Métodos Computacionais em Física: Mecânica Quântica

Aula: Sistema de dois níveis.

Aula: Sistema de dois níveis - Objetivos

Ao final desta aula, você deverá ser capaz de:

1) Calcular auto-energias e auto-estados de um Hamiltoniano que atua em um espaço de Hilbert de dimensão 2.

2) Simular a evolução temporal de um estado genérico neste espaço de Hilbert.

3) Entender o conceito de *oscilações de Rabi* em um sistema de dois níveis.

Tarefas: 1 - Cálculo dos auto-valores de um Hamiltoniano 2x2 em função de um parâmetro.
2- Evolução temporal e oscilações de Rabi.

Tempo aproximado: 20 a 30 min (lembrando que o *debug* é a maior parte disso!).

Sistema de dois estados:
níveis de energia e evolução temporal.

- Formalismo matricial.
- Auto-estados de energia.
- Oscilações de Rabi.

Sistema de dois níveis.

- Consideremos um espaço de Hilbert com apenas 2 estados.
- Digamos que eles sejam auto-estados de um Hamiltoniano $H_0(k)$

$$\begin{cases} H_0(k)|\phi_1^{(0)}\rangle = \epsilon_1^{(0)}(k)|\phi_1^{(0)}\rangle \\ H_0(k)|\phi_2^{(0)}\rangle = \epsilon_2^{(0)}(k)|\phi_2^{(0)}\rangle \end{cases}$$

- Usando os estados $\left\{|\phi_1^{(0)}\rangle, |\phi_2^{(0)}\rangle\right\}$ como base, podemos representar o Hamiltoniano como uma matriz 2x2 e os estados como vetores de duas componentes.

$$H_0(k) = \begin{pmatrix} \epsilon_1^{(0)}(k) & 0 \\ 0 & \epsilon_2^{(0)}(k) \end{pmatrix}$$

$$|\phi_1^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\phi_2^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

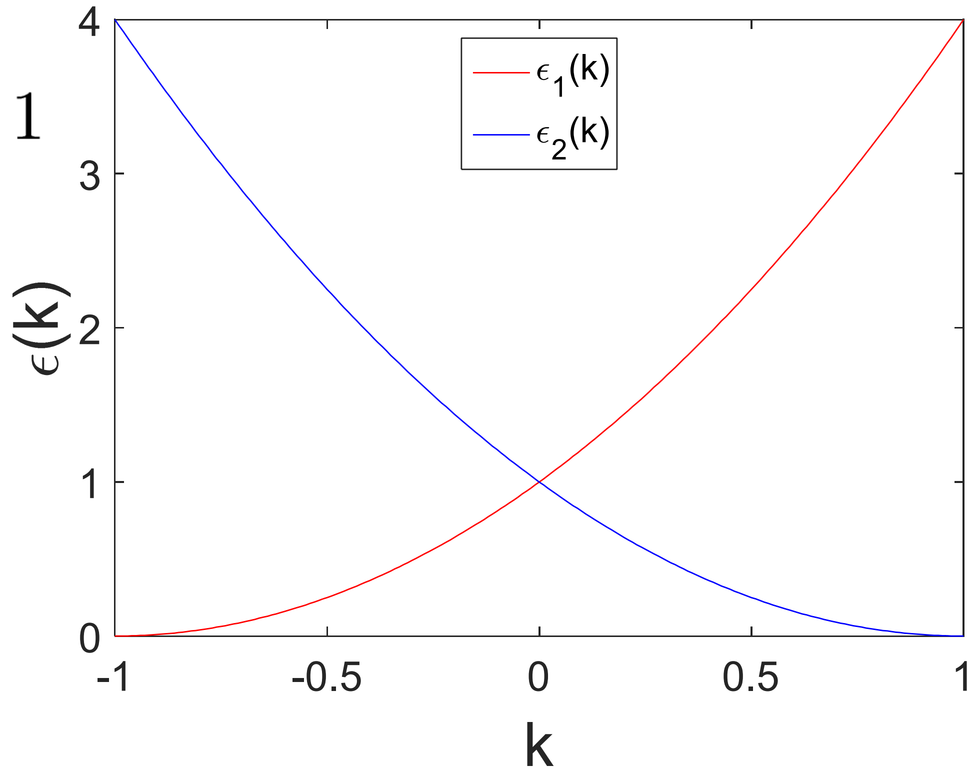
Sistema de dois níveis.

- Vamos considerar que existe um valor de k em que os estados $|\phi_1^{(0)}\rangle$ e $|\phi_2^{(0)}\rangle$ são degenerados. Por exemplo, se as energias forem funções de k na forma:

$$\begin{cases} \epsilon_1^{(0)}(k) = (k+1)^2 \\ \epsilon_2^{(0)}(k) = (k-1)^2 \end{cases}$$

teremos $\epsilon_1^{(0)}(k=0) = \epsilon_2^{(0)}(k=0) = 1$

$$H_0(k) = \begin{pmatrix} \epsilon_1^{(0)}(k) & 0 \\ 0 & \epsilon_2^{(0)}(k) \end{pmatrix}$$



Sistema de dois níveis.

- Vamos considerar agora um outro Hamiltoniano neste mesmo espaço de Hilbert, também escrito na base $\left\{|\phi_1^{(0)}\rangle, |\phi_2^{(0)}\rangle\right\}$

$$H(k) = \begin{pmatrix} \epsilon_1^{(0)}(k) & \Gamma \\ \Gamma & \epsilon_2^{(0)}(k) \end{pmatrix}$$

- Claramente os estados $|\phi_1^{(0)}\rangle \text{ e } |\phi_2^{(0)}\rangle$ não são auto-estados de H(k).

- Logo $\epsilon_1^{(0)}(k), \epsilon_2^{(0)}(k)$ não são auto-valores de H(k).

- No entanto, para cada valor de k, podemos diagonalizar o Hamiltoniano H(k) e obter os seus auto-valores $\epsilon_1(k), \epsilon_2(k)$.

Sist. 2 níveis – Tarefa 1 (fazer upload).

Cálculo do espectro de H(k).

- *Use o comando* function Mat = Hk(k,Gamma) ... *para escrever uma função de MatLab com dois parâmetros de entrada* (k e Γ) *e que retorne a matriz 2 x 2 :*

$$H(k) = \begin{pmatrix} \epsilon_1^{(0)}(k) & \Gamma \\ \Gamma & \epsilon_2^{(0)}(k) \end{pmatrix}$$

- *Salve a função em um arquivo à parte* "Hk.m".
- *No script* "SeuNome_Tarefa1.m" *, faça um loop com k variando de -1 a 1 e use o comando* eig(Hk) *para calcular os autovalores da matriz 2x2 H(k) (output da função acima) com* Γ=0,2 *para cada k* $\rightarrow \epsilon_1(k), \epsilon_2(k)$
- *Armazene o resultado e faça um gráfico de* $\epsilon_1^{(0)}(k), \epsilon_2^{(0)}(k), \epsilon_1(k) \text{ e } \epsilon_2(k)$

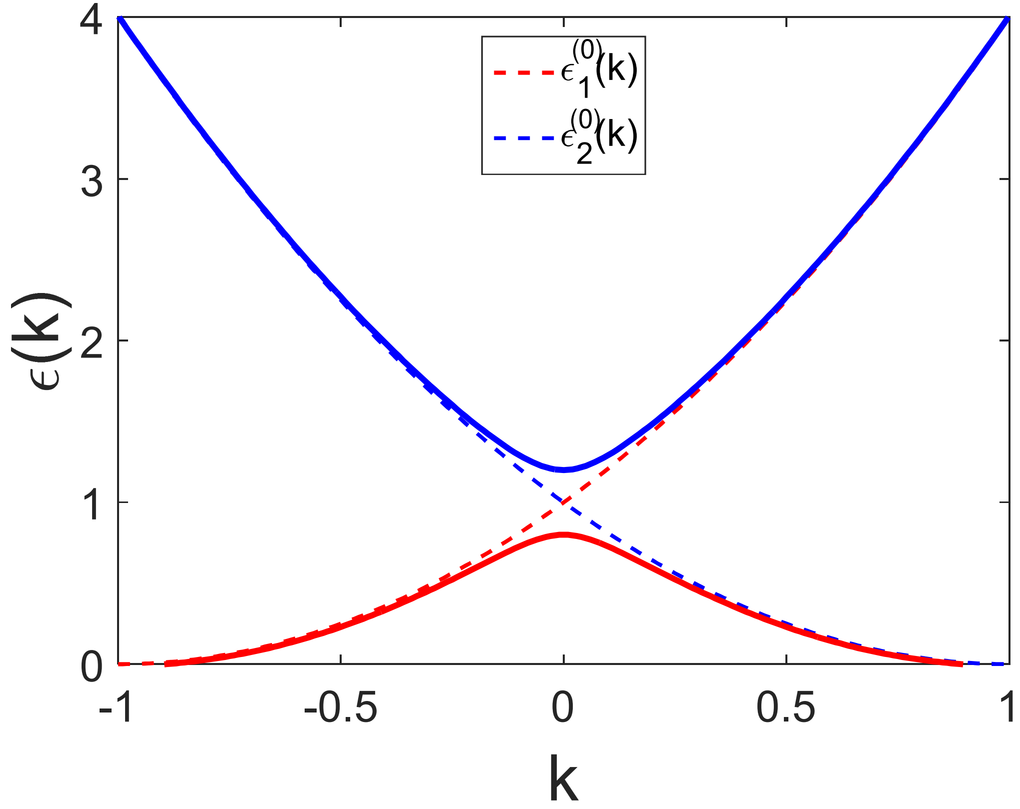
Responda (comentário no script):

- Como autovalores de H(k) se comparam com $\epsilon_1^{(0)}(k), \epsilon_2^{(0)}(k)$ nos limites

k ≈ ±1 e k≈0 ?

Dicas - Tarefa 1:

- Em Matlab, Mat=[a b; b c]; retorna um array 2x2 $\begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$
- Use linhas tracejadas para representar $\epsilon_1^{(0)}(k), \epsilon_2^{(0)}(k)$ e linhas contínuas para representar $\epsilon_1(k), \epsilon_2(k)$



Sistema de dois níveis: evolução temporal

- Consideremos agora um estado genérico escrito na mesma base $\left\{|\phi_1^{(0)}\rangle, |\phi_2^{(0)}\rangle\right\}$:

$$|\psi\rangle = C_1|\phi_1^{(0)}\rangle + C_2|\phi_2^{(0)}\rangle$$

onde C_1 e C_2 são constantes complexas.

- No instante t, C_1 e C_2 serão funções de t (que queremos encontrar).

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t)|\phi_1^{(0)}\rangle + C_2(t)|\phi_2^{(0)}\rangle \qquad \textbf{ou} \qquad |\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}$$

- Se o Hamiltoniano do sistema é H(k), podemos encontrar $C_1(t)$ e $C_2(t)$ resolvendo a Eq. de Schrödinger (escrita em uma forma "matricial/vetorial"):

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(k)|\psi(t)\rangle}$$

$$H(k) = \begin{pmatrix} \epsilon_1^{(0)}(k) & \Gamma \\ \Gamma & \epsilon_2^{(0)}(k) \end{pmatrix}$$

$$|\phi_1^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\phi_2^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Solução numérica: método de Euler.

- Aproximando (Euler): $$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle \approx \frac{|\psi(t+\Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t}$$

- Substituindo na Eq. de Schrödinger: $$|\psi(t+\Delta t)\rangle = \left(\mathbb{1} - \frac{iH(k)\Delta t}{\hbar}\right)|\psi(t)\rangle$$

- Em forma matricial, a evolução é dada multiplicando-se uma matriz por um vetor:

$$\begin{pmatrix} C_1(t+\Delta t) \\ C_2(t+\Delta t) \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{i\Delta t}{\hbar}\begin{pmatrix} \epsilon_1^{(0)}(k) & \Gamma \\ \Gamma & \epsilon_2^{(0)}(k) \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}$$

- Logo, dada a condição inicial $|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} C_1(0) \\ C_2(0) \end{pmatrix}$ podemos calcular $|\psi(t)\rangle$ para qualquer t!

- Nota: usando Euler, é preciso renormalizar o estado a cada passo:

$$|\bar{\psi}(t+\Delta t)\rangle = \frac{|\psi(t+\Delta t)\rangle}{|\langle\psi(t+\Delta t)|\psi(t+\Delta t)\rangle|}$$

Tarefa 2: Oscilações de Rabi

Evolução temporal de $|\psi(0)\rangle = |\phi_1^{(0)}\rangle$

- *Vamos considerar que o sistema está inicialmente em um auto-estado de $H_0(k)$ mas que esteja sob a ação de $H(k)$. Use* Γ=0,2 .

- *Usando a condição inicial $C_1(0)=1$, $C_2(0)=0$, calcule $C_1(t)$ e $C_2(t)$ entre $t_i=0$ e $t_F=20$ ($\hbar = 1$) usando o método de Euler com passo $\Delta t=0{,}01$ para k=-1, k=0 e k=+1.*

- *Faça gráficos de $|C_1(t)|^2$ e $|C_2(t)|^2$ (ambos no mesmo gráfico) para cada k.*
- *Armazene em um segundo script* "SeuNome_Tarefa2.m"

Responda (comentário no script):

- Qual o comportamento de $|C_1(t)|^2$ e $|C_2(t)|^2$ para $k = \pm 1$? Isso é esperado?
- No caso k=0, o que ocorre com o período de oscilação se Γ:
  - dobrar (Γ=0,4) ?
  - cair pela metade (Γ=0,1)?

Dicas – Tarefa 2.

1- Use a function Mat = Hk(k,Gamma) ... em Hk.m para gerar a matriz H(k).

2- A matriz identidade 2 x 2 pode ser gerada com o comando eye(2).

3- Norma de um vetor: vec=[1 1]; norm(vec); (retorna 1.4142).

4- Número imaginário puro: 1i . Módulo quadrado de z: $|z|^2 \rightarrow$ (abs(z))^2