NHT-3072-Mecânica Quântica I - Noturno - 2018.3

PROVA 1

Primeira Parte - Presencial

1. (4 pontos) Considere um sistema quântico cujo espaço de Hilbert é gerado por uma base ortonormal de 3 estados: $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$. Um estado genérico do sistema pode ser representado nessa base através de um vetor coluna $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$, onde a, b e c são coeficientes complexos. A Hamiltoniana do sistema, por sua vez, pode ser representada pela matriz quadrada complexa:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & M_{23} \\ 0 & ? & E_3 \end{pmatrix}$$

(a) Qual deve ser o valor do único elemento da matriz H que está faltando? Justifique a sua resposta.
(b) Um certo observável A atua sobre os estados da base da seguinte forma:

$$A|1\rangle = 2|1\rangle; \quad A|2\rangle = 2|2\rangle; \quad A|3\rangle = |3\rangle.$$

Escreva a matriz que representa A nessa base. Qual é a condição (em termos dos elementos de H) para que H e A sejam observáveis compatíveis? Justifique.
(c) Obtenha os autovalores de energia da hamiltoniana H.
(d) Considere o caso em que $E_1 = 1$, $E_2 = E_3 = 3$ e $M_{23} = 1$ e que o sistema seja preparado no instante $t = 0$ no estado $|\psi(0)\rangle = |2\rangle$. Encontre o estado para $t > 0$. Qual a probabilidade de medir o estado $|2\rangle$ em um instante t qualquer?

2. (2 pontos) O estado de spin de um elétron é descrito pelo operador densidade:

$$\rho = p|+\rangle\langle+| + (1-p)|-\rangle\langle-|$$

com $0 \leq p \leq 1$, onde $S_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$.
(a) Em que casos o estado deste spin será um estado puro ou misto? Qual a condição? Justifique sua resposta.
(b) Se uma medição de S_y for feita, qual será a probabilidade de obtermos $\hbar/2$ e $-\hbar/2$?
(c) Calcule os valores esperado de S_x, S_y e S_z no estado ρ.
Lembre-se que: $S_x|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\mp\rangle$ e $S_y|\pm\rangle = \pm i\frac{\hbar}{2}|\mp\rangle$.

Boa sorte!

Formulário

As matrizes de Pauli em um espaço de Hilbert bidimensional $\mathcal{H}$ são denotadas por $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Se $|\pm\rangle$ são os auto-estados de σ_z ($\sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$), podemos escreve-las como

$$\sigma_x = |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|,$$

$$\sigma_y = -i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+|,$$

$$\sigma_z = |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|.$$

Em notação matricial (na base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$):

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Os operadores de spin para uma partícula de spin-1/2 são dados por:
$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$, $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$ e $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$

Para um polinômio de segundo grau:
$ax^2 = bx + c = 0, \quad x = \frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$

Para evolução temporal:
$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$ e $U(t, t_0) = exp\big(- \frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\big)$

NHT-3072-Mecânica Quântica I - Noturno - 2018.3

PROVA 1

Segunda Parte - Para entregar- dia 29/10 - 19:00 hs

3. (2,0 pontos) Considere uma partícula de spin 1/2 sujeita a um campo magnético externo que aponta na direção z. Então, a Hamiltoniana do spin é dada por $H = -\gamma B S_z$, onde γ é a razão giromagnética para o spin e $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$.Sobre este sistema, responda:

   (a) Quais são as auto-energias e os respectivos auto-estados desta Hamiltoniana?

   Se esse spin está em equilíbrio térmico com um reservatório a uma temperatura T, o estado do spin é descrito pela matriz densidade $\rho = e^{-\beta H}/Z$, onde $\beta \equiv 1/(k_B T)$, com k_B sendo a constante de Boltzmann, e Z é a chamada função de partição.

   (b) Calcule $e^{-\beta H}$ na base de auto-estados de energia.

   (c) Calcule qual deve ser o valor de Z para que ρ defina uma matriz densidade.

   (d) Mostre que $\langle S_z \rangle_\rho = \frac{\hbar}{2} tgh(\frac{\hbar\gamma B}{2k_B T})$, onde tgh é a tangente hiperbólica.

4. (2 pontos) Seja um sistema composto por um par de partículas **A** e **B** de spins 1/2 descrito por:

$$|\psi\rangle_{AB} = \alpha|A_+\rangle \otimes |B_+\rangle + \beta|A_+\rangle \otimes |B_-\rangle + \gamma|A_-\rangle \otimes |B_+\rangle + \delta|A_-\rangle \otimes |B_-\rangle$$

   (com $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{C}$) pertencente ao espaço de Hilbert $H_A \otimes H_B$, onde o estado $|A_\pm\rangle$ satisfaz $\langle A_\pm|A_\pm\rangle = 1$ e $\langle A_\mp|A_\pm\rangle = 0$ e

$$S_z^A|A_\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|A_\pm\rangle, \quad S_\mp^A|A_\pm\rangle = \hbar|A_\mp\rangle, \quad S_\mp^A|A_\pm\rangle = 0$$

   E analogamente para $|B_\pm\rangle$.Lembrando que:

$$S_z \equiv S_z^A \otimes I^B + I^A \otimes S_z^B$$

   assim como

$$S_x \equiv S_x^A \otimes I^B + I^A \otimes S_x^B, \quad S_y \equiv S_y^A \otimes I^B + I^A \otimes S_y^B$$

   (a) Considerando estados de cada partícula, $|\phi\rangle_A = c_1|A_+\rangle + c_2|A_-\rangle \in H_A$ e $|\chi\rangle_B = d_1|B_+\rangle + d_2|B_-\rangle \in H_B$, determine explicitamente a relação entre os estados $|\psi\rangle_{AB}, |\phi\rangle_A, |\chi\rangle_B$ para obter uma relação, necessária e suficiente, para que $|\psi\rangle_{AB}$ seja separável em termos das constantes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

   (b) Seja o estado $|\psi\rangle_{AB}$ com $\beta = -\gamma = 1/\sqrt{2}$ e $\alpha = \delta = 0$. Qual o valor esperado de S_z neste estado.

   (c) Seja o estado $|\psi\rangle_{AB}$ com $\beta = \gamma = 1/\sqrt{2}$ e $\alpha = \delta = 0$. Qual é a probabilidade de se medir na direção z $-\hbar/2$ para o spin A e na direção x $+\hbar/2$ para o spin B?

   (d) Seja o estado $|\psi\rangle_{AB}$ com $\beta = \gamma = 1/\sqrt{2}$ e $\alpha = \delta = 0$. Determine se $|\psi\rangle_{AB}$ é um auto estado do operador spin $S^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$. Se for, qual é o autovalor correspondente? (Sugestão: lembrar que $S_\pm = S_x \pm iS_y$ e que $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$).

Gabarito P1 - MQ I.

Q1-

a) para que H seja hermitiano $H_{ij} = H_{ji}^*$, logo $M_{32} = M_{23}^*$

b) O observavel A é diagonal na base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, assim.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Para A ser compatível com H, devemos satisfazer $[H, A] = 0$

$$[H,A] = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & M_{23} \\ 0 & M_{23}^* & E_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & M_{23} \\ 0 & M_{23}^* & E_3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_{23} \\ 0 & -M_{23}^* & 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow M_{23} = -M_{23}^* = 0.$$

Portanto, a condição é que $M_{23} = 0$. Também pode-se ver que como A é diagonal nesta base, somente se H for diagonal nesta base, então eles serão compatíveis, a condição para H ser diagonal é que $M_{23} = 0$.

(c) Para obter os autovalores deve ter $\det(H - \lambda I) = 0$

$$\det\begin{pmatrix} E_1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & E_2-\lambda & M_{23} \\ 0 & M_{23}^* & E_3-\lambda \end{pmatrix} \qquad (E_1-\lambda)\Big[\overbrace{(E_2-\lambda)(E_3-\lambda) - |M_{23}|^2}^{\lambda^2 - (E_2+E_3)\lambda + (E_2 - E_3 - |M_{23}|^2) = 0}\Big] = 0$$

$$\lambda_1 = E_1$$

$$\lambda_{2,3} = \frac{(E_2+E_3) \pm \sqrt{(E_2-E_3)^2 + 4|M_{23}|^2}}{2}$$

(d) No caso dado

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{pmatrix} \qquad \text{Do item c: } \lambda_1 = 1;\ \lambda_2 = 2 \text{ e } \lambda_3 = 4$$

$$H|\lambda_1\rangle = \lambda_1|\lambda_1\rangle \Rightarrow |\lambda_1\rangle = |1\rangle$$

$$H|\lambda_2\rangle = \lambda_2|\lambda_2\rangle \Rightarrow |\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle)$$

$$H|\lambda_3\rangle = \lambda_3|\lambda_3\rangle \Rightarrow |\lambda_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle)$$

Como $|\Psi(0)\rangle = |2\rangle$ e $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle$

$$e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = e^{-\frac{i\lambda_1 t}{\hbar}}|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1| + e^{-\frac{i\lambda_2 t}{\hbar}}|\lambda_2\rangle\langle\lambda_2| + e^{-i\frac{\lambda_3}{\hbar}t}|\lambda_3\rangle\langle\lambda_3|$$

$$e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle = e^{-\frac{it}{\hbar}}|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1|2\rangle + e^{-i\frac{2}{\hbar}t}|\lambda_2\rangle\langle\lambda_2|2\rangle + e^{-i\frac{2}{\hbar}t}|\lambda_3\rangle\langle\lambda_3|2\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\frac{2}{\hbar}t}|\lambda_2\rangle + e^{-i\frac{4}{\hbar}t}|\lambda_3\rangle\right)$$

Determinar $P(|2\rangle) = |\langle\Psi(t)|2\rangle|^2$

Como $|\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle)$ e $|\lambda_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle)$

$$|\langle 2|\Psi(t)\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}\left(e^{-i\frac{4}{\hbar}t} + e^{-i\frac{2}{\hbar}t}\right)\langle 2|2\rangle\right|^2$$

$$|\langle 2|\Psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \cos\frac{2}{\hbar}t\right)$$

Q2 - $\rho = p|+\rangle\langle+| + (1-p)|-\rangle\langle-|$

O estado puro satisfaz $\rho^2 = \rho$.

$\rho^2 = p^2|+\rangle\langle+| + (1-p)^2|-\rangle\langle-|$.

ou seja, $p = p^2 \Rightarrow p = 1$

$(1-p)^2 = (1-p) \Rightarrow p = 0$

Logo será puro se $p = 0$ ou 1 e misto com qq outro caso.

(b) $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$

$$\begin{cases} +\frac{\hbar}{2} \rightarrow |y,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle) \\ -\frac{\hbar}{2} \rightarrow |y,-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - i|-\rangle) \end{cases}$$

$P(S_y = \frac{\hbar}{2}) = tr(P_{y+}\rho)$; $P_{y+} = |y,+\rangle\langle y,+|$.

$= p\, tr(P_{y+}|+\rangle\langle+|) + (1-p)\, tr(P_{y,+}|-\rangle\langle-|)$

Lembrando que $tr(|\alpha\rangle\langle\beta|) = \langle\beta|\alpha\rangle$

$= p\langle+|y,+\rangle\langle y,+|+\rangle + (1-p)\cancel{\langle}\langle-|y,+\rangle\langle y,+|-\rangle$.

$= p|\langle y,+|+\rangle|^2 + (1-p)|\langle y,+|-\rangle|^2$

$= \frac{1}{2}p + \frac{1}{2}(1-p) = \boxed{1/2}$

De forma analoga

$P(S_y = -\frac{\hbar}{2}) = \boxed{1/2}$

c) $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$

$\langle S_y\rangle_\rho = Tr(\rho S_y) = \frac{\hbar}{2}Tr(\rho\sigma_y) = 0$

$$\langle S_x \rangle_\rho = Tr(\rho S_x) = \frac{\hbar}{2} Tr(\rho \sigma_x) = 0$$

$$\langle S_z \rangle_\rho = Tr(\rho S_z) = \frac{\hbar}{2} tr(\rho \sigma_z).$$

$$= \Big[\big(p |+\rangle\langle+| + (1-p) |-\rangle\langle-|\big)\big(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|\big)$$

$$= \frac{\hbar}{2} tr \Big[p |+\rangle\langle+| - (1-p) |-\rangle\langle-| \Big] = \frac{\hbar}{2}(2p-1)$$

$$= \hbar\left(p - \frac{1}{2}\right)$$

Q3.

a) $H|\pm\rangle = -\gamma B\left(\pm\frac{\hbar}{2}\right)|\pm\rangle = \mp\frac{\gamma B\hbar}{2}|\pm\rangle$

$$\begin{cases} E_+ = -\frac{\hbar\gamma B}{2} \rightarrow |+\rangle \text{ (estado fundamental)} \\ E_- = +\frac{\hbar\gamma B}{2} \rightarrow |-\rangle \text{ (estado excitado)} \end{cases}$$

(b) $e^{-\beta H}$ como $H = -\frac{\gamma B\hbar}{2}\left(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|\right)$

$$\boxed{e^{-\beta H} = e^{\frac{\hbar\gamma B}{2}\beta}|+\rangle\langle+| + e^{-\frac{\hbar\gamma B}{2}\beta}|-\rangle\langle-|}$$

(c) $\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$

~~Mostrar $\rho^\dagger = \rho$~~ Para ser op. densidade

1) $\rho^\dagger = \rho$

2) os autovalores $\geqslant 0$. $\left(\frac{e^{\pm\beta\frac{\hbar\gamma B}{2}}}{Z} \geqslant 0\right)$

3) $Tr(\rho) = 1$.

$$Z = tr\left(e^{-\beta H}\right) = e^{\beta\hbar\gamma B/2} + e^{-\beta\hbar\gamma B/2} = 2\cosh\left(\beta\frac{\hbar\gamma B}{2}\right)$$

(d) $\langle S_z\rangle_\rho = tr(\rho S_z)$

$$= \frac{e^{\beta\frac{\hbar\gamma B}{2}}}{Z}\, tr\underbrace{\left(|+\rangle\langle+|S_z\right)}_{\langle+|S_z|+\rangle} + e^{-\beta\frac{\hbar\gamma B}{2}}\, tr\underbrace{\left(|-\rangle\langle-|S_z\right)}_{\langle-|S_z|-\rangle}$$

6

$$\langle S_z \rangle_\rho = \frac{\frac{\hbar}{2} \cdot \left(e^{\frac{\hbar \gamma B}{2K_BT}} - e^{-\frac{\hbar \gamma B}{2K_BT}} \right)}{2\cosh \cdot \left(\frac{\hbar \gamma B}{2K_BT} \right)} = \frac{\frac{\hbar}{2} \operatorname{senh}\left(\frac{\hbar \gamma B}{2K_BT} \right)}{\cosh\left(\frac{\hbar \gamma B}{2K_BT} \right)}$$

$$\boxed{\langle S_z \rangle_\rho = \frac{\hbar}{2} \operatorname{tgh}\left(\frac{\hbar \gamma B}{2K_BT} \right)}$$

4)

(a) $|\Psi\rangle = |\phi\rangle_A \otimes |\chi\rangle_B = \left(c_1|A_+\rangle + c_2|A_-\rangle\right) \otimes \left(d_1|B_+\rangle + d_2|B_-\rangle\right)$

$= c_1 d_1 |A_+, B_+\rangle + c_1 d_2 |A_+, B_-\rangle + c_2 d_1 |A_-, B_+\rangle + c_2 d_2 |A_-, B_-\rangle$

Logo

$$\left.\begin{array}{l} c_1 d_1 = \alpha \\ c_1 d_2 = \beta \\ c_2 d_1 = \gamma \\ c_2 d_2 = \delta \end{array}\right\} \quad \begin{array}{l} \left.\begin{array}{l} c_1 = \frac{\alpha}{d_1} \\ c_1 = \frac{\beta}{d_2} \end{array}\right\} \frac{\alpha}{d_1} = \frac{\beta}{d_2} \Rightarrow \frac{d_1}{d_2} = \frac{\alpha}{\beta} \\ \left.\begin{array}{l} c_2 = \frac{\gamma}{d_1} \\ c_2 = \frac{\delta}{d_2} \end{array}\right\} \frac{\gamma}{d_1} = \frac{\delta}{d_2} \Rightarrow \frac{d_1}{d_2} = \frac{\gamma}{\delta} \end{array}$$

Assim: $\frac{\gamma}{\delta} = \frac{\alpha}{\beta} \Rightarrow \boxed{\alpha\delta = \gamma\beta}$ cond. p/ estados separaveis

(b) $|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|A_+, B_-\rangle - |A_-, B_+\rangle\right)$

$\langle S_z \rangle_{|\Psi\rangle_{AB}} = {}_{AB}\langle \Psi | S_z | \Psi \rangle_{AB}$

$= {}_{AB}\langle \Psi | S_z^A \otimes I^B + I^A \otimes S_z^B | \Psi \rangle_{AB} = 0$

c) $|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|A_+, B_-\rangle + |A_-, B_+\rangle\right)$

Projetor associado a $-\frac{\hbar}{2}$ em A na direção z $P_{Az+} = |A_-\rangle\langle A_-|$

Projetor associado a $+\frac{\hbar}{2}$ em B na direção x: $P_{Bx+} = \frac{1}{2}\left(|B_+\rangle + |B_-\rangle\right)\left(\langle B_+| + \langle B_-|\right)$

$P_{\substack{z- \\ x+}} = |A_-\rangle\langle A_-| \otimes \frac{1}{2}\left(|B_+\rangle\langle B_+| + |B_+\rangle\langle B_-| + |B_-\rangle\langle B_+| + |B_-\rangle\langle B_-|\right)$

Prob $= {}_{AB}\langle \Psi | P_{\substack{Az- \\ Bx+}} | \Psi \rangle = \frac{1}{4}$ ||

d) $|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|A_+, B_-\rangle + |A_-, B_+\rangle \right)$

Podemos escrever $S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ como:

$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2}$ $\quad S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i}$

$S^2 = \frac{1}{2} \left(S_+ S_- + S_- S_z \right) + S_z^2$ para cada spin.

$S_{AB}^2 = S^{A^2} \otimes I^B + I^A \otimes S^{B^2}$

$S_{AB}^2 |\Psi_{AB}\rangle = \underline{2\hbar^2} |\Psi_{AB}\rangle$ Portanto é autovetor e o autovalor é $2\hbar^2$