Mecânica Quântica I

2a LISTA

I/2023

1) Considere um sistema físico formado por duas partículas (1) e (2), de mesma massa m, que não interagem entre si e que são colocadas num potencial do tipo "poço infinito" de largura a. Denotemos por $H(1)$ e $H(2)$ as hamiltonianas de cada partícula e por $|\varphi_n(1)\rangle$ e $|\varphi_q(2)\rangle$ os auto estados correspondentes às partículas (1) e (2) de energias $\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ e $\frac{q^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, respectivamente. No espaço do sistema global a base é composta pelos estados $|\varphi_n(1)\varphi_q(2)\rangle$ definidos por

$$|\varphi_n(1)\varphi_q(2)\rangle \equiv |\varphi_n(1)\rangle \otimes |\varphi_q(2)\rangle$$

a) Quais são os auto estados e autovalores do operador $H = H(1) + H(2))$, a hamiltoniana total do sistema? Qual o grau de degenerescência dos dois níveis de mais baixa energia?

b) Assuma que o sistema encontre-se, inicialmente, no estado

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|\varphi_1\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\varphi_1\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\varphi_2\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\varphi_2\varphi_2\rangle$$

i) Se a energia total do sistema é medida, quais são os possíveis resultados encontrados e com que probabilidades?

ii) Repita o ítem anterior no caso de apenas $H(1)$ ter sido medido.

iii) Mostre que $|\psi(0)\rangle$ é um produto tensorial de estados. Quando o sistema se encontra neste estado, calcule as seguintes médias: $\langle H(1)\rangle$, $\langle H(2)\rangle$ e $\langle H(1)H(2)\rangle$. Compare $\langle H(1)\rangle\langle H(2)\rangle$ com $\langle H(1)H(2)\rangle$; explique o seu resultado.

c) Assuma agora que o estado inicial seja dado por:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|\varphi_1\varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}|\varphi_1\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|\varphi_2\varphi_1\rangle$$

Mostre, então, que $|\psi(0)\rangle$ não pode ser escrito como um produto tensorial de dois estados e repita o resto do ítem (iii) acima para este novo estado.

d) Escreva na base $|\varphi_n\varphi_p\rangle$ a matriz que representa o operador densidade $\rho(0)$ correspondente ao estado definido em (a). Calcule os traços parciais

$$\rho(1) = \mathrm{Tr}_2\rho \qquad \text{and} \qquad \rho(2) = \mathrm{Tr}_1\rho$$

Os operadores densidade ρ, $\rho(1)$ e $\rho(2)$ descrevem estados puros? Compare ρ com $\rho(1)\otimes\rho(2)$; qual é a sua interpretação?

e) Repita o ítem anterior para o estado definido em (c).

f) Considere o sistema em equilíbrio termodinâmico a temperatura T, ou seja, o seu operador densidade, na representação de coordenadas, é dado por $\rho = \rho_{eq}(x_1, x_2, y_1, y_2)$ onde os índices (1) e (2) referem-se às variáveis das partículas (1) e (2) respectivamente. Então,

i) escreva, na representação de coordenadas, o operador densidade reduzido de (1) em termos das auto funções e dos auto valores de energia de uma partícula no"poço infinito".

ii) repita o ítem anterior após termos efetuado uma medida de posição, apenas na partícula (1), localizando-a no ponto q_0 com incerteza Δq.

2) Considere uma partícula em 3 dimensões cuja hamiltoniana é dada por

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}).$$

Calculando $[\mathbf{x}.\mathbf{p}, H]$ obtenha a expressão

$$\frac{d}{dt}\langle\mathbf{x}.\mathbf{p}\rangle = \left\langle\frac{\mathbf{p}^2}{m}\right\rangle - \langle\mathbf{x}.\nabla V\rangle$$

A relação acima pode ser identificada como o análogo do teorema do virial em mecânica quântica se o seu lado esquerdo se anular. Sob que condição isto deve acontecer?

3) Uma caixa contendo uma partícula está dividida em dois compartimentos por uma partição bem fina. Sabe-se que quando a partícula está, com certeza, do lado direito (esquerdo) da caixa o seu estado é representado por um ket $|R\rangle$ ($|L\rangle$), onde desprezamos as variações espaciais dentro de cada partição. A forma mais geral do vetor de estado da

partícula pode ser escrita como

$$|\alpha\rangle = |R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle\langle L|\alpha\rangle$$

onde $\langle R|\alpha\rangle$ e $\langle L|\alpha\rangle$ podem ser vistos como "funções de onda". A partícula pode tunelar através da partição; este efeito de tunelamento é caracterizado pela hamiltoniana

$$H = \Delta(|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|),$$

onde Δ é um número real com dimensão de energia.

a) Encontrar os auto valores de energia e os seus auto estados convenientemente normalizados.

b) Na versão de Schrödinger os kets $|R\rangle$ e $|L\rangle$ estão fixos e o vetor de estado evolui no tempo. Suponha que o sistema esteja representado por $|\alpha\rangle$, como acima, em $t = 0$. Encontre o vetor de estado $|\alpha(t)\rangle$ para $t > 0$ aplicando o operador de evolução apropriado em $|\alpha\rangle$.

c) Suponha que em $t = 0$ a partícula se encontre, com certeza, do lado direito da caixa. Qual a probabilidade de se observar a partícula do lado esquerdo como função do tempo?

d) Escreva equações de Schrödinger para as funções de onda $\langle R|\alpha(t)\rangle$ e $\langle L|\alpha(t)\rangle$. Mostre que as soluções deste sistema são exatamente o que se espera de (b).

e) Suponha que por um erro de impressão a hamiltoniana é escrita como

$$H = \Delta|L\rangle\langle R|.$$

Resolvendo explicitamente o problema da evolução temporal com esta hamiltoniana, mostre que a conservação de probabilidade é violada.