Problema 1.

Considera dos espines 1/2, los cuales denotaremos con los subíndices L y R en presencia de un campo magnético a lo largo del eje z, $\bar{B} = (0,0,B)$. Además, de interactuar con el campo, los momentos magnéticos de los espines están acoplados. Es decir, el Hamiltoniano que describe a los dos espines es:

$$\hat{H} = g\mu_B \hat{B}\cdot(\hat{S}_L + \hat{S}_R) + J\,\hat{S}_L\cdot\hat{S}_R \quad \ldots (1)$$

g: cte. giromagnética, μ_B: magnetón de Bohr.

(a) Escribe el Hamiltoniano en la base $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle\}$.

Sol.

Recordemos que ① $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ son eigenestados de $\hat{S}_z$ con eigenvalores $\pm\frac{\hbar}{2}$, respectivamente.

Y también que ②
$$\hat{S}^i_L = \hat{S}_i \otimes \mathbb{1}$$
$$\hat{S}^i_R = \mathbb{1} \otimes \hat{S}_i$$

$$\hat{S}_z = \hat{S}^z_L + \hat{S}^z_R.$$

Entonces, el primer sumando en (1) es:

$$g\mu_B\, \bar{B}\cdot(\hat{S}_L + \hat{S}_K) = g\mu_B B\hat{S}_z = g\mu_B \hbar B\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \ldots (2)$$

Para el segundo sumando de (1), recordemos que $\hat{S}_L\cdot\hat{S}_R = \sum_i^3 \hat{S}^i_L\hat{S}^i_R$ y apartir de las matrices de spin 1/2 en un sistema de dos partículas, obtenemos

$$J\hat{S}_L\cdot\hat{S}_R = \frac{\hbar^2 J}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \ldots (3)$$

Sumando (2) y (3) $\xrightarrow{\text{para}}$ obtener la representación de (1):

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \alpha_1+\alpha_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_1 & 2\alpha_1 & 0 \\ 0 & 2\alpha_1 & -\alpha_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_1-\alpha_2 \end{pmatrix} \quad \ldots (3)$$

$\alpha_1 \equiv \frac{\hbar^2 J}{4}$ y $\alpha_2 \equiv g\mu_B B\hbar$

(b) Encuentra los eigenvectores y energías de (3).

$\varepsilon_1 = \alpha_1+\alpha_2$, Mientras que los eigenvectores (ortonormales) son:

$\varepsilon_2 = \alpha_1$ $\quad |\varepsilon_1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$

$\varepsilon_3 = -3\alpha_1$ $\quad |\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$

$\varepsilon_4 = \alpha_1 - \alpha_2$ $\quad |\varepsilon_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

$|\varepsilon_4\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$

(c) Encuentra ρ, como función de la temperatura. Supón que existe equilibrio termodinámico entre los espines.

Solución

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}.$$

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right).$$

· Density matrix theory. Karl Blum.

· Springer.

Escogemos como base a la base propia de H y obtenemos como entradas de ρ:

$$\rho_{nm} = \frac{1}{Z}\langle n|e^{-\beta H}|m\rangle = \frac{1}{Z}e^{-\beta\varepsilon_m}\delta_{nm} =$$

$$= \frac{1}{\mathrm{Tr}(e^{-\beta H})}e^{-\beta\varepsilon_m}\delta_{nm}.$$

$$Z(T) = \sum_n e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}},$$

$$\rho_{nm}(T) = \frac{e^{-\beta\varepsilon_m}\delta_{nm}}{\sum_n e^{-\varepsilon_n/kT}}.$$

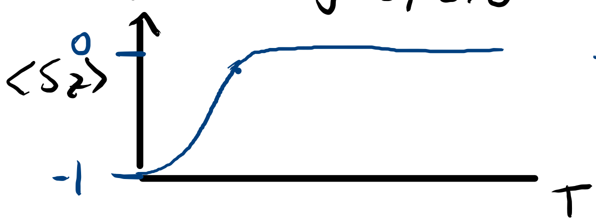
(d) Determina $\langle \hat{S}^z_R + \hat{S}^z_L \rangle$ como función de T.
Y obtén los límites $T \to \infty$ y $T \to 0$

$$\langle \hat{S}_z \rangle = tr\langle \hat{S}^z \rho \rangle = \frac{\hbar}{\sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}}} \left(e^{-\frac{\alpha_1+\alpha_2}{kT}} - e^{-\frac{\alpha_1-\alpha_2}{kT}} \right)$$

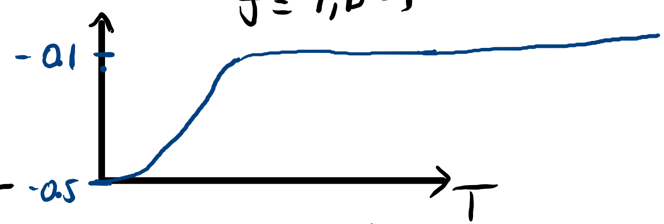
$$= \frac{-2\hbar \sinh\left(\frac{\alpha_2}{kT}\right)}{1 + 2\cosh\left(\frac{\alpha_2}{kT}\right) + e^{\frac{4\alpha_1}{kT}}}$$

Variando J y B

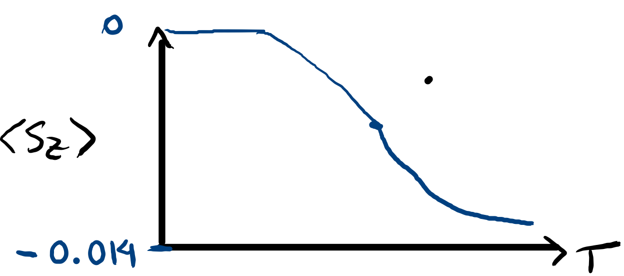
J=0, B≠0



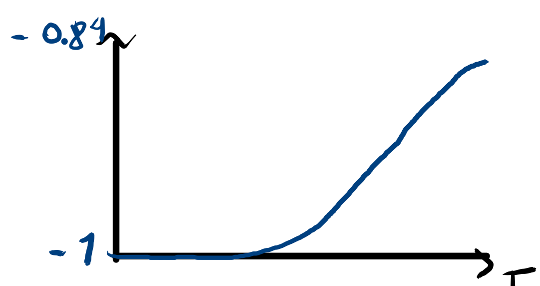
J= 1, B=1



J=25 , B = 1



J= 1 B=25



Problema 2.

Considera un spin en presencia de un campo magnético en la dirección z. $\hat{H} = B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = B_z \sigma_z$.

(a) $$\rho(T) = \frac{1}{2\cosh\left(\frac{B_z}{kT}\right)} \begin{pmatrix} e^{-\frac{B_z}{kT}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{B_z}{kT}} \end{pmatrix} \quad \ldots (1)$$

(b) At=0 la dirección del campo magnético cambia a x.

Para t>0, el nuevo $\hat{H}$ del sistema es:

$$\hat{H} = B_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Para t>0, el sistema está descrito en la nueva base

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle\right) \qquad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle\right)$$

$$|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| = \mathbb{1}$$

Expresar (1) en esta base.

$$\rho^* = M^{-1}\rho M, \quad M = M^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$\rho^* = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \alpha+\eta & \alpha-\eta \\ \alpha-\eta & \alpha+\eta \end{pmatrix} \ldots (2)$$

$$\alpha \equiv \frac{e^{-B_z\beta}}{2\cosh\left(\frac{B_z}{kT}\right)} \quad y \quad \eta \equiv \frac{e^{B_z\beta}}{2\cosh\left(\frac{B_z}{kT}\right)}.$$

(c) $\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\rho]$ $\rho(t)$, $\rho(0) = \rho^*$ como en (2)

$$\hat{H}' = B_x \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad \rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho]$$

$$\frac{\partial\rho_{11}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial\rho_{12}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}2B_x\rho_{12}$$

$$\frac{\partial\rho_{21}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}2B_x\rho_{21} \quad \frac{\partial\rho_{22}}{\partial t} = 0.$$

Las soluciones son:

$$\rho_{11}(t) = \frac{1}{2}(\alpha+\eta)$$

$$\rho_{12}(t) = \frac{1}{2}(\alpha-\eta)\ e^{-\frac{2iB_xt}{\hbar}}$$

$$\rho_{21}(t) = \frac{1}{2}(\alpha-\eta)\ e^{\frac{2iB_xt}{\hbar}}$$

$$\rho_{22}(t) = \frac{1}{2}(\alpha+\eta)$$

(d) Determina $\langle\hat{S}_x\rangle$, $\langle\hat{S}_y\rangle$ y $\langle\hat{S}_z\rangle$ en función de T, para t>0

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$\langle S_x\rangle = \frac{\alpha+\eta}{4} - \frac{\alpha+\eta}{4} = 0.$$

$$\langle \hat{S}_y\rangle = i(\alpha-\eta)\left(e^{\frac{2iB_xt}{\hbar}} - e^{-\frac{2iB_xt}{\hbar}}\right) = 2(\eta-\alpha)\sin\left(\frac{2B_xt}{\hbar}\right)$$

$$\langle \hat{S}_z\rangle = (\alpha-\eta)\left(e^{\frac{2iB_xt}{\hbar}} + e^{-\frac{2iB_xt}{\hbar}}\right) = 2(\alpha-\eta)\cos\left(\frac{2B_xt}{\hbar}\right)$$