\\
&= \frac{\hbar}{2}\sin\beta\cos\alpha
\end{aligned}$$

Para S_y:

$$\begin{aligned}
\epsilon\langle S_y\rangle &= \langle\psi|S_y|\psi\rangle\\
&= \frac{\hbar}{2}\left\langle\psi\left|(-|+\rangle\langle-|+|-\rangle\langle+|)\right|\psi\right\rangle\\
&= \frac{\hbar}{2}\left(-\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{-i\alpha}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)+\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{i\alpha}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right)\\
&= \frac{1}{2}\frac{\hbar}{2}\sin(\beta)\left(e^{i\alpha}-e^{-i\alpha}\right)\\
&= \frac{i\hbar}{2}\sin\beta\sin\alpha
\end{aligned}$$

onde $\epsilon=\pm 1$. Pela primeira,

$$\beta=\operatorname{acos}\left(\frac{2\langle S_z\rangle}{\hbar}\right) \tag{14}$$

Somando os quadrados da segunda e terceira expressões

$$\begin{aligned}
\langle S_x\rangle^2+\langle S_y\rangle^2 &= \frac{\hbar^2}{4}\sin^2\beta\left(\cos^2\alpha-\sin^2\alpha\right)\\
&= \frac{\hbar^2}{4}\sin^2\beta\cos(2\alpha)\\
\alpha &= \frac{1}{2}\operatorname{acos}\left(\frac{4(\langle S_x\rangle^2+\langle S_y\rangle^2)}{\hbar^2\sin^2\beta}\right)\\
&= \frac{1}{2}\operatorname{acos}\left(\frac{4(\langle S_x\rangle^2+\langle S_y\rangle^2)}{\hbar^2\left(1-\frac{4\langle S_z\rangle^2}{\hbar^2}\right)}\right)\\
&= \frac{1}{2}\operatorname{acos}\left(\frac{\langle S_x\rangle^2+\langle S_y\rangle^2}{\frac{\hbar^2}{4}-\langle S_z\rangle^2}\right)
\end{aligned}$$

Assim, fomos capazes de calcular α e β explicitamente em função apenas dos valores médios dados. A matriz de densidade geral é

$$\rho=\begin{pmatrix}\cos^2(\beta/2) & e^{i\alpha}\sin(\beta)/2\\ e^{-i\alpha}\sin(\beta)/2 & \sin^2(\beta/2)\end{pmatrix} \tag{15}$$

Notamos que

$$\begin{aligned}
\cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) &= \frac{1}{2}+\frac{\langle S_z\rangle}{\hbar}\\
\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) &= \frac{1}{2}-\frac{\langle S_z\rangle}{\hbar}\\
\sin\beta &= \sqrt{1-\frac{4\langle S_z\rangle^2}{\hbar^2}}\\
e^{\pm i\alpha} &= \sqrt{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\frac{\langle S_x\rangle^2+\langle S_y\rangle^2}{\frac{\hbar^2}{4}-\langle S_z\rangle^2}}\pm i\sqrt{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{\langle S_x\rangle^2+\langle S_y\rangle^2}{\frac{\hbar^2}{4}-\langle S_z\rangle^2}}
\end{aligned}$$

Item 2. *Considere agora que o ensemble é misturado, de uma maneira genérica (note que não estamos dizendo que ele é o estado de máxima entropia!). Suponha agora que os três valores médios $\langle S_x\rangle, \langle S_y\rangle, \langle S_z\rangle$ são todos conhecidos. Construa explicitamente a matriz densidade 2×2 que descreve o sistema.*
Resposta.

Exercício 4. *Considere a seguinte matriz densidade de dois spins-1/2:*

$$\rho = \frac{1}{8}\mathbb{I}+\frac{1}{2}\left|\Psi_-\right\rangle\left\langle\Psi_-\right| \tag{16}$$

onde $|\Psi_-\rangle$ é o estado singleto (i.e. o estado de spin total igual a zero). Suponhamos que medimos um dos spins ao longo de um eixo a e o outro ao longo de um eixo b, em que $\hat{a}\cdot\hat{b}=\cos\theta$. Qual é a probabilidade (como função de θ) de encontramos $\hbar/2$ para ambos spins nestas medidas?

Resposta. Começamos notando que o estado de singleto é

$$|\Psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\,|+-\rangle - |-+\rangle\,\big) \tag{17}$$

Em seguida, percebemos que calcular a probabilidades de $+\hbar/2$ em ambas as medidas é

$$p_{++} = \mathrm{tr}(|+\rangle_a\,|+\rangle_b\,\langle +|_a\,\langle +|_b\,\rho) \tag{18}$$

Assim, sem perda de generalidade, vamos supor que $\hat{a}=\hat{z}$ e que b mora no plano x-z. Então podemos escrever os kets em b em função da base de a:

$$|+\rangle_b = \cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,|-\rangle\,,\quad |-\rangle_b = \sin\frac{\theta}{2}\,|+\rangle\cos\theta 2\,|-\rangle \tag{19}$$

Portanto, o projetor se escreve:

$$\begin{aligned}
P_{++} &= |+\rangle\left(\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle+\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle\right)\langle+|\left(\cos\frac{\theta}{2}\langle+|+\sin\frac{\theta}{2}\langle-|\right)\\
&= \cos^2\frac{\theta}{2}|++\rangle\langle++|+\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}|++\rangle\langle+-|+\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}|+-\rangle\langle++|+\sin^2\frac{\theta}{2}|+-\rangle\langle+-|\\
&= \cos^2\frac{\theta}{2}|++\rangle\langle++|+\frac{1}{2}\sin\theta\,|++\rangle\langle+-|+\frac{1}{2}\sin\theta\,|+-\rangle\langle++|+\sin^2\frac{\theta}{2}|+-\rangle\langle+-|
\end{aligned}$$

Consequentemente, a probabilidade é

$$
\begin{aligned}
p_{++} &= \operatorname{tr} P_{+}+\rho) \\
&= \frac{1}{8}\operatorname{tr}(P_{++}) + \frac{1}{2}\operatorname{tr}(P_{++}\left|\Psi_{-}\right\rangle\left\langle\Psi_{-}\right|) \\
&= \frac{1}{8}\left(\cos^2\frac{\theta}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right) \\
&= \frac{1}{8} + \frac{1}{4}\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)
\end{aligned}
$$
