FI-004 Física Estatística I
Segundo semestre 2016
Lista de Exercícios #1

Guillermo Cabrera
cabrera@ifi.unicamp.br

Agosto de 2016

1. **Matriz Densidade**

   (a) Considere as seguintes matrizes e/ou operadores dados abaixo. Diga quais deles representan um operador Densidade (satisfazem todos os requisitos para ser um operador ou matriz densidade). Justifique a sua resposta.

   $$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 \\ 3/4 & 3/4 \end{pmatrix} \ ;$$

   $$\rho_2 = \frac{1}{3}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| + \frac{2}{3}\left|2\right\rangle\left\langle 2\right| + \frac{\sqrt{2}}{3}\left(\left|1\right\rangle\left\langle 2\right| + \left|2\right\rangle\left\langle 1\right|\right) \ ,$$

   com $(\left|1\right\rangle, \ \left|2\right\rangle)$ um par de kets ortonormais;

   $$\rho_3 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/4 \\ 0 & 1/4 & 0 \\ 1/4 & 0 & 1/4 \end{pmatrix} \ .$$

   (b) Dos operadores densidade aceitos acima, diga quais representam um ensemble puro e quais um ensemble misto. Para o caso do ensemble puro, encontre o ket estado que ele representa. Para ensembles mistos, encontre uma decomposição como soma de ensembles puros. □

2. **Partículas de spin 1/2**

   Use a representação das matrizes de Pauli $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ para spin 1/2 nos problemas abaixo:

   $$\frac{2}{\hbar}\mathbf{S}_x = \boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{2}{\hbar}\mathbf{S}_y = \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{2}{\hbar}\mathbf{S}_z = \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(a) Considere um ensemble puro de sistemas de spin 1/2 preparados de maneira idêntica. Suponha que os valores esperados $\langle S_x \rangle$ e $\langle S_z \rangle$ são conhecidos e também o sinal de $\langle S_y \rangle$. Mostre que esta informação é suficiente para determinar o estado quântico (encontre tal estado), não sendo necessário conhecer a magnitude de $\langle S_y \rangle$.

(b) Considere agora um ensemble misto (spin 1/2). Suponha que as médias sobre o ensemble $[S_x]$, $[S_y]$ e $[S_z]$ são dadas. Mostre que esta informação é suficiente para construir a matriz densidade que carateriza o ensemble. Falamos que um sistema não está polarizado quando

$$[S_x] = [S_y] = [S_z] = 0 \ .$$

Encontre a matriz densidade que carateriza esse ensemble e encontre no mínimo duas decomposições como somas de ensembles puros. $\square$

3. **Ensemble misto.**

Para spin 1/2, considere o caso de um ensemble que representa um feixe parcialmente polarizado, con 75% para o estado $|S_z;+\rangle$ e 25% para $|S_x;+\rangle$.

(a) Encontre a matriz densidade expressada nas bases de S_z e de S_x respectivamente. Encontre os autovalores de $\boldsymbol{\rho}$ e uma decomposição em ensembles puros diferente das duas anteriores.

(b) Calcule os valores médios do spin e expresse o operador $\boldsymbol{\rho}$ na forma padrão

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{2}\left(1 + \overrightarrow{\mathbf{m}} \cdot \overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}}\right) \ ,$$

onde $\overrightarrow{\mathbf{m}}$ é o vetor polarização.

4. **Traço parcial para spin 1/2**

Considere um sistema de duas partículas de spin 1/2 no estado puro abaixo:

$$|\psi\rangle = \alpha\,|+-\rangle + \beta\,|-+\rangle \,,$$

onde $+$ $(-)$ significa spin para cima (baixo) e os coeficientes (α, β) são em geral complexos. Encontre o operador estado **reduzido** para o primeiro spin. Essa situação pode ser descrita por um ket-estado? Responda a mesma pergunta para os kets de duas partículas seguintes:

$$|\phi\rangle = \alpha\,|+-\rangle + \beta\,|++\rangle \,,$$

$$|\chi\rangle = \alpha\,|+-\rangle + \beta\,|--\rangle \,. \qquad \square$$

5. **Partículas de spin 1**

Considere agora um ensemble de sistemas de spin $J = 1$. A matriz densidade é construída como uma matriz de 3×3. Quantos parâmetros reais independentes precisamos para determinar o ensemble? Que outras grandezas físicas, além de $[J_x]$, $[J_y]$ e $[J_z]$, precisamos conhecer para caraterizar completamente o ensemble? Use a seguinte representação dos operadores de momentum angular que diagonaliza o operador J_z (com $\hbar = 1$):

$$J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad J_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} .$$

Encontre a álgebra induzida pelas matrizes acima, lembrando as relações de comutação do momento angular. Mostre que a forma mais geral da matriz densidade pode ser escrita como

$$\rho = \overrightarrow{\mathbf{P}} \cdot \overrightarrow{\mathbf{J}} + \overrightarrow{\mathbf{J}} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{Q}} \cdot \overrightarrow{\mathbf{J}} \ , \tag{1}$$

onde $\overrightarrow{\mathbf{P}} = (P_x, P_y, P_z)$ é um vetor real e $\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}$ é um tensor de ordem dois, real e simétrico

$$\overleftrightarrow{\mathbf{Q}} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{12} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{13} & Q_{23} & Q_{33} \end{pmatrix} .$$

Mostre que a condição de normalizaçaõ $Tr\ \rho = 1$ é uma condição sobre o traço da matriz de $\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}$. A grandeza $\overrightarrow{\mathbf{P}}$ é chamada de momento dipolar e o tensor $\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}$ de momento quadrupolar. Mostre que a expansão (1) possue 8 parâmetros reais livres e construa explicitamente a matriz densidade para o ensemble (totalmente polarizado) correspondente a um estado puro com autovalor +1 para J_z. Expresse seu resultado na forma (1). □

6. **Propriedades do Operador Densidade**

Mostre, que em geral, temos a desigualdade abaixo:

$$\rho_{ii}\rho_{jj} \geq |\rho_{ij}|^2 \ . \tag{2}$$

A partir da desigualdade (2), encontre uma condição necessária e suficiente para termos um ensemble puro. Aplique essa condição nas matrizes do problema #1 da lista. □

7. **Representação de Wigner**

Considere o caso *1-dim*. Chamamos de representação de Wigner de um operador de uma partícula $\mathbf{\Omega}$, à função da coordenada e momentum definida por

$$\Omega_W(q,p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dy \ \left\langle q - \frac{1}{2}y \,|\, \mathbf{\Omega} |\, q + \frac{1}{2}y \right\rangle \ \exp\left(\frac{i}{\hbar}py\right) \ .$$

Encontre a representação de Wigner de operadores usuais, como a energia cinética e potencial:

$$\mathbf{K} = \mathbf{p}^2 \diagup 2m,$$

$$\mathbf{V} = V\left(\mathbf{x}\right) \ ,$$

onde $\mathbf{p}$ e $\mathbf{x}$ são os operadores de momentum e posição. Mostre que o valor médio de $\boldsymbol{\Omega}$ no ensemble definido por $\boldsymbol{\rho}$ é dado pela expressão

$$[\boldsymbol{\Omega}] = Tr\left(\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\Omega}\right) = \int dq \int dp \ \rho_W(q,p) \ \Omega_W(q,p) \ ,$$

onde é feita uma integração sobre todo o espaço de fase (q,p) e $\rho_W(q,p)$ é a função de Wigner

$$\rho_W(q,p) \equiv \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dy \ \left\langle q - \frac{1}{2}y \,|\, \boldsymbol{\rho} |\, q + \frac{1}{2}y \right\rangle \ \exp\left(\frac{i}{\hbar}py\right) \ . \qquad \square$$

8. **Função de Wigner para o oscilador harmônico**

   Para o oscilador harmônico *1-dim*, encontre a função de Wigner associada ao estado fundamental e ao primeiro estado excitado. Comente seu resultado. $\square$

9. **Função de Wigner negativa**

   Encontre a função de Wigner de um estado que é uma superposição de dois pacotes gaussianos centrados em $\pm c$:

$$\psi(q) = C\left\{\exp\left[-\frac{(q-c)^2}{4a^2}\right] + \exp\left[-\frac{(q+c)^2}{4a^2}\right]\right\} \ , \tag{3}$$

   onde C é uma constante de normalização. Mostre que a função de Wigner de (3) possui, além dos picos em $\pm c$, um pico centrado em $q = 0$ modulado por um fator oscilatório (que toma valores negativos). Este último representa efeitos de interferência entre os dois pacotes gaussianos e não é eliminado no limite $c \to \infty$, quando os pacotes estão muito separados. $\square$