UFABC – FIS104 Mecânica Estatística 2015 (2 quad.)
LISTA 5 - Operador Densidade

1. (a) Das matrizes e/ou operadores dados abaixo indique quais podem e quais não podem representar um operador ou matriz densidade. Justifique a sua resposta.

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1/8 & i \\ -i & 7/8 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

$$\rho_2 = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i+1 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/4 \\ 0 & 1/4 & 0 \\ 1/4 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$\rho_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_2\rangle\langle\psi_2| \tag{4}$$

$$\rho_5 = \frac{1}{3}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \frac{2}{3}|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \frac{\sqrt{2}}{3}\left(|\psi_1\rangle\langle\psi_2| + |\psi_2\rangle\langle\psi_1|\right) \tag{5}$$

onde $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ são kets ortonormais.

(b) Nos casos que correspondem a um operador ou matriz densidade determine quais representam um estado puro e quais um estado misto. Para os estados puros, encontre o ket estado que ele representa. Para estados mistos, encontre uma decomposição como soma de estados puros.

2. O Hamiltoniano H de um elétron em um campo magnético $\mathbf{B}$ e dado por $H = -\mu_B \sigma \cdot \mathbf{B}$, onde σ é o operador de spin de Pauli, e μ_B o magnéton de Bohr. Encontrar (a) a matriz densidade na representação diagonalizada de σ_z, (b) a matriz densidade na representação diagonalizada de σ_x, e (c) o valor médio de σ_z nessas representações. Suponha que $\mathbf{B}$ está orientado na direção z.

3. (a) Determine os elementos de matriz do operador densidade $\rho = \exp[-\beta H]$ na representação de coordenadas para uma partícula livre de massa m (i.e. $H = \mathbf{p}^2/2m$) em uma caixa de lado L. Calcular seu valor limite quando L tende a infinito supondo que a função de onda da partícula é periódica. (b) Determine o valor médio do hamiltoniano $\langle H\rangle$.

4. (a) Determine os elementos de matriz do operador densidade $\rho = \exp[-\beta H]$ na representação de coordenadas para um oscilador harmônico linear,

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2. \tag{6}$$

(b) Analise os limites $\beta\hbar\omega \ll 1$ e $\beta\hbar\omega \gg 1$. (c) Determine o valor médio do hamiltoniano $\langle H\rangle$.

5. Considere um sistema de N partículas distinguíveis e interagentes, cujo Hamiltoniano é

$$H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + V(q_1, ..., q_{3N}). \tag{7}$$

Determine os elementos de matriz do operador densidade $\rho = \exp[-\beta H]$ na representação de coordenadas. Mostre que no limite $h \to 0$, a função de partição quântica $\mathrm{Tr}\,(\exp[-\beta H])$ coincide com a forma clássica

$$Q = \frac{1}{h^{3N}} \int \cdots \int \exp[-\beta H]\, d^{3N}q\, d^{3N}p. \tag{8}$$