Física Quântica I / Mecânica Quântica

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 12

Descrição universal de qualquer sistema de 2 níveis

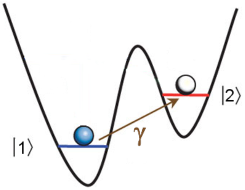
O princípio é conceptualmente simples:

- Dois estados, inicialmente desacoplados, de energias E_1 e E_2:

$$\hat{\mathrm{H}}_0|1\rangle = E_1|1\rangle, \qquad \hat{\mathrm{H}}_0|2\rangle = E_2|2\rangle.$$

- Nesta base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, H_0 é diagonal:

$$\hat{\mathrm{H}}_0 \quad \mapsto \quad H_0 = \begin{bmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{bmatrix}.$$



- É introduzido um acoplamento γ que induz transições entre os dois estados:

$$\hat{\mathrm{H}} = \hat{\mathrm{H}}_0 + \hat{\mathrm{W}} \qquad \text{onde} \qquad W = \begin{bmatrix} 0 & \gamma \\ \gamma^* & 0 \end{bmatrix}.$$

- Quais os novos estados estacionários do sistema?

O Hamiltoniano do sistema tem então a representação matricial

$$H = H_0 + W = \begin{bmatrix} E_1 & \gamma \\ \gamma^* & E_2 \end{bmatrix}.$$

Resolvendo este Hamiltoniano 2×2 genérico, teremos a solução para qualquer sistema físico que tenha um espaço de estados 2-dimensional.

O tratamento à “força bruta”

O problema

Obter o espectro e autovetores do Hamiltoniano genérico 2×2: $H = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix}$.

Naturalmente, sabemos o que fazer:

1. Determinar os autovalores $E_\pm$ da matriz H:

$$\begin{vmatrix} h_{11} - \lambda & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0, \qquad \lambda = \ldots$$

2. Extrair o autovetor $|\pm\rangle$ associado a cada $E_\pm$:

$\cdots$ (a rotina habitual) $\cdots$

Resultado (!):

$$E_\pm = \frac{h_{11} + h_{22}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4|h_{12}|^2}$$

$$|\pm\rangle = \left[\frac{h_{11} \pm \sqrt{4|h_{12}|^2 + (h_{11} - h_{22})^2} - h_{22}}{h_{21}\sqrt{4 + \frac{\left(h_{11} \pm \sqrt{4|h_{12}|^2 + (h_{11} - h_{22})^2} - h_{22}\right)^2}{|h_{12}|^2}}} \right] |1\rangle + \left[\frac{2}{\sqrt{4 + \frac{\left(h_{11} \pm \sqrt{4|h_{12}|^2 + (h_{11} - h_{22})^2} - h_{22}\right)^2}{|h_{12}|^2}}} \right] |2\rangle$$

Assunto terminado!

Há uma forma mais elegante de analisar um sistema de 2 níveis.

Reparemos que é possível re-escrever H como

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & \gamma \\ \gamma^* & E_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{E_1+E_2}{2} & 0 \\ 0 & \frac{E_1+E_2}{2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{E_1-E_2}{2} & \gamma \\ \gamma^* & -\frac{E_1-E_2}{2} \end{bmatrix}.$$

A primeira destas 2 matrizes é simplesmente

$$\begin{bmatrix} \frac{E_1+E_2}{2} & 0 \\ 0 & \frac{E_1+E_2}{2} \end{bmatrix} = \left(\frac{E_1+E_2}{2}\right)\mathbf{1}, \qquad \text{onde} \qquad \mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

...e a segunda matriz pode ser re-escrita como

$$\begin{bmatrix} \frac{E_1-E_2}{2} & \gamma \\ \gamma^* & -\frac{E_1-E_2}{2} \end{bmatrix} = \left(\frac{E_1-E_2}{2}\right)\begin{bmatrix} 1 & \frac{2\gamma}{E_1-E_2} \\ \frac{2\gamma^*}{E_1-E_2} & -1 \end{bmatrix}.$$

Os elementos não-diagonais podem ser apresentados como

$$\gamma = |\gamma|e^{-i\varphi}, \qquad \varphi \equiv \arg\gamma, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi,$$

$$\tan\theta \equiv \frac{2|\gamma|}{E_1 - E_2}, \qquad 0 \leq \theta \leq \pi.$$

Um tratamento mais hábil e útil

Porquê dar estas “voltas”?... Porque, assim, a matriz H pode ser apresentada como

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & \gamma \\ \gamma^* & E_2 \end{bmatrix} = \left(\frac{E_1 + E_2}{2} \right) \mathbf{1} + \frac{|\gamma|}{\sin\theta} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}.$$

Reconhecem a última matriz? Se introduzirmos os parâmetros ω e E_m definidos segundo

$$\frac{\hbar\omega}{2} \equiv \frac{|\gamma|}{\sin\theta} = \frac{E_+ - E_-}{2}, \qquad E_m \equiv \frac{E_1 + E_2}{2},$$

podemos escrever a matriz H do seguinte modo compacto

Parametrização universal de um sistema de 2 níveis

$$H = E_m\, \mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2} (\sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z) = E_m\, \mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}, \tag{$*$}$$

onde os parâmetros auxiliares são:

$$\boldsymbol{n} \equiv \sin\theta \cos\varphi\, \hat{\mathbf{x}} + \sin\theta \sin\varphi\, \hat{\mathbf{y}} + \cos\theta\, \hat{\mathbf{z}}, \qquad \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{n} = 1,$$

$$\varphi \equiv -\arg(\gamma), \qquad 0 \le \varphi < 2\pi,$$

$$\tan\theta \equiv \frac{2|\gamma|}{E_1 - E_2}, \qquad 0 \le \theta \le \pi.$$

Os ângulos auxiliares θ e φ são univocamente definidos pelos parâmetros originais do problema E_1, E_2, e γ.
A representação ($*$) é assim aplicável a qualquer sistema quântico de 2 níveis.

Comportamento do espectro de energia

Podemos então parametrizar qualquer sistema de 2 níveis na forma compacta

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & \gamma \\ \gamma^* & E_2 \end{bmatrix} \qquad \longrightarrow \qquad H = E_m \mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}.$$

Nesta forma, podemos "ler" imediatamente o espectro de energia: (porquê?)

$$E_\pm = E_m \pm \frac{\hbar\omega}{2} \xrightarrow{\text{substituíndo defs.}} E_\pm = \frac{E_1+E_2}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1-E_2)^2+4|\gamma|^2} \qquad \checkmark$$

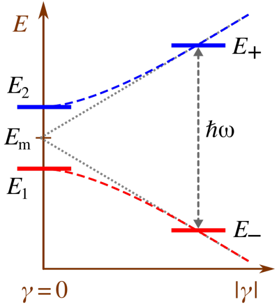
...e os respetivos auto-estados serão

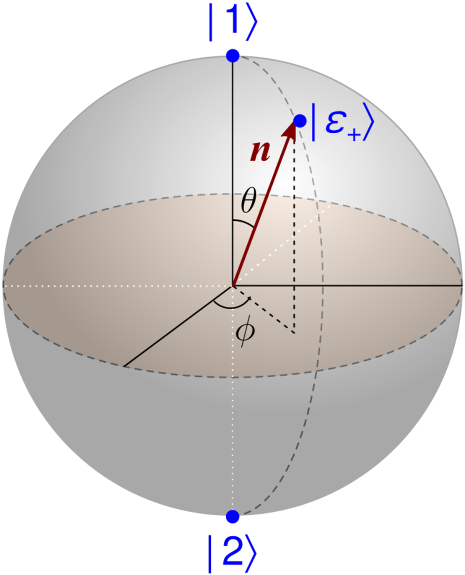
$$|\varepsilon_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|2\rangle, \qquad |\varepsilon_-\rangle = \sin\frac{\theta}{2}|1\rangle - \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|2\rangle$$

Principais características do espectro

- Trivial se $\gamma = 0$: $\quad E_+ = E_2, \quad E_- = E_1.$
- "Repulsão" dos níveis originais: $E_- < E_1$ e $E_+ > E_2$.
- Levantamento de degenerescência, caso exista originalmente:

  no caso $E_1 = E_2 = E_0 \quad \longrightarrow \quad E_\pm = E_0 \pm |\gamma|.$
- Se $|\gamma| \ll E_2 - E_1$: $\quad E_+ \simeq E_2, \quad E_- \simeq E_1.$
- Se $|\gamma| \gg E_2 - E_1$: $\quad E_\pm \simeq E_m \pm |\gamma| = \dfrac{E_1+E_2}{2} \pm |\gamma|.$





Os autoestados do Hamiltoniano $2{\times}2$

$$H = E_m\,\mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n},$$

onde $\boldsymbol{n}$ é o vetor Cartesiano

$$\boldsymbol{n} = \sin\theta\cos\phi\,\hat{\mathbf{x}} + \sin\theta\sin\phi\,\hat{\mathbf{y}} + \cos\theta\,\hat{\mathbf{z}}.$$

são

$$|\varepsilon_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,e^{i\phi}\,|2\rangle,$$

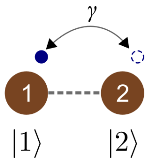
$$|\varepsilon_-\rangle = \sin\frac{\theta}{2}\,|1\rangle - \cos\frac{\theta}{2}\,e^{i\phi}\,|2\rangle.$$

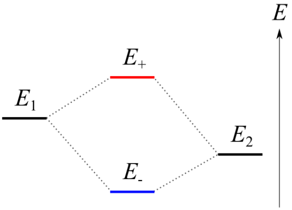
Uma ilustração importante: a ligação química covalente

Hibridização entre estados eletrónicos de 2 átomos e estabilização de uma molécula:

$$H_{\text{at. isolados}} = \begin{bmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{aproximando-os}} H = \begin{bmatrix} E_1 & -\gamma \\ -\gamma & E_2 \end{bmatrix} \qquad (\gamma > 0).$$

$$E_- = \frac{E_1 + E_2}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4\gamma^2} \quad < \quad \text{min}(E_1,\, E_2) \quad \longrightarrow \quad \text{mais estável!}$$





$$|\varepsilon_-\rangle = \sin\frac{\theta}{2}\,|1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,|2\rangle \qquad \text{onde} \quad \varphi = \pi,\ \tan\theta = \frac{2\gamma}{E_1 - E_2}.$$

Tanto $\mathcal{P}_1 = |\langle 1|\varepsilon_-\rangle|^2$ como $\mathcal{P}_2 = |\langle 2|\varepsilon_-\rangle|^2$ são finitas: o eletrão é "partilhado" pelos dois átomos.

Voltemos à matriz do Hamiltoniano em teremos dos parâmetros físicos do sistema:

$$H = H_0 + W = \begin{bmatrix} E_1 & \gamma \\ \gamma^* & E_2 \end{bmatrix}.$$

A tarefa

Dado um vetor de estado conhecido em $t{=}0$, qual será o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$?

A chave está na representação universal em termos das matrizes de Pauli. Genericamente,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{\mathrm{U}}(t,0)|\psi(0)\rangle.$$

Quando $\hat{\mathrm{H}}$ é independente de t, sabemos que

$$\hat{\mathrm{U}}(t,0) = e^{-i\,\hat{\mathrm{H}}\,t/\hbar}.$$

Se escrevermos H na forma

$$H = E_m \mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}, \qquad \Big[\hbar\omega \equiv E_+ - E_-, \quad \varphi \equiv -\arg(\gamma), \quad \tan\theta \equiv 2|\gamma|/(E_1 - E_2)\Big],$$

podemos fazer uso da propriedade da exponencial das matrizes de Pauli:

$$e^{i\alpha\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}} = \mathbf{1}\,\cos\alpha + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\,\sin\alpha,$$

combinado com o facto de que, sempre que duas matrizes A e B comutam, então (Folha de Problemas 1),

$$e^{A+B} = e^A e^B = e^B e^A.$$

Evolução temporal

Combinado todos estes aspetos, a matriz do operador $\hat{\mathrm{U}}(t,0)$ fica:

$$\begin{aligned} U(t,0) &= e^{-iH\,t/\hbar} = e^{-iE_m t/\hbar\,\mathbf{1} - i\omega t\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}} \\ &= \exp\left(-i\frac{E_m t}{\hbar}\mathbf{1}\right)\exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\right) = e^{-iE_m t/\hbar}\,\mathbf{1}\cdot\left[\mathbf{1}\cos\frac{\omega t}{2} - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\sin\frac{\omega t}{2}\right] \\ &= \mathbf{1}\left(e^{-iE_m t/\hbar}\cos\frac{\omega t}{2}\right) - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\left(e^{-iE_m t/\hbar}\sin\frac{\omega t}{2}\right). \end{aligned}$$

Abrindo explicitamente o termo $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$:

$$U(t,0) = e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}\cos\frac{\omega t}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - i\,e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}\sin\frac{\omega t}{2}\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & \cos\theta\end{bmatrix}.$$

Operador de evolução de um sistema de 2 níveis

Se expressarmos o Hamiltoniano como

$$H = \begin{bmatrix}E_1 & \gamma\\ \gamma^* & E_2\end{bmatrix} = E_m\,\mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n},$$

o operador de evolução temporal será dado pela matriz

$$U(t,0) = e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}\cos\frac{\omega t}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - i\,e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}\sin\frac{\omega t}{2}\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & \cos\theta\end{bmatrix}.$$

Evolução temporal

Operador de evolução de um sistema de 2 níveis

Se expressarmos o Hamiltoniano como

$$H = \begin{bmatrix} E_1 & \gamma \\ \gamma^* & E_2 \end{bmatrix} = E_m \mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n},$$

o operador de evolução temporal será dado pela matriz

$$U(t,0) = e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}} \cos\frac{\omega t}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - i\, e^{-i\frac{E_m t}{\hbar}} \sin\frac{\omega t}{2} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & \cos\theta \end{bmatrix}.$$

Portanto, se

$$|\psi(0)\rangle = \psi_1|1\rangle + \psi_2|2\rangle \qquad \mapsto \qquad \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix},$$

para obter $|\psi(t)\rangle$ basta multiplicarmos pela matriz $U(t,0)$:

$$|\psi(t)\rangle = \psi_1(t)|1\rangle + \psi_2(t)|2\rangle \qquad \mapsto \qquad \begin{bmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{bmatrix} = U(t,0) \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}.$$

Exemplo – probabilidade de transição

Preparando o estado inicial como $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$ a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|2\rangle$ é dada por

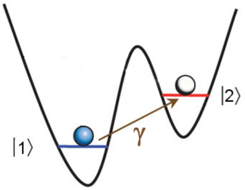
$$\mathcal{P}_{1\to 2}(t) = |\langle 2|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle 2|\hat{\mathrm{U}}(t,0)|1\rangle|^2 = |U_{21}|^2 = \sin^2\theta\,\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

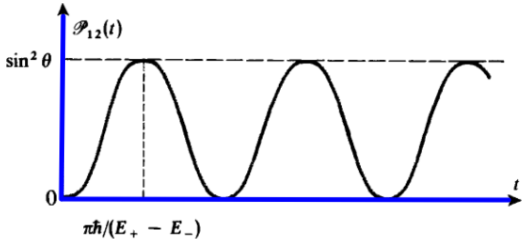
Evolução temporal

Probabilidade de transição (oscillação de Rabi)

Voltando aos parâmetros físicos originais, essa probabilidade fica:

$$\mathcal{P}_{1\to 2}(t) = \sin^2\theta\,\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) = \frac{4|\gamma|^2}{(E_1-E_2)^2+4|\gamma|^2}\,\sin^2\left[\frac{t\sqrt{(E_1-E_2)^2+4|\gamma|^2}}{2\hbar}\right].$$



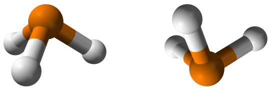


Efeito do acoplamento γ entre os dois estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$:

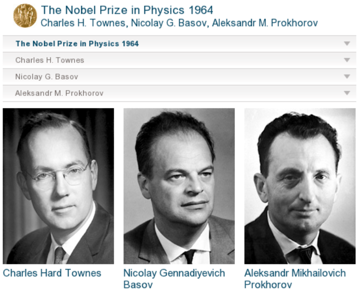
- o sistema oscila entre os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ com a frequência ω;
- o máximo de $\mathcal{P}_{1\to 2}(t)$ é determinado pela diferença entre as energias "originais" E_1 e E_2;
- Se $E_1 = E_2$, então $\mathcal{P}_{1\to 2}(t)$ atinge o valor 1 a intervalos periódicos.

Em optoeletrónica quântica: MASER e LASER

- Maser de amónia (Townes, Basov, Prokhorov);
- Estados $=$ duas configurações degeneradas de NH$_3$;
- Mesmo princípio do LASER.



$|1\rangle$ $|2\rangle$



Em física de partículas: oscilação de "flavours"

- O mesão K^0 e a sua anti-partícula:

$$|1\rangle = |K^0\rangle = |d\bar{s}\rangle, \qquad |2\rangle = |\bar{K}^0\rangle = |\bar{d}s\rangle.$$

- Oscilação/mixing de neutrinos, ex: $\nu_e \leftrightarrow \nu_\mu$

$$|1\rangle = |\nu_e\rangle, \qquad |2\rangle = |\nu_\mu\rangle.$$

Discussão interessante e mais exemplos físicos

"The Feynman Lectures on Physics", Vol. III, Cap. 8–11.

Qubits

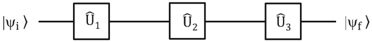
- Em computação, a informação é representada em termos binários: 0 e 1 (dois estados).
- CQ recorre a dois estados físicos ortogonais, $|0\rangle$ e $|1\rangle$, com sobreposição linear:

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle, \qquad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

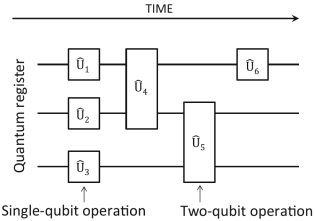
- Esta sobreposição linear $|\psi\rangle$ é designada qubit — a unidade fundamental em CQ.

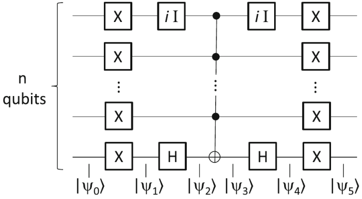
Portas (lógicas) e circuitos quânticos – manipulação de qubits

O processamento de informação em CQ requer operações sobre qbits $\longrightarrow$ evolução/Hamiltoniano.



$$|\psi_f\rangle = \hat{U}_3\hat{U}_2\hat{U}_1|\psi_i\rangle$$

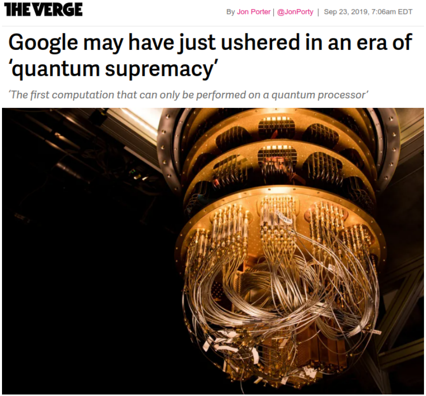




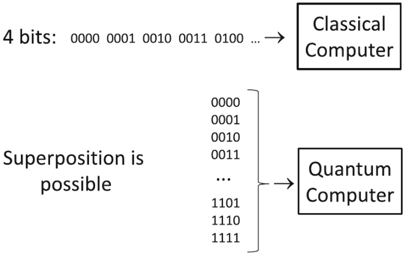
Qubits – bits para computação quântica (CQ)

Realizações físicas de um qubit

- Spin num campo $\boldsymbol{B}$ externo: $\{|+\rangle_z,\ |-\rangle_z\}$.
- Estados fundamental e excitado (átomos, quantum dots, etc.): $\{|\mathrm{f}\rangle,\ |\mathrm{e}\rangle\}$.
- Polarizações ortogonais de um fotão: $\{|H\rangle,\ |V\rangle\}$.
- Fluxos magnéticos opostos num anel supercondutor: $\{|\Phi_\uparrow\rangle,\ |\Phi_\downarrow\rangle\}$.



Paralelismo quântico (intrínseco)



Recursos IBM-Q: `https://quantum-computing.ibm.com/composer/docs/iqx/guide/`