

2ª LISTA DE EXERCÍCIOS

Disciplina: MAGNETISMO E SPINTRÔNICA

Professor: César Augusto Dartora¹

Esta lista de exercícios tem por objetivo a revisão dos conceitos fundamentais da Mecânica Quântica. Sugere-se fortemente a leitura dos Capítulos 1, 2 e 3 do livro Modern Quantum Mechanics de J.J. Sakurai.

- 1) Suponha que uma matriz 2×2 M seja escrita na forma abaixo:

$$M = a_0 + i\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a} ,$$

sendo a_0 um número, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ as matrizes de Pauli e \mathbf{a} um vetor no espaço tridimensional.

a) Determine a relação entre a_0 e a_k , onde o índice k representa $k = x, y, z = 1, 2, 3$, e os traços $\text{Tr}(M)$ e $\text{Tr}(\sigma_k M)$. Lembre-se que o traço de uma matriz corresponde à soma dos elementos da diagonal principal.

b) Obtenha a_0 e \mathbf{a} em termos dos elementos M_{ij} da matriz M .

- 2) Considere os ket-estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$, na forma

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

a) Demonstre que as matrizes de Pauli podem ser representadas na forma abaixo:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+| , \\ \sigma_y &= -i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+| , \\ \sigma_z &= |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| , \end{aligned}$$

b) Demonstre que:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$$

com os índices α e β escolhidos entre $+, -$.

c) Demonstre que:

$$\sum_{\alpha=+,-} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbf{1}$$

onde $\mathbf{1}$ é a matriz identidade de ordem 2.

d) Definindo $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, onde $i = x, y, z$ mostre que

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= i\hbar S_z \\ \{S_i, S_j\} &= \frac{\hbar^2}{2}\delta_{ij} \end{aligned}$$

onde δ_{ij} é a função delta de Kronecker.

¹cadartora@eletrica.ufpr.br

- 3) Demonstre que para um dado um vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$ formando um ângulo β com o eixo z e α com o eixo x , ou seja $\mathbf{n} = (\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta)$, temos:

$$\begin{aligned}\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} |\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle &= \pm |\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle, \\ |\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, +\rangle &= \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle + e^{i\alpha} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) |-\rangle, \\ |\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, -\rangle &= \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) |-\rangle - e^{i\alpha} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle,\end{aligned}$$

Verifique ainda que:

$$\begin{aligned}\langle \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, + | \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, + \rangle &= \langle \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, - | \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, - \rangle = 1 \\ \langle \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, + | \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, - \rangle &= \langle \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, - | \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, + \rangle = 0\end{aligned}$$

- 4) Sendo o operador de spin $\mathbf{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$ para um dado sistema físico de spin 1/2 que sabe-se, está inicialmente num auto-estado de spin $\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$, na direção $\hat{\mathbf{n}}$, cujo auto-valor vale $\hbar/2$, ou seja:

$$|\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}, +\rangle = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle + e^{i\alpha} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) |-\rangle$$

sendo $|+\rangle$ e $|-\rangle$ os autoestados da matriz S_z com autovalores $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$, respectivamente, e estando $\hat{\mathbf{n}}$ contido no plano xz . Qual a probabilidade de que uma medida de S_x , ou seja, do spin na direção x , tenha como resultado $+\hbar/2$?

- 5) Considere um sistema físico de três níveis $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$ e A um operador físico que pode ser representado nessa base de autovetores pela seguinte matriz:

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}.$$

Observe que A tem espectro degenerado. Dado outro operador B representado nessa base na forma abaixo:

$$B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ib \\ 0 & -ib & 0 \end{pmatrix},$$

- a) O operador B também tem espectro degenerado?
b) mostre que A e B comutam.
c) encontre uma base que diagonalize A e B simultaneamente.
- 6) Dado o operador Hamiltoniano de um sistema de dois níveis:

$$\hat{H} = \varepsilon(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|) + \Delta(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

onde ε e Δ são dois valores reais com dimensão de energia. Encontre os auto-valores e autovetores de energia. O que acontece para $\Delta \rightarrow 0$?

- 7) Dado o operador Hamiltoniano de um sistema de dois níveis:

$$\hat{H} = \varepsilon(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) + \Delta(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

onde ε e Δ são dois valores reais com dimensão de energia. Encontre os auto-valores e autovetores de energia. O que acontece para $\Delta \rightarrow 0$? O que se pode inferir sobre a presença de Δ no espectro de energias do Hamiltoniano acima?

8) Mostre que

$$\exp\left[-i\frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta}{2}\right] = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

sendo $\hat{\mathbf{n}}$ um vetor unitário e θ um número real.

9) Prove que

$$\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a} \vec{\sigma} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b} .$$

Dica: utilize as relações de comutação de matrizes de Pauli e o fato de que

$$\sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2}[\sigma_i, \sigma_j] + \frac{1}{2}\{\sigma_i, \sigma_j\} .$$

10) Demonstre que para a seguinte transformação

$$\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a}' = S^\dagger \vec{\sigma} \cdot \mathbf{a} S$$

onde

$$S = \exp\left[-i\frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\theta}{2}\right]$$

sendo $\hat{\mathbf{n}}$ um vetor unitário e θ um número real e $SS^\dagger = S^\dagger S = \mathbf{1}$, o determinante de $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a}$ fica invariante. Encontre a'_k em função de a_k . O que representa essa transformação?

11) Discuta as versões de Schroedinger, Heisenberg e Dirac da Mecânica Quântica.

12) Considere o problema de precessão de spin, representado pelo Hamiltoniano abaixo:

$$\hat{H} = -\omega S_z$$

onde $\omega = eB/m$, que descreve um sistema de spin 1/2 na presença de campo magnético na direção z . Se o estado inicial corresponde à projeção de spin positiva na direção x , ou seja:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}(|+\rangle + |-\rangle) ,$$

determine o estado $|\psi(t)\rangle$, resolvendo a equação de Schroedinger dependente do tempo e determine os valores médios de S_x , S_y e S_z

13 Considerando o mesmo Hamiltoniano do exercício anterior

$$\hat{H} = -\omega S_z$$

escreva as equações de movimento de Heisenberg e encontre $S_x(t)$, $S_y(t)$ e $S_z(t)$, para todo instante de tempo. Encontre os valores médios de S_x , S_y e S_z para o mesmo estado inicial do problema anterior:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}(|+\rangle + |-\rangle) .$$

14 Obtenha a equação de Liouville para a matriz densidade na versão de Schroedinger. Você pode utilizar

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0\rangle ,$$

onde $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ é o operador unitário de evolução temporal, \hat{H} é o hamiltoniano do sistema. A matriz densidade pode ser escrita em uma base completa na forma

$$\rho = \sum_{m,n} w_{mn} |m\rangle \langle n|$$

com a condição $\text{Tr}(\rho) = \sum_m w_{mm} = 1$.

- 15) Obtenha as equações de Bloch para um sistema de dois níveis cujo hamiltoniano possa ser escrito na forma:

$$\hat{H} = -\mu_B B_0 \sigma_z - B_1 \cos(\omega t) \sigma_x ,$$

sendo B_0 um campo magnético constante aplicado na direção z e B_1 um campo magnético variante no tempo aplicado na direção x .

Encontre a solução do sistema para a matriz densidade no instante inicial na forma:

$$\rho_0 = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Discuta as relações entre ω e B_0 . O que acontece se $\omega = 2\mu_B B_0$?

- 16) Em linhas gerais, o que é a Regra de Ouro de Fermi e onde pode ser aplicada?
- 17) Quais são as principais propriedades das rotações e do grupo das rotações? Um ponto importante da discussão é o que acontece ao módulo de um vetor submetido à uma rotação. Matrizes de Rotação. Representação das rotações. Escalares, Vetores, Spinores. Relação entre o grupo $O(3)$ e $SU(2)$.
- 18) Faça uma discussão detalhada sobre o teorema spin-estatística. O que são partículas idênticas? O que são bósons e férmions? Dê exemplos. O que aconteceria se os átomos fossem formados por bósons e não por férmions?
- 19) Considere um sistema de bósons livres:

$$\hat{H} = \hbar\omega a^\dagger a .$$

Dada a relação de comutação bosônica mais geral:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j] &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 , \\ [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij} , \end{aligned}$$

onde δ_{ij} é a função delta de Kronecker e as relações acima aparecem em sistemas com graus de liberdade adicionais, representados pelos índices i, j :

- a) o que representam os operadores a, a^\dagger e $\hat{n} = a^\dagger a$?
- b) encontre a partir do Hamiltoniano acima, a função de Bose-Einstein considerando:

$$\rho = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\text{Tr}(e^{-\beta\hat{H}})} ,$$

e $f(\omega) = \langle \hat{n} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{n})$.

- c) Obtenha as equações de Heisenberg para a e a^\dagger .

- 20) Considere um sistema de férmions livres:

$$\hat{H} = \varepsilon c^\dagger c .$$

Dada a relação de comutação fermiônica mais geral:

$$\begin{aligned} \{c_i, c_j\} &= \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 , \\ \{c_i, c_j^\dagger\} &= \delta_{ij} , \end{aligned}$$

onde δ_{ij} é a função delta de Kronecker e as relações acima aparecem em sistemas com graus de liberdade adicionais, representados pelos índices i, j :

a) o que representam os operadores c , c^\dagger e $\hat{n} = c^\dagger c$?

b) encontre a partir do Hamiltoniano acima, a função de Fermi-Dirac considerando:

$$\rho = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\text{Tr}(e^{-\beta\hat{H}})},$$

e $f(\varepsilon) = \langle \hat{n} \rangle = \text{Tr}(\rho\hat{n})$.

c) Obtenha as equações de Heisenberg para c e c^\dagger .

- 21) *Desafio*- Quantização do Campo Eletromagnético no Calibre de Coulomb: Considerando o chamado calibre de radiação, ou de Coulomb, onde o potencial vetor eletromagnético \mathbf{A} satisfaz a relação $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, podemos escrever uma expansão em séries de Fourier para o mesmo na forma:

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}} V \varepsilon_0}} \left(\hat{\varepsilon}_{\alpha} a_{\mathbf{k}, \alpha} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + \hat{\varepsilon}_{\alpha}^* a_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (1)$$

$a(a^\dagger)$ corresponde ao operador de aniquilação(criação) para fótons, $\alpha = 1, 2$ corresponde a duas possíveis polarizações transversais e $\alpha = +, -$ para as polarizações circulares. As relações de comutação seguem as regras para bósons, ou seja:

$$\begin{aligned} [a_{\mathbf{k}, \alpha}, a_{\mathbf{k}', \alpha'}] &= [a_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger}, a_{\mathbf{k}', \alpha'}^{\dagger}] = 0 \\ [a_{\mathbf{k}, \alpha}, a_{\mathbf{k}', \alpha'}^{\dagger}] &= \delta_{\alpha, \alpha'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (2)$$

Apenas para referência, os operadores a e a^\dagger podem ser representados na forma de matrizes (embora de dimensão infinita), conforme segue:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}, \alpha} &= \sum_{n_{\mathbf{k}, \alpha}=1}^{\infty} \sqrt{n_{\mathbf{k}, \alpha}} |n_{\mathbf{k}, \alpha} - 1\rangle \langle n_{\mathbf{k}, \alpha}| \\ a_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} &= \sum_{n_{\mathbf{k}, \alpha}=0}^{\infty} \sqrt{n_{\mathbf{k}, \alpha} + 1} |n_{\mathbf{k}, \alpha} + 1\rangle \langle n_{\mathbf{k}, \alpha}| \end{aligned}$$

portanto é fácil mostrar que:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}, \alpha} |n_{\mathbf{k}, \alpha}\rangle &= \sqrt{n_{\mathbf{k}, \alpha}} |n_{\mathbf{k}, \alpha} - 1\rangle \\ a_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} |n_{\mathbf{k}, \alpha}\rangle &= \sqrt{n_{\mathbf{k}, \alpha} + 1} |n_{\mathbf{k}, \alpha} + 1\rangle \end{aligned} \quad (3)$$

De fato, estados físicos podem ter um número arbitrário de fótons em cada modo possível, então:

$$|\Psi\rangle = |n_{k_1, 1}, n_{k_1, 2}, \dots, n_{k_n, 1}, \dots\rangle$$

O vácuo da radiação $|0\rangle$ é caracterizado por:

$$a_{\mathbf{k}, \alpha} |0\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k}, \alpha$$

Calculando os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} na forma $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$ e $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, obtém-se explicitamente:

$$\mathbf{E} = i \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2V\varepsilon_0}} \left(\hat{\varepsilon}_{\alpha} a_{\mathbf{k}, \alpha} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \hat{\varepsilon}_{\alpha}^* a_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (4)$$

$$\mathbf{B} = i \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}} \mu_0}{2V}} \left(\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} a_{\mathbf{k}, \alpha} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{e}}_{\alpha}^* a_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (5)$$

sendo $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$. Verifique que na mecânica quântica o campo eletromagnético é um operador, com as propriedades $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\dagger}$, $\mathbf{E} = \mathbf{E}^{\dagger}$ e $\mathbf{B} = \mathbf{B}^{\dagger}$.

a) Considerando-se que a densidade de energia eletromagnética é dada por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(\varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B})$$

demonstre que

$$\hat{H} = \int_V \mathcal{H} dV = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \alpha} .$$

A integral deve ser realizada sobre o volume V e devem ser utilizadas propriedades de ortogonalidade das funções de base (exponenciais complexas) na série de Fourier. Uma constante aparecerá em \hat{H} , sendo conhecida como energia do vácuo, $U_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \omega_{\mathbf{k}}$. De fato esse termo diverge para número infinito de modos, entretanto considera-se que não é fisicamente mensurável, sendo somente as excitações acima de U_0 mensuráveis fisicamente.

b) Um efeito da energia do vácuo é o chamado efeito Casimir. Faça uma pesquisa sobre esse efeito.

c) Obtenha a partir de \hat{H} , tomando a média do mesmo e passando o caso discreto para o limite do contínuo, ou seja, fazendo \mathbf{k} uma variável contínua, a função de densidade espectral de Planck.

22) Existe um modelo bastante simplificado, que é também conhecido como modelo de Jaynes-Cummings, cujo hamiltoniano é dado na forma:

$$\hat{H} = \hbar \omega a^{\dagger} a - \varepsilon \sigma_z + \Delta \sigma_x (a^{\dagger} + a) ,$$

onde σ_x e σ_z são matrizes de Pauli e $a(a^{\dagger})$ são operadores bosônicos. Apesar da aparente simplicidade, esse sistema não tem solução exata. Descreva o que esse hamiltoniano significa fisicamente. Que tipo de problema ele pode descrever? Dê exemplos práticos.

23) Qual a origem das ondas de som nos materiais? O que são fônons?

24) Discuta a interação spin-spin, o Hamiltoniano de Heisenberg e a Regra de Hund.