

Electromagnetism Qualifying Exam

Prof. Edgar J. Patiño

The exam consists of a total of 4 questions. In each one you'll find its grade giving a total of 10 points.

1. (2 POINTS) A current I flows down a long straight wire of radius a . If the wire is made of linear material such as copper with magnetic susceptibility X_m (i.e. $\mathbf{M} = X_m \mathbf{H}$) and the current is distributed uniformly.

What is the magnetization at a distance s from the axis for: a) $s < a$ and b) $s > a$. c) Find the bound currents? d) Represent \mathbf{M} and bound currents in a drawing.

2. (2 POINTS) A very long cylinder, of radius R , carries a uniform polarization \mathbf{P} perpendicular to its axis (Careful: uniform, not radial) Find the electric field inside the cylinder. Show that the field outside the cylinder can be expressed in the form

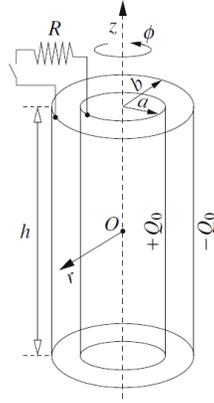
$$\mathbf{E} = \frac{R^2}{2\epsilon_0 r^2} [2(\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{P}]$$

3. (3 POINTS) DISCHARGE OF A CYLINDRICAL CAPACITOR

A cylindrical capacitor has internal radius a , external radius $b > a$, and height $h \gg b$.

For $t < 0$, the two cylindrical plates have charges $\pm Q_0$, respectively, and are disconnected. At $t = 0$ the plates are connected through a resistor R as in Figure below. We assume that during the discharge i) the slowly varying current approximation holds, ii) the surface charge density on the plates remains uniform, iii) we can neglect the effects of the external circuit and the resistance of the plates, iv) other boundary effects are negligible. We use a cylindrical coordinate system (r, ϕ, z) with the capacitor axis as z axis, and the origin at the center of the capacitor.

a) Calculate the current $I = I(z, t)$ flowing on the plates, the magnetic field $\mathbf{B} = \hat{\phi} B_\phi(r, z, t)$ and the Poynting vector \mathbf{S} for $|z| \ll (h/2)$ inside the capacitor.



4. (3 POINTS) MAGNETIC BIREFRINGENCE

An EM plane wave of frequency ω travels in a medium in the presence of a static uniform magnetic field $\mathbf{B}_0 = B_0 \hat{\mathbf{z}}$, where $\hat{\mathbf{z}}$ is the z unit vector of a Cartesian reference frame. B_0 is much stronger than the magnetic field of the wave. The direction of the wave propagation is also parallel to $\hat{\mathbf{z}}$. The medium contains n_e bound electrons per unit volume, obeying the classical equations of motion

$$m_e \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) - m_e \omega_0^2 \mathbf{r}, \quad \mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}.$$

where m_e and e are the electron mass and charge, respectively.

a. Show that the propagation of the wave depends on its polarization (Birefringence) by evaluating the refractive index for *circular* polarization, either left-handed or right-handed. Start by expressing the electric field of a circularly polarized EM light in complex notation:

$$\mathbf{E}_{\pm} = E(\hat{\mathbf{x}} \pm i\hat{\mathbf{y}}) e^{ikz - i\omega t},$$

The effect of the magnetic field of the wave (much smaller than the external field B_0) may be neglected. Look for solutions of the equation of motion for electrons of the form:

$$\mathbf{r}_{\pm} = r_{\pm}(\hat{\mathbf{x}} \pm i\hat{\mathbf{y}}) e^{ikz - i\omega t}, \quad \mathbf{v}_{\pm} = v_{\pm}(\hat{\mathbf{x}} \pm i\hat{\mathbf{y}}) e^{ikz - i\omega t},$$

With $v_{\pm} = -i\omega r_{\pm}$.

HINT: Recall that the electric polarization, may be expressed in terms of electric susceptibility X_e or dielectric constant ϵ (i.e. $\mathbf{P} = X_e \mathbf{E} = (\epsilon - 1/4\pi) \mathbf{E}$). Where the index of refraction $n = \sqrt{\epsilon}$.

①



$$\vec{M} = \chi_m \vec{H}$$



$$\oint \vec{H} \cdot d\vec{\ell} = H(2\pi s) = I_{enc}$$

$$s < a$$

$$I = \frac{I}{A} = \frac{I}{\pi a^2}$$

$$H(2\pi s) = I \pi s^2$$

$$H(2\pi s) = \frac{I}{\pi a^2} \pi s^2$$

$$H = \frac{I s}{a^2 2\pi}$$

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H} = \chi_m \frac{I s}{a^2 2\pi}$$

$$s > a$$

$$H 2\pi s = I_{enc}$$

$$H 2\pi s = I$$

$$H = \frac{I}{2\pi s}$$

$$s = a$$

$$H = \frac{I}{2\pi a}$$

$$J_b = \chi_m J_f$$

$$J_f = \frac{I}{\pi a^2}$$

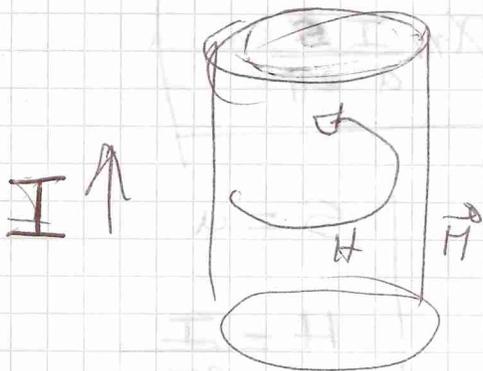
$$\rightarrow \boxed{J_b = \chi_m \frac{I}{\pi a^2}} \quad (\text{misma dirección que } I)$$

$$\vec{K}_b = \vec{H} \times \vec{n} = \chi_m \vec{H} \times \vec{n} \quad (\text{En dirección opuesta a } I)$$

$$= \chi_m \frac{I}{a^2 2\pi}$$

$$\boxed{\vec{K}_b = \chi_m \frac{I}{2\pi a}}$$

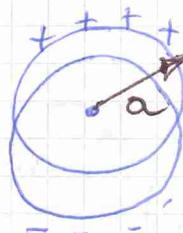
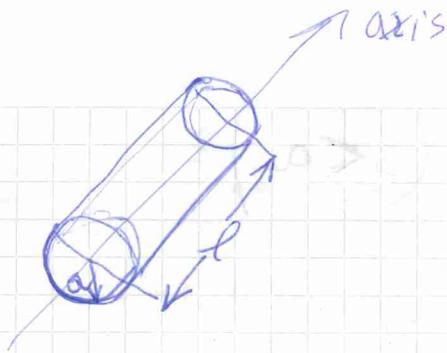
$$I_b = J_b (\pi a^2) + K_b (2\pi a) = 0$$



$$I_b = \left(\chi_m \frac{I}{\pi a^2} \right) (\pi a^2) + \left(- \chi_m \frac{I}{2\pi a} \right) 2\pi a = 0$$

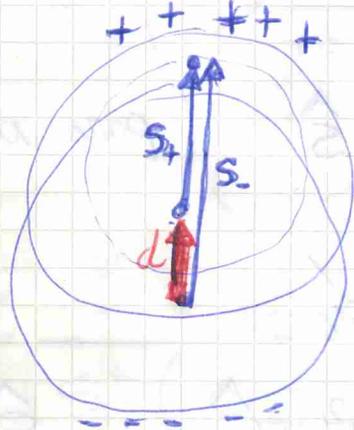
↑
050

(2)



$$\pm \rho$$

Dentro del cilindro a una distancia s del eje



Dentro de uno de los cilindros

$$\frac{2\pi r l}{\epsilon_0} E = \frac{\rho \pi s^2 l}{\epsilon_0}$$

$$\Rightarrow \vec{E} = \frac{\rho s}{2\epsilon_0} \vec{s}$$

$$\Rightarrow \vec{E} = \vec{E}_+ + \vec{E}_- = \frac{\rho}{2\epsilon_0} (\vec{s}_+ - \vec{s}_-)$$

$$\vec{s}_+ - \vec{s}_- = -\vec{d}$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{E} = -\frac{\rho}{2\epsilon_0} \vec{d}}$$

$$\vec{P} \pi d^2 l = q \vec{d} = \rho \pi d^2 l \vec{d}$$

$$\boxed{\vec{P} = \rho \vec{d}}$$

$$\boxed{\vec{E} = -\frac{\vec{P}}{2\epsilon_0}} \quad (s < a)$$

Afuera ($s > a$)

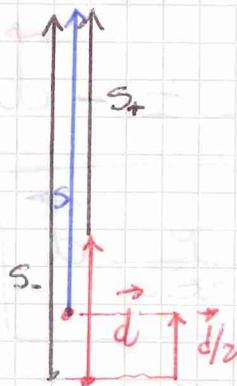
$$E \cdot 2\pi s \ell = \frac{\rho \pi a^2 \ell}{\epsilon_0}$$

$$\rightarrow \vec{E} = \frac{\rho a^2}{2\epsilon_0 s} \hat{s} \quad (\text{para un cilindro})$$

Para la combinación

$$\vec{E} = \vec{E}_+ + \vec{E}_- = \frac{\rho a^2}{2\epsilon_0 s^+} \hat{s}_+ - \frac{\hat{s}_-}{s_-}$$

$$\boxed{s_{\pm} = s_{\mp} \pm \frac{d}{2}}$$



$$s_{\pm}^2 = \left(s_{\mp} \pm \frac{d}{2}\right)^2 = \left(s_{\mp}^2 \pm 2s_{\mp} \frac{d}{2} + \frac{d^2}{4}\right)$$

$$\frac{\vec{S}_+}{S_+^2} = \frac{\vec{S} + \frac{\vec{d}}{2}}{\left(\frac{S^2 + d^2}{4} + \vec{S} \cdot \vec{d} \right)}$$

$$\approx \frac{\vec{S} + \frac{\vec{d}}{2}}{S^2 \left(1 + \frac{d^2}{4S^2} + \frac{\vec{S} \cdot \vec{d}}{S^2} \right)}$$

$(S \gg d)$

$$\approx \frac{\vec{S} + \frac{\vec{d}}{2} \left(1 + \frac{\vec{S} \cdot \vec{d}}{S^2} \right)}{S^2 \left(1 + \frac{\vec{S} \cdot \vec{d}}{S^2} \right) \left(1 + \frac{\vec{S} \cdot \vec{d}}{S^2} \right)}$$

$$\approx \frac{\left(\vec{S} + \frac{\vec{d}}{2} \right) \left(1 + \frac{\vec{S} \cdot \vec{d}}{S^2} \right)}{S^2 \left(1 + \frac{|\vec{S} \cdot \vec{d}|^2}{S^4} \right)}$$

$(S \gg d)$

$$\approx \frac{1}{S^2} \left(\vec{S} + \frac{\vec{d}}{2} \right) \left(1 + \frac{\vec{S} \cdot \vec{d}}{S^2} \right)$$

$$\frac{\vec{S}_+}{S_+^2} \approx \frac{1}{S^2} \left(\vec{S} + \vec{S} \frac{(\vec{S} \cdot \vec{d})}{S^2} + \frac{\vec{d}}{2} - \frac{\vec{d}}{2} \frac{(\vec{S} \cdot \vec{d})}{S^2} \right)$$



$$\frac{\vec{S}_+}{S_+^2} = \frac{1}{S^2} \left(\vec{S} + \vec{S} \frac{(\vec{S} \cdot \vec{d})}{S^2} + \frac{\vec{d}}{2} \right)$$

$$\vec{\Pi} = -\frac{\rho a^2}{2\epsilon_0} \left(\frac{\hat{S}_+}{S_+} - \frac{\hat{S}_-}{S_-} \right)$$

$$\vec{\Pi} = -\frac{\rho a^2}{2\epsilon_0} \left(\frac{\hat{S}_+ \hat{S}_+}{S_+^2} - \frac{\hat{S}_- \hat{S}_-}{S_-^2} \right)$$

$$\vec{\Pi} = -\frac{\rho a^2}{2\epsilon_0} \left[\frac{1}{S^2} \left\{ \vec{S} + \frac{\vec{S}(\vec{S} \cdot \vec{d})}{S^2} - \frac{\vec{d}}{2} \right\} - \left(\vec{S} - \frac{\vec{S}(\vec{S} \cdot \vec{d})}{S^2} + \frac{\vec{d}}{2} \right) \right]$$

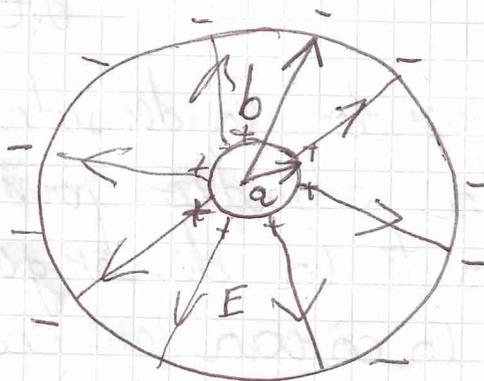
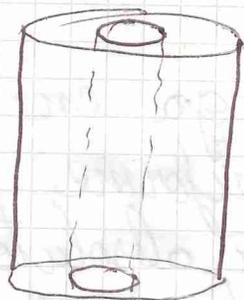
$$= -\frac{\rho a^2}{2\epsilon_0} \left[\frac{1}{S^2} \left\{ \cancel{\vec{S}} + \frac{\vec{S}(\vec{S} \cdot \vec{d})}{S^2} - \frac{\vec{d}}{2} \right\} - \left[\cancel{\vec{S}} + \frac{\vec{S}(\vec{S} \cdot \vec{d})}{S^2} - \frac{\vec{d}}{2} \right] \right]$$

$$= -\frac{\rho a^2}{2\epsilon_0 S^2} \left[2 \frac{\vec{S}(\vec{S} \cdot \vec{d})}{S^2} - \vec{d} \right] \quad \checkmark$$

$$\vec{P} = \rho \vec{d}$$

$$\vec{\Pi} = -\frac{a^2}{2\epsilon_0 S^2} \left[\frac{2 \vec{S}(\vec{S} \cdot \vec{P})}{S^2} - \vec{P} \right]$$

* (3) Discharge of Cylindrical Capacitor



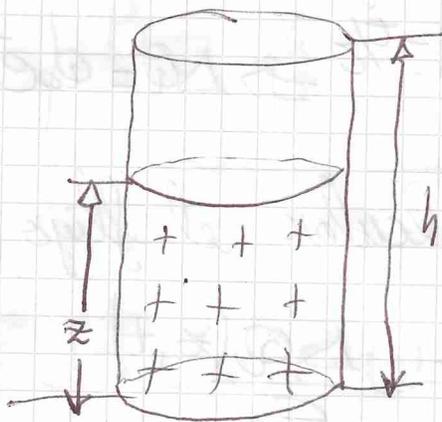
a) $I(z,t) = ?$

$$\mathbf{B} = \hat{\phi} B_{\phi}(r, z, t)$$

Para calcular la corriente aplicamos la ley de Ampere

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 (I_c + I_D)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \mathbf{J}_f + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$



Aplicando una superficie cilíndrica por la que atraviesan las líneas de campo donde $I_c = 0$

$$\int \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 I_D$$

donde $\mathbf{I}_D = \epsilon_0 \frac{d\Phi_E}{dt}$

Assumiendo la densidad de carga en cada cilindro permanece uniforme durante la descarga, el valor absoluto de la carga en cada cilindro, desde el fondo ($z=0$) y cualquier altura $z < h$ esta dado por

$$\Delta Q(z, t) = Q(t) \left(\frac{z}{h} \right)$$

↑ dependencia temporal de la carga en función del tiempo

$$Q(t) = Q_0 e^{-t/\tau} \Rightarrow \Delta Q = Q_0 e^{-t/\tau} \left(\frac{z}{h} \right)$$

Esto nos permite calcular el flujo eléctrico

$$\Phi_E = \int \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{\Delta Q(z, t)}{\epsilon_0}$$

$$\Phi_E = \frac{Q_0 e^{-t/\tau}}{\epsilon_0} \frac{z}{h}$$

$$\Phi_E = \frac{\sigma(2\pi a) z}{\epsilon_0} = \frac{Q(t)}{2\pi a h} \frac{2\pi a z}{\epsilon_0}$$

$$\boxed{\Phi_E = \frac{Q_0 e^{-t/\tau}}{\epsilon_0} \frac{z}{h}}$$

$$\frac{d\Phi_E}{dt} = \frac{Q_0}{\epsilon_0} \frac{z}{h} \left(-\frac{1}{\tau}\right) e^{-t/\tau}$$

$$I_D = \frac{Q_0}{\epsilon_0} \frac{z}{h} \left(-\frac{1}{\tau}\right) e^{-t/\tau}$$

$$|I_D| = \frac{Q_0}{\epsilon_0} e^{-t/\tau} \left(\frac{z}{h}\right) \quad \checkmark$$

$$\rightarrow \oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 I_D$$

$$B \cdot 2\pi r = \mu_0 \frac{Q_0}{\epsilon_0} e^{-t/\tau} \left(\frac{z}{h}\right)$$

$$\vec{B} = \frac{\mu_0 Q_0}{2\pi \epsilon_0 r} e^{-t/\tau} \left(\frac{z}{h}\right) \hat{\phi} \quad \checkmark$$

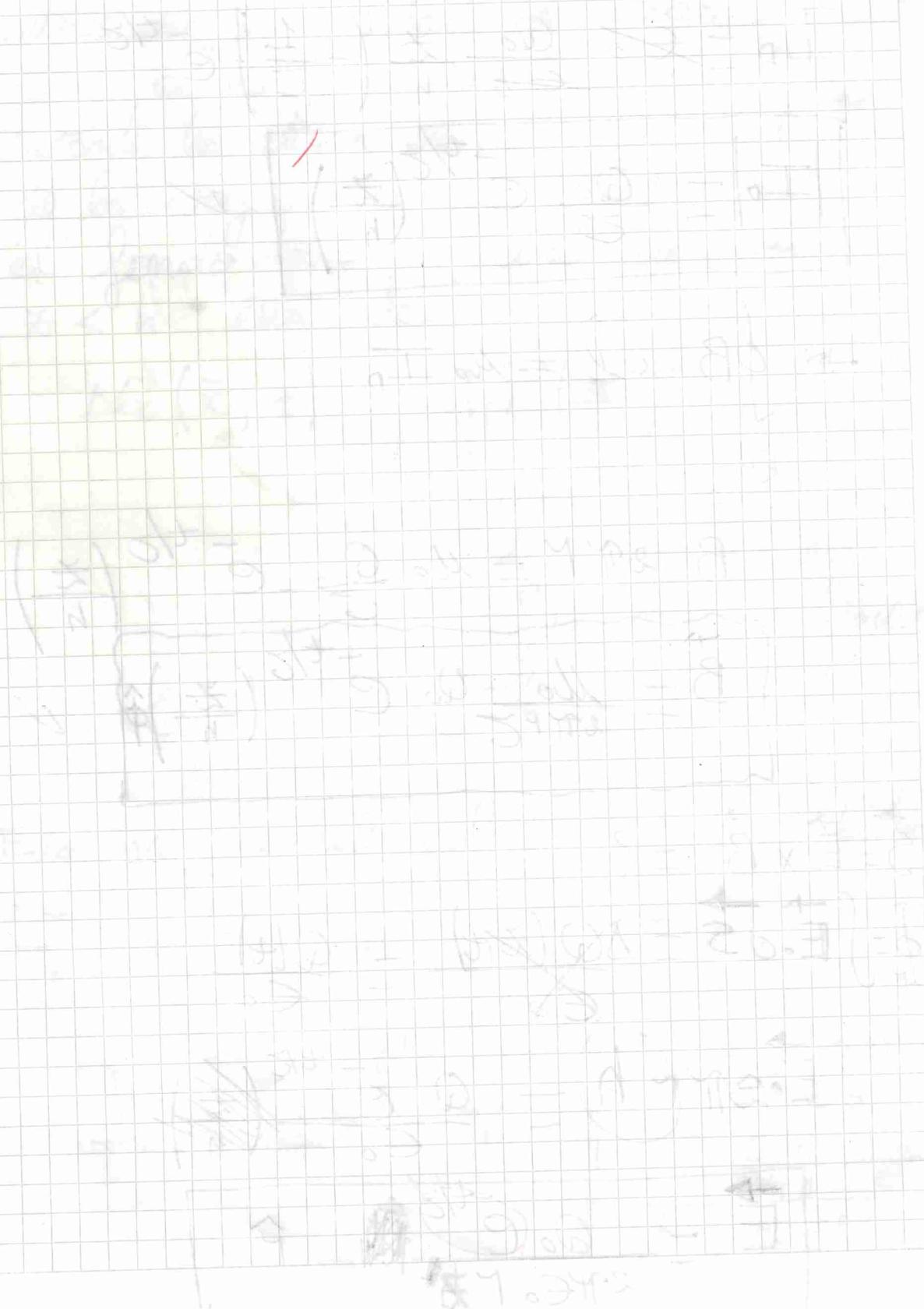
$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{B} = ?$$

$$\Phi_E = \int \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{Q(t)}{\epsilon_0}$$

$$\epsilon_0 \cdot 2\pi r z = \frac{Q_0 e^{-t/\tau}}{\epsilon_0}$$

$$\vec{E} = \frac{Q_0 e^{-t/\tau}}{2\pi \epsilon_0 r z} \hat{r}$$

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^2 \epsilon_0} \frac{Q_0^2}{r^2} \left(\frac{z}{r} \right) \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \mu_0$$

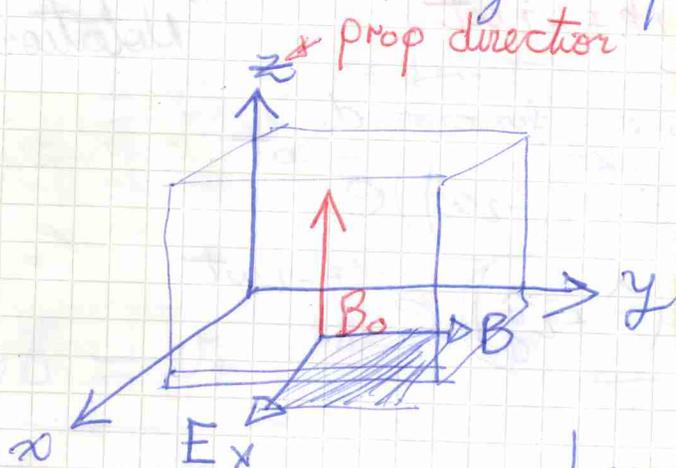


Examen de Conocimientos 2019 II

④ Magnetic Birefringence and Faraday Effect

EM Plane wave. $\rightarrow \omega$

$\vec{B}_0 = B_0 \hat{z}$ (uniform applied magnetic field)



Lorentz force

$$\textcircled{1} \quad m_e \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -e \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) - m_e \omega_0^2 \vec{r}$$

$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$

ω_0 (circled) \downarrow a_r

$$a = \frac{v^2}{r} = \frac{\omega_0^2 r}{r} \leftarrow \text{explain } \omega_0 \text{ term.}$$

a) Find refractive index

$$\vec{E}_{\pm} = E (\hat{x} \pm i\hat{y}) e^{ikz - i\omega t}$$

Electric field of circularly polarized EM Wave (Complex Notation)

We look for solutions of the form

$$\vec{r}_{\pm} = r_{\pm} (\hat{x} \pm i\hat{y}) e^{ikz - i\omega t}$$

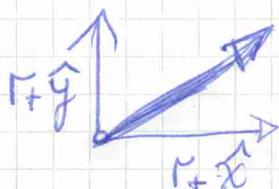
$$\begin{aligned} \vec{v}_{\pm} &= r_{\pm} (\hat{x} \pm i\hat{y}) e^{ikz} (-i\omega) e^{-i\omega t} \\ &= -i\omega r_{\pm} (\hat{x} \pm i\hat{y}) e^{ikz - i\omega t} \end{aligned}$$

\vec{v}_{\pm}

$$\vec{v}_{\pm} = v_{\pm} (\hat{x} \pm i\hat{y}) e^{ikz - i\omega t}$$

$$\vec{v}_{\pm} \times \vec{B}_0 = v_{\pm} (\hat{x} \pm i\hat{y}) \times B_0 \hat{z}$$

$$\vec{r}_{\pm} = (r_{\pm} \hat{x} + r_{\pm} i\hat{y}) e^{ikz - i\omega t}$$



$$\text{From: } \left(m_e \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -e \vec{E} - e \vec{v} \times \vec{B}_0 - m_e \omega_0^2 \vec{r} \right) \odot$$

$$\vec{v} \times \vec{B} = ?$$

$$\vec{v} \times \vec{B} = v_{\pm} (\hat{x} + iy) e^{ikz - i\omega t} \times B_0 \hat{z}$$

$$\text{donde } v_{\pm} = -i\omega r_{\pm}$$

$$\vec{v} \times \vec{B} = v_{\pm} e^{ikz - i\omega t} B_0 \left[(\hat{x} \pm iy) \times \hat{z} \right]$$

$$= v_{\pm} e^{ikz - i\omega t} B_0 \left[(\hat{x} \times \hat{z}) \pm (iy \times \hat{z}) \right]$$

$$= v_{\pm} e^{ikz - i\omega t} B_0 \left[-\hat{y} \pm i\hat{x} \right]$$

$$i \left[\hat{x} - \frac{\hat{y}}{i} \right]$$

$$\vec{v} \times \vec{B} = v_{\pm} e^{ikz - i\omega t} B_0 i \left[\hat{x} \pm iy \right]$$

$$\textcircled{1} \quad \vec{v} \times \vec{B} = +i\omega r_{\pm} e^{ikz - i\omega t} B_0 \left[\hat{x} \pm iy \right]$$

$$\textcircled{2} \quad \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = r_{\pm} (\hat{x} \pm iy) (-i\omega)^2 e^{ikz - i\omega t}$$

$$\textcircled{3} \quad \vec{E} = E (\hat{x} \pm iy) e^{ikz - i\omega t}$$

$$\textcircled{\odot} \Rightarrow m_e r_{\pm} (\hat{x} \pm iy) (-i\omega)^2 e^{ikz - i\omega t} = -e E (\hat{x} \pm iy) e^{ikz - i\omega t}$$

$$- \frac{e \omega r_{\pm}}{c} e^{ikz - i\omega t} B_0 \left[\hat{x} \pm iy \right] - m_e \omega_0^2 r_{\pm}$$

$$+ m_e r_{\pm} \omega^2 = -e E - \frac{e \omega r_{\pm} B_0}{c} - m_e \omega_0^2 r_{\pm}$$

$$m_e \dot{r}_{\pm} \omega^2 = -eE - \frac{e\omega}{c} r_{\pm} B_0 - m_e \omega_0^2 r_{\pm}$$

$$\cancel{r_{\pm} \omega^2} = -\frac{eE}{m_e} - \frac{e\omega}{m_e c} r_{\pm} B_0 - \cancel{\omega_0^2 r_{\pm}}$$

$$(\omega_0^2 + \omega^2) r_{\pm} = -\frac{e}{m_e} E - \frac{e\omega B_0}{i m_e c} r_{\pm}$$

$$v_{\pm} = -i\omega r_{\pm}$$

$$(\omega_0^2 + \omega^2) r_{\pm} = -\frac{e}{m_e} E + \frac{i e \omega v_{\pm} B_0}{m_e c}$$

$$\text{So } \omega_c = \frac{e B_0}{m_e c}$$

↑ cyclotron frequency

$$(\omega_0^2 - \omega^2) r_{\pm} = -\frac{eE}{m_e} \mp i\omega_c (-i\omega r_{\pm})$$

$$(\omega_0^2 - \omega^2) r_{\pm} = -\frac{eE}{m_e} \mp \omega \omega_c r_{\pm}$$

$$(\omega_0^2 - \omega^2 \pm \omega \omega_c) r_{\pm} = -\frac{eE}{m_e}$$

$$r_{\pm} = \frac{eE}{m_e (\omega_0^2 - \omega^2 \pm \omega \omega_c)}$$

Ph. D. Qualifiers Exam, Mechanics (2020-I)
Total marks 100

I(20 marks)

In the atmosphere vapour condensates on a dust particle falling on earth. The condensation will be more efficient, the bigger the surface, assumed here to be a sphere. Hence, the rate $\lambda(t) \equiv dm(t)/dt = \alpha 4\pi r^2$, where α is a constant and $m(t)$ the mass of the particle. Assume that the mass and the volume $V(t)$ grow in such a way that the density ρ_0 is constant.

- (i) Calculate $m(t)$ in terms of ρ_0 and m_0 , where m_0 is the initial mass of the dust particle.
- (ii) Calculate the velocity $v(t)$ with $v_0 = v(0) = 0$.
- (iii) Calculate the position $x(t)$ with $x_0 = x(0)$.

II(20 marks)

Given is a central force $\vec{F}(r) = f(r)\hat{r}$ such that the effective potential has an extremum (minimum or maximum) at r_0 .

- (i) Write down the differential equation for the variable r . Start with the second law of Newton, use the fact that the radial component of the acceleration is

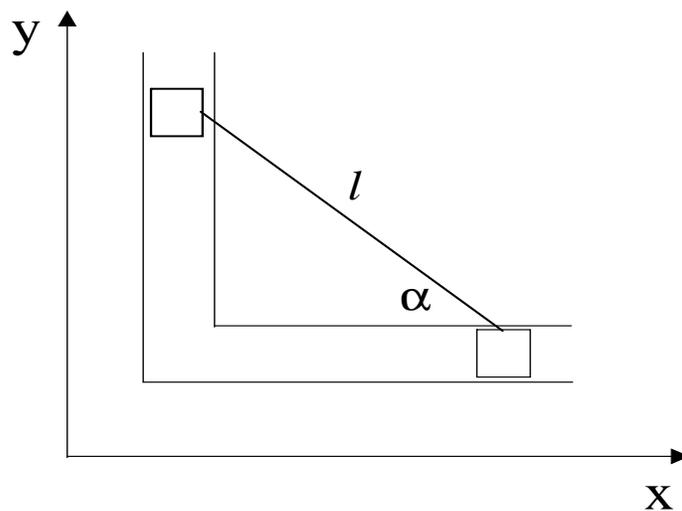
$$a_r = \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 - r\dot{\phi}^2 \sin^2(\theta)$$

Choose appropriately θ and recall that $r\dot{\phi}^2 = \frac{L^2}{m^2 r^3}$.

- (ii) Let $g(r) \equiv -f(r)/m$ where m is the mass of the test particle which moves on a circle with disturbances, i.e., $r = r_0 + x$ with $x/r_0 \ll 1$. Derive the equation of motion for $x(t)$. You can expand $g(r)$ around r_0 .
- (iii) Solve the equation for $x(t)$ depending on the minimum or maximum.

III(30 marks)

Two blocks of equal mass m that are connected by a rigid bar of length l and negligible mass move without friction along a given path given in the figure, i.e., one mass moves along the y -axis and the other one along the x -axis. The gravitational attraction of the earth acts along the negative y -axis. The generalized coordinate is α .



- (i) Find the Lagrangian L in terms of the generalized coordinate.
- (ii) Find the equation of motion and the general solution in the form $t-t_0 = f(\alpha)$, where $f(\alpha)$ is an integral. Hint: The integrating factor is $\dot{\alpha}$.

IV(30 marks)

Given is the classical Hamiltonian

$$H_{cl} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi$$

where \vec{A} and ϕ are the electromagnetic potentials from which one derives the electric and magnetic fields via $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - (1/c)\partial\vec{A}/\partial t$ and $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Using the Hamilton equations, derive the equation of motion for $\vec{r}(t)$ in terms of the electric and magnetic fields.

Solutions

(1.)

$$I. a.) M = \rho_0 \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right) \Rightarrow r = \left(\frac{3M}{4\pi\rho_0} \right)^{1/3}$$

$$\text{By assumption: } \frac{dM}{dt} = \alpha 4\pi r^2$$

$$\Rightarrow \frac{dM}{dt} = \alpha 4\pi \left(\frac{3M}{4\pi\rho_0} \right)^{2/3} =$$

$$= \alpha (36\pi)^{1/3} \left(\frac{M}{\rho_0} \right)^{2/3}$$

integrate:

$$\int_{M_0}^M \frac{dM}{M^{2/3}} = \int_0^t \alpha \left(\frac{36\pi}{\rho_0^2} \right)^{1/3} dt'$$

$$\Rightarrow M^{1/3}(t) = \alpha \left(\frac{36\pi}{27\rho_0^2} \right)^{1/3} t + M_0^{1/3}$$

$$\text{Let } \mu = \alpha \left(\frac{36\pi}{27\rho_0^2} \right)^{1/3} \text{ and } \beta = \left(\frac{M_0}{\mu} \right)^{1/3}$$

$$\Rightarrow \boxed{M(t) = \mu (t + \beta)^3}$$

$$b.) \quad \frac{dp}{dt} = \frac{d(muv)}{dt} = mg$$

$$\Rightarrow \quad m(t) \cdot v(t) = g \int_0^t m(t') dt'$$

$$= \frac{g}{4} \mu [(t+\beta) - \beta]$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{v(t) = \frac{g}{4} (t+\beta) - \frac{g\beta}{4}}$$

$$c.) \quad x(t) = \int v(t) dt$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{x(t) = x_0 + \frac{g}{2} \left[\frac{1}{4} (t+\beta)^2 - \frac{1}{4} \beta^2 + \frac{\beta^4}{4(t+\beta)^2} - \frac{\beta^4}{4} \right]}$$

(3)

II. a.) $m \ddot{\vec{r}} = m \vec{a} = f(r) \hat{r}$

$\Rightarrow m a_r = f(r) \quad ; \quad \text{choose } \theta = \frac{\pi}{2}$

$\Rightarrow a_r = \ddot{r} - r \dot{\varphi}^2 = \ddot{r} - \frac{L^2}{m^2 r^3}$

$\Rightarrow \left(m \left(\ddot{r} - \frac{L^2}{m^2 r^3} \right) = f(r) \right)$

b.) $g = -\frac{f(r)}{m} \Rightarrow -g(r) = \ddot{r} - \frac{L^2}{m^2 r^3}$

putting $r = r_0 + x$ with $r_0 = \text{const}$

we get $\ddot{r} = \ddot{x}$

$\Rightarrow -g(r) = \ddot{x} - \frac{L^2}{m^2 (r_0 + x)^3} \approx \ddot{x} - \frac{L^2}{m^2 r_0^3 \left(1 + \frac{x}{r_0}\right)^3}$

$\approx \ddot{x} - \frac{L^2}{m^2 r_0^3} \left(1 - 3 \frac{x}{r_0}\right)$

$\Rightarrow -\left(g(r_0) - x g'(r_0)\right) \approx \ddot{x} - \frac{L^2}{m^2 r_0^3} + \frac{3L^2 x}{m^2 r_0^4}$

With

4.

$$V_{\text{eff}} = V + \frac{L^2}{2mr^2}, \quad V = -\int f(r) dr$$

$$\text{and } V'_{\text{eff}}(r_0) = 0 = -f(r_0) - \frac{L^2}{mr_0^3}$$

$$\Rightarrow g(r_0) = \frac{L^2}{m^2 r_0^3}$$

$$\Rightarrow \left[\begin{array}{l} \ddot{x} + kx = 0 \\ k = \frac{3g(r_0)}{r_0} + g'(r_0) \end{array} \right]$$

$$c.) \quad V''_{\text{eff}}(r_0) = -f'(r_0) + 3 \frac{L^2}{mr_0^4}$$

$$= m g'(r_0) + 3 \frac{L^2}{m r_0^4} \quad \left\{ \begin{array}{l} > 0 \Rightarrow \text{min} \\ < 0 \Rightarrow \text{max} \end{array} \right.$$

$$= m \left(g'(r_0) + 3 \frac{L^2}{m^2 r_0^3} \frac{1}{r_0} \right)$$

$$= m k$$

$$\Rightarrow k > 0 \text{ (min)} : \ddot{x} = -kx$$

$$x(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t, \quad \omega^2 = k \quad (\text{stable})$$

$$k < 0 \quad (\text{max})$$

$$\ddot{x} = |k| x, \quad x(t) = A e^{\omega t} + B e^{-\omega t}$$

$$\omega = |k|$$

instabil

III. (i)

$$x = l \cos \alpha, \quad y = l \sin \alpha$$

$$L = T - V, \quad T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2)$$

$$= \frac{1}{2} m l^2 \dot{\alpha}^2$$

$$\dot{x} = -l \sin \alpha \cdot \dot{\alpha}$$

$$\dot{y} = l \cos \alpha \cdot \dot{\alpha}$$

$$V = mgy = mgl \sin \alpha$$

$$\Rightarrow \boxed{L = \frac{1}{2} m l^2 \dot{\alpha}^2 - mgl \sin \alpha}$$

(ii)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\alpha}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \alpha} =$$

$$= \frac{d}{dt} \left(m l^2 \dot{\alpha} \right) + m g l \cos \alpha = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\ddot{\alpha} + \frac{g}{l} \cos \alpha = 0} \quad | \cdot \alpha$$

$$\dot{\alpha} \ddot{\alpha} + \frac{g}{l} \dot{\alpha} \cos \alpha = 0$$

integrate

$$\Rightarrow \frac{1}{2} \dot{\alpha}^2 + \frac{g}{2} \sin \alpha = \text{const} = C$$

$$\Rightarrow \dot{\alpha} = \pm \sqrt{2 \left(C - \frac{g}{2} \sin \alpha \right)}$$

$$\Rightarrow dt = \pm \frac{d\alpha}{\sqrt{2 \left(C - \frac{g}{2} \sin \alpha \right)}}$$

$$\Rightarrow \boxed{t - t_0 = \int_{\alpha_0}^{\alpha} \frac{d\alpha}{\pm \sqrt{2 \left(C - \frac{g}{2} \sin \alpha \right)}}$$

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi$$

Hamilton eqs: $\frac{dP_i}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial q_i}$

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P_i}$$

$q_i = x_i$ here

$$\Rightarrow \frac{dP_x}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial x} = -e \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

$$+ \frac{e}{mc} \left[(P_x - \frac{e}{c} A_x) \frac{\partial A_x}{\partial x} \right]$$

$$+ (P_y - \frac{e}{c} A_y) \frac{\partial A_y}{\partial x} - (P_z - \frac{e}{c} A_z) \frac{\partial A_z}{\partial x}$$

etc; similar for $\frac{dP_y}{dt}$ etc.

From $\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P_x}$ etc \Rightarrow

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} \left(P_x - \frac{e}{c} A_x \right), \quad \frac{dy}{dt} = \frac{1}{m} \left(P_y - \frac{e}{c} A_y \right)$$

etc

differentiate these eqs:

$$\frac{dp_x}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{e}{c} \frac{dA_x}{dt} \text{ etc.}$$

$$\vec{A} = \vec{A}(\vec{r}(t), t), \quad \phi = \phi(\vec{r}(t), t)$$

$$\frac{dA_x}{dt} = \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial x} \frac{dx}{dt}$$

$$+ \frac{\partial A_x}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \frac{dz}{dt}$$

and for $\frac{dp_x}{dt}$ we can use the other

Hamilton eqs. \Rightarrow

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{e}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t}$$

$$-e \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{e}{c} \left[\frac{\partial x}{\partial t} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \right]$$

$$+ \frac{dt}{dt} \left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \Big]$$

9

$$= eE_x + \frac{e}{c} (v_x B_z - v_z B_y)$$

$$= eE_x + \frac{e}{c} (\vec{v} \times \vec{B})_x$$

For $\frac{dy}{dt^2}$ and $\frac{dz}{dt^2}$ the calc. is similar

and we get

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = e \vec{E} + \frac{e}{c} (\vec{v} \times \vec{B})$$

Universidad de los Andes-Dpto. de Física
Mecánica Cuántica - Enero/2020

Examen de Conocimientos - Doctorado

1. **Nota=1/5** Considere una partícula de masa m confinada en un pozo de potencial infinito que se extiende desde $x = -\frac{a}{2}$ hasta $x = \frac{a}{2}$. En este caso las condiciones que se deben exigir a las funciones de onda estacionarias son: (i) Anularse para $x \leq -\frac{a}{2}$ y para $x \geq \frac{a}{2}$ y (ii) estar normalizada.

(a) Encuentre los valores propios de la energía, E_n .

(b) Exprese las funciones de onda estacionarias debidamente normalizadas, $\langle x|\phi_n\rangle = \phi_n(x)$. Discuta las propiedades de simetría de estas funciones con respecto a la inversión $x \rightarrow -x$.

Suponer que el estado de la partícula a $t = 0$ es una superposición de los 4 estados estacionarios de más baja energía $|\Psi(0)\rangle = a_1|\phi_1\rangle + a_2|\phi_2\rangle + a_3|\phi_3\rangle + a_4|\phi_4\rangle$, donde este vector de estado está normalizado, $\sum_{n=1}^4 |a_n|^2 = 1$.

(c) Calcular la probabilidad de encontrar un valor de energía menor que $\frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ a $t = 0$.

(d) Calcular la incertidumbre en la energía a $t = 0$.

(e) Determinar ahora el estado del sistema al instante t . Cómo cambian los resultados en (c) y (d) si se calculan en un tiempo $t > 0$?

2. **Nota=1/5** Un sistema formado por dos partículas, cada una de spin $1/2$, está descrito por el Hamiltoniano

$$\hat{H} = A(\hat{S}_{1,z} + \hat{S}_{2,z}) + B\vec{\hat{S}}_1 \cdot \vec{\hat{S}}_2 \quad (1)$$

donde A y B son constantes reales y positivas.

(a) Determine los niveles de energías del sistema y sus correspondientes estados estacionarios.

(b) Al instante $t = 0$ el sistema se encuentra preparado de tal forma que la partícula 1 está polarizada a lo largo del eje z , es decir su estado es $|+\rangle_1$, mientras que la partícula 2 se encuentra en un estado cualquiera $|\phi\rangle_2 = \alpha|+\rangle_2 + \beta|-\rangle_2$, donde $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. En ese momento inicial el estado del sistema es entonces $|\psi(0)\rangle_{1,2} = |+\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2$. Determine la dependencia temporal de la polarización de la partícula 1, es decir

$$\mathcal{P}_{1,z}(t) = \frac{\langle \psi_{1,2}(t) | \hat{S}_{1,z} | \psi_{1,2}(t) \rangle}{\hbar/2} \quad (2)$$

Discuta el significado de su resultado en los casos límites $A \gg B$ y $A \ll B$.

3. Nota=1.5/5

(a) Se tienen dos qubits (qubit = sistema cuántico de dos niveles) A y B con bases permitidas $Z_A = \{|0_A\rangle, |1_A\rangle\}$ y similarmente Z_B . Considere el siguiente estado enredado expresado en la base $Z_A \otimes Z_B$

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_A 1_B\rangle - |1_A 0_B\rangle) \quad (3)$$

Expresé el anterior estado en la nueva base $G_A \otimes G_B$ donde $G_\nu = \{|\bar{0}_\nu\rangle, |\bar{1}_\nu\rangle\}$ con $\nu = A, B$ y

$$\begin{aligned} |\bar{0}_\nu\rangle &= \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)|0_\nu\rangle + \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)|1_\nu\rangle \\ |\bar{1}_\nu\rangle &= -\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)|0_\nu\rangle + \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)|1_\nu\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

(b) Calcular el valor esperado

$$\langle \Psi_{AB} | (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}_A) \otimes (\hat{m} \cdot \vec{\sigma}_B) | \Psi_{AB} \rangle \quad (5)$$

donde $\vec{\sigma}_A = (\hat{\sigma}_{x,A}, \hat{\sigma}_{y,A}, \hat{\sigma}_{z,A})$ representa el conjunto de matrices de Pauli para el qubit A (similarmente para el qubit B). Expresarlo en términos del ángulo ϕ formado entre sí por los dos vectores clásicos unitarios \hat{n} y \hat{m} .

(c) Sea el operador densidad que describe el estado del sistema de dos qubits dado por

$$\hat{\rho}_{AB} = F |\Psi_{AB}\rangle \langle \Psi_{AB}| + \left(\frac{1-F}{4}\right) \hat{I}_{AB} \quad (6)$$

donde F es una cantidad escalar real positiva entre 0 y 1 mientras que \hat{I}_{AB} es la matriz identidad 4×4 . Corresponde este operador densidad a un estado puro o a un estado mixto?. Justifique su respuesta.

(d) Se definen los siguientes operadores:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \hat{\sigma}_{A,z} \\ \hat{A}' &= \hat{\sigma}_{A,z} \cos(\phi) + \hat{\sigma}_{A,x} \sin(\phi) \\ \hat{B} &= \hat{\sigma}_{B,z} \\ \hat{B}' &= \hat{\sigma}_{B,z} \cos(\phi) - \hat{\sigma}_{B,x} \sin(\phi) \end{aligned}$$

donde $\hat{\sigma}$ representa matrices de Pauli. Determine el rango de valores de F del operador densidad del literal (c) para el cual $\hat{\rho}_{AB}$ viola la desigualdad de Bell

$$| \langle \hat{A} \otimes \hat{B} \rangle + \langle \hat{A}' \otimes \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \otimes \hat{B}' \rangle - \langle \hat{A}' \otimes \hat{B}' \rangle | \leq 2 \quad (7)$$

4. **Nota=1.5/5** Considere un sistema de fermiones idénticos con sólo dos sitios accesibles A y B , y dos posibilidades de spin en cada sitio \uparrow, \downarrow . Sean $\hat{c}_{X,\sigma}^\dagger$ y $\hat{c}_{X,\sigma}$ los operadores fermiónicos de creación y aniquilación de una partícula en el sitio $X = A, B$ con spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

(a) Hasta cuántos fermiones puede contener este sistema?

(b) Qué representa el operador $\hat{n}_{X,\sigma} = \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{X,\sigma}$? Si nos restringimos a la situación de medio-llenado, es decir, tenemos la mitad del número máximo de fermiones permitidos, y los fermiones interactúan de la forma dada por el siguiente Hamiltoniano

$$\hat{H}_U = U \sum_{X=A,B} \hat{n}_{X,\uparrow} \hat{n}_{X,\downarrow} \quad (8)$$

escriba explícitamente los 6 estados propios de \hat{H}_U en términos de combinaciones de los operadores $\hat{c}_{X,\sigma}^\dagger$ actuando sobre el vacío de fermiones y las energías correspondientes.

(c) Considere ahora nuevos términos en el Hamiltoniano total

$$\hat{H} = H_U + \sum_{X,\sigma} \left(-t \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\bar{X},\sigma} + \frac{V}{2} \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\bar{X},\bar{\sigma}}^\dagger \hat{c}_{X,\bar{\sigma}} \hat{c}_{\bar{X},\sigma} \right) \quad (9)$$

donde los símbolos con barra significan los contrarios. Identifique 2 de los 6 estados propios de \hat{H}_U que siguen siendo estados propios de \hat{H} . Explique por qué lo siguen siendo. Construya la matriz que representa al operador \hat{H} en el sub-espacio de los 4 estados propios de \hat{H}_U que NO SON estados propios de \hat{H} .

(d) La anterior matriz 4×4 se puede reducir a 2 matrices independientes cada una 2×2 por medio de la transformación unitaria

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \hat{U} & 0 \\ 0 & \hat{U} \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Encuentre los estados propios y energías exactas de \hat{H} .

AYUDAS

1. Integral que resulta útil:

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} du \operatorname{sen}^2(u) = \frac{\pi}{2} \quad (11)$$

2. Matrices de Pauli en la base standard

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (12)$$

3. Algunas propiedades de las matrices de Pauli:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 &= \hat{1} \\ \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y &= -\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = i \hat{\sigma}_z \end{aligned} \quad (13)$$

donde $\hat{1}$ es el operador identidad y la segunda línea es igualmente válida para permutaciones cíclicas de x , y y z .

4. Vectores propios de la componente \hat{u} de spin-1/2, \hat{S}_u , con $\hat{u} = (\theta, \phi)$, en términos de la base standard:

$$\begin{aligned} |+_u\rangle &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\frac{\phi}{2}}|+\rangle + \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\frac{\phi}{2}}|-\rangle \\ |-_u\rangle &= \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\frac{\phi}{2}}|+\rangle - \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\frac{\phi}{2}}|-\rangle \end{aligned} \quad (14)$$

Universidad de los Andes-Dpto. de Física
Mecánica Cuántica - Enero/2020

Solución Examen de Conocimientos - Doctorado

1. **Nota=1/5** Considere una partícula de masa m confinada en un pozo de potencial infinito que se extiende desde $x = -\frac{a}{2}$ hasta $x = \frac{a}{2}$. En este caso las condiciones que se deben exigir a las funciones de onda estacionarias son: (i) Anularse para $x \leq -\frac{a}{2}$ y para $x \geq \frac{a}{2}$ y (ii) estar normalizada.

(a) Encuentre los valores propios de la energía, E_n .

Se trata de resolver la ecuación de valores y funciones propias

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = E\phi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k^2\phi(x) = 0 \quad (1)$$

donde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. La solución general de la Ec.(1) se escribe

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (2)$$

Como se tiene que cumplir $\phi(-a/2) = \phi(a/2) = 0$ se tiene

$$\begin{aligned} Ae^{-i\frac{ka}{2}} + Be^{i\frac{ka}{2}} &= 0 \\ Ae^{i\frac{ka}{2}} + Be^{-i\frac{ka}{2}} &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Para obtener soluciones no triviales para A y B se debe tener que el determinante del anterior sistema se anule:

$$\begin{vmatrix} e^{-i\frac{ka}{2}} & e^{i\frac{ka}{2}} \\ e^{i\frac{ka}{2}} & e^{-i\frac{ka}{2}} \end{vmatrix} = 0 \quad (4)$$

lo que conduce a una condición para los posibles valores de k y por lo tanto de la energía:

$$k = n\frac{\pi}{a} \Leftrightarrow E_n = \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right) n^2 \quad (5)$$

con $n = 1, 2, 3, \dots$

(b) Exprese las funciones de onda estacionarias debidamente normalizadas, $\langle x|\phi_n\rangle = \phi_n(x)$. Discuta las propiedades de simetría de estas funciones con respecto a la inversión $x \rightarrow -x$.

Las funciones propias (normalizadas) correspondientes a valores impares de n , entre ellas la del estado fundamental $n = 1$, corresponden a $A = B$ y por lo tanto son

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(n\pi\frac{x}{a}\right) \quad , \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (6)$$

mientras que las asociadas a valores pares de n , corresponden a $A = -B$ y por lo tanto son

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(n\pi \frac{x}{a} \right) \quad , \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (7)$$

Las funciones de onda de estados estacionarios con n impar, entre ellas la del estado fundamental $n = 1$, son **PARES o SIMETRICAS** bajo la inversión $x \rightarrow -x$. Por el contrario, las funciones de onda de estados estacionarios con n par son **IMPARES o ANTI-SIMETRICAS** bajo la inversión $x \rightarrow -x$.

Suponer que el estado de la partícula a $t = 0$ es una superposición de los 4 estados estacionarios de más baja energía $|\Psi(0)\rangle = a_1|\phi_1\rangle + a_2|\phi_2\rangle + a_3|\phi_3\rangle + a_4|\phi_4\rangle$, donde este vector de estado está normalizado, $\sum_{n=1}^4 |a_n|^2 = 1$.

(c) Calcular la probabilidad de encontrar un valor de energía menor que $\frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ a $t = 0$.

Al medir la energía de la partícula a $t = 0$ se pueden encontrar los siguientes valores posibles de energía con sus correspondientes probabilidades

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad , \quad \mathcal{P}_1 = |a_1|^2 \\ E_2 &= \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad , \quad \mathcal{P}_2 = |a_2|^2 \\ E_3 &= \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad , \quad \mathcal{P}_3 = |a_3|^2 \\ E_4 &= \frac{16\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad , \quad \mathcal{P}_4 = |a_4|^2 \end{aligned}$$

Entonces, la probabilidad de encontrar un valor de energía menor que $\frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ es igual a $\mathcal{P} = \mathcal{P}_1 + \mathcal{P}_2 = |a_1|^2 + |a_2|^2$, porque sólo se podría encontrar en los estados $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$.

(d) Calcular la incertidumbre en la energía a $t = 0$.

Dado que se cumple $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$, el valor medio de la energía se puede escribir como

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \langle \psi(0) | \hat{H} | \psi(0) \rangle \\ &= |a_1|^2 \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle + |a_2|^2 \langle \phi_2 | \hat{H} | \phi_2 \rangle + |a_3|^2 \langle \phi_3 | \hat{H} | \phi_3 \rangle + |a_4|^2 \langle \phi_4 | \hat{H} | \phi_4 \rangle \\ &= |a_1|^2 E_1 + |a_2|^2 E_2 + |a_3|^2 E_3 + |a_4|^2 E_4 \end{aligned} \quad (8)$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \sum_{n=1}^4 n^2 |a_n|^2 \quad (9)$$

Para calcular la incertidumbre en energía es necesario antes calcular

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \langle \psi(0) | \hat{H}^2 | \psi(0) \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= |a_1|^2 \langle \phi_1 | \hat{H}^2 | \phi_1 \rangle + |a_2|^2 \langle \phi_2 | \hat{H}^2 | \phi_2 \rangle + |a_3|^2 \langle \phi_3 | \hat{H}^2 | \phi_3 \rangle + |a_4|^2 \langle \phi_4 | \hat{H}^2 | \phi_4 \rangle \\
&= |a_1|^2 E_1^2 + |a_2|^2 E_2^2 + |a_3|^2 E_3^2 + |a_4|^2 E_4^2 \\
&= \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \right)^2 \sum_{n=1}^4 n^4 |a_n|^2
\end{aligned} \tag{10}$$

Por lo tanto la incertidumbre en energía es

$$\begin{aligned}
\Delta H &= \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2} \\
&= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \sqrt{\sum_{n=1}^4 n^4 |a_n|^2 - \left(\sum_{n=1}^4 n^2 |a_n|^2 \right)^2}
\end{aligned} \tag{11}$$

(e) *Determinar ahora el estado del sistema al instante t . Cómo cambian los resultados en (c) y (d) si se calculan en un tiempo $t > 0$?*

Al instante t se tiene como vector de estado

$$|\psi(t)\rangle = a_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} |\phi_1\rangle + a_2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} |\phi_2\rangle + a_3 e^{-\frac{i}{\hbar} E_3 t} |\phi_3\rangle + a_4 e^{-\frac{i}{\hbar} E_4 t} |\phi_4\rangle \tag{12}$$

Los resultados obtenidos en (c) y (d) permanecen inalterados y válidos para cualquier tiempo $t > 0$.

2. **Nota=1/5** *Un sistema formado por dos partículas, cada una de spin 1/2, está descrito por el Hamiltoniano*

$$\hat{H} = A(\hat{S}_{1,z} + \hat{S}_{2,z}) + B\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \tag{13}$$

donde A y B son constantes reales y positivas.

(a) *Determine los niveles de energías del sistema y sus correspondientes estados estacionarios.*

El spin total del par de electrones es:

$$\vec{\hat{S}} = \vec{\hat{S}}_1 + \vec{\hat{S}}_2 \tag{14}$$

Como

$$\hat{S}_{1,z} + \hat{S}_{2,z} = \hat{S}_z \quad y \quad \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2} \left[\hat{S}^2 - \frac{3\hbar^2}{2} \right] \tag{15}$$

el Hamiltoniano se puede también escribir como

$$\hat{H} = A\hat{S}_z + \frac{B}{2} \left[\hat{S}^2 - \frac{3\hbar^2}{2} \right] \tag{16}$$

Por lo tanto los estados propios de \hat{H} son los mismos estados propios de los operadores de spin total: \hat{S}_z y \hat{S}^2 (con $S = 0, 1$). Entonces, vectores y valores propios son:

$$\begin{aligned}
|1, 1\rangle &\rightarrow E_{1,1} = A\hbar + \frac{B\hbar^2}{4} \\
|1, 0\rangle &\rightarrow E_{1,0} = \frac{B\hbar^2}{4} \\
|1, -1\rangle &\rightarrow E_{1,-1} = -A\hbar + \frac{B\hbar^2}{4} \\
|0, 0\rangle &\rightarrow E_{0,0} = -\frac{3B\hbar^2}{4}
\end{aligned} \tag{17}$$

donde cada ket está en la notación $|S, M\rangle$, $S = 0, 1$ y $-S \leq M \leq S$.

(b) Al instante $t = 0$ el sistema se encuentra preparado de tal forma que la partícula 1 está polarizada a lo largo del eje z , es decir su estado es $|+\rangle_1$, mientras que la partícula 2 se encuentra en un estado cualquiera $|\phi\rangle_2 = \alpha|+\rangle_2 + \beta|-\rangle_2$, donde $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. En ese momento inicial el estado del sistema es entonces $|\psi(0)\rangle_{1,2} = |+\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2$. Determine la dependencia temporal de la polarización de la partícula 1, es decir

$$\mathcal{P}_{1,z}(t) = \frac{\langle \psi_{1,2}(t) | \hat{S}_{1,z} | \psi_{1,2}(t) \rangle}{\hbar/2} \tag{18}$$

Discuta el significado de su resultado en los casos límites $A \gg B$ y $A \ll B$.

Al instante inicial se tiene

$$\begin{aligned}
|\psi(0)\rangle_{1,2} &= |+\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2 \\
&= \alpha|+, +\rangle + \beta|+, -\rangle \\
&= \alpha|1, 1\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}} [|1, 0\rangle + |0, 0\rangle]
\end{aligned} \tag{19}$$

Entonces

$$|\psi(t)\rangle_{1,2} = \alpha e^{-\frac{i}{\hbar} E_{1,1} t} |1, 1\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} E_{1,0} t} |1, 0\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar} E_{0,0} t} |0, 0\rangle \right] \tag{20}$$

La probabilidad que se pide es:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{1,z}(t) &= \frac{\langle \psi_{1,2}(t) | \hat{S}_{1,z} | \psi_{1,2}(t) \rangle}{\hbar/2} \\
&= |\alpha|^2 + |\beta|^2 \cos\left(\frac{E_{1,0} - E_{0,0}}{\hbar} t\right) \\
&= 1 - |\beta|^2 \sin^2(2\hbar B t)
\end{aligned} \tag{21}$$

Si $A \gg B$ se tiene $B \approx 0$, entonces $\mathcal{P}_{1,z}(t) \approx 1$. Note que $\mathcal{P}_{1,z}(t)$ no depende de A . Por lo tanto, se tendrá $\mathcal{P}_{1,z}(t) = 1 - |\beta|^2 \text{sen}^2(2\hbar Bt)$ para cualquier valor de $A \ll B$.

3. Nota=1.5/5

(a) Se tienen dos qubits (qubit = sistema cuántico de dos niveles) A y B con bases permitidas $Z_A = \{|0_A\rangle, |1_A\rangle\}$ y similarmente Z_B . Considere el siguiente estado enredado expresado en la base $Z_A \otimes Z_B$

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_A 1_B\rangle - |1_A 0_B\rangle) \quad (22)$$

Expresa el anterior estado en la nueva base $G_A \otimes G_B$ donde $G_\nu = \{|\bar{0}_\nu\rangle, |\bar{1}_\nu\rangle\}$ con $\nu = A, B$ y

$$\begin{aligned} |\bar{0}_\nu\rangle &= \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)|0_\nu\rangle + \text{sen}\left(\frac{\phi}{2}\right)|1_\nu\rangle \\ |\bar{1}_\nu\rangle &= -\text{sen}\left(\frac{\phi}{2}\right)|0_\nu\rangle + \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)|1_\nu\rangle \end{aligned} \quad (23)$$

El cambio de base se puede representar como

$$\begin{pmatrix} |\bar{0}_\nu\rangle \\ |\bar{1}_\nu\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) & \text{sen}\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ -\text{sen}\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |0_\nu\rangle \\ |1_\nu\rangle \end{pmatrix} \quad (24)$$

Para la transformación inversa basta cambiar ϕ por $-\phi$

$$\begin{pmatrix} |0_\nu\rangle \\ |1_\nu\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) & -\text{sen}\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ \text{sen}\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\bar{0}_\nu\rangle \\ |\bar{1}_\nu\rangle \end{pmatrix} \quad (25)$$

Se obtiene finalmente

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_A 1_B\rangle - |1_A 0_B\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\bar{0}_A \bar{1}_B\rangle - |\bar{1}_A \bar{0}_B\rangle) \quad (26)$$

Como se puede ver, este estado singlete (uno de los denominados estados de Bell) mantiene la misma forma bajo cualquier rotación común de bases de A y B .

(b) Calcular el valor esperado

$$\langle \Psi_{AB} | (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}_A) \otimes (\hat{m} \cdot \vec{\sigma}_B) | \Psi_{AB} \rangle \quad (27)$$

donde $\vec{\sigma}_A = (\hat{\sigma}_{x,A}, \hat{\sigma}_{y,A}, \hat{\sigma}_{z,A})$ representa el conjunto de matrices de Pauli para el qubit A (similarmente para el qubit B). Expresarlo en términos del ángulo ϕ formado entre sí por los dos vectores clásicos unitarios \hat{n} y \hat{m} .

Si expresamos los vectores unitarios en términos de sus ángulos polares θ, θ' y azimutales η, η' como

$$\begin{aligned}\hat{n} &= (\text{sen}\theta\cos\eta, \text{sen}\theta\text{sen}\eta, \cos\theta) \\ \hat{m} &= (\text{sen}\theta'\cos\eta', \text{sen}\theta'\text{sen}\eta', \cos\theta')\end{aligned}\quad (28)$$

podemos escribir

$$\hat{n} \cdot \vec{\sigma}_A = \begin{pmatrix} \cos\theta & \text{sen}\theta e^{-i\eta} \\ \text{sen}\theta e^{i\eta} & -\cos\theta \end{pmatrix}\quad (29)$$

y

$$\hat{m} \cdot \vec{\sigma}_B = \begin{pmatrix} \cos\theta' & \text{sen}\theta' e^{-i\eta'} \\ \text{sen}\theta' e^{i\eta'} & -\cos\theta' \end{pmatrix}\quad (30)$$

Por lo tanto en la base $Z_A \otimes Z_B = \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ tenemos

$$(\hat{n} \cdot \vec{\sigma}_A)(\hat{m} \cdot \vec{\sigma}_B) = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\theta' & \cos\theta\text{sen}\theta' e^{-i\eta'} & \text{sen}\theta e^{-i\eta}\cos\theta' & \text{sen}\theta e^{-i\eta}\text{sen}\theta' e^{-i\eta'} \\ \cos\theta\text{sen}\theta' e^{i\eta'} & -\cos\theta\cos\theta' & \text{sen}\theta e^{-i\eta}\text{sen}\theta' e^{i\eta'} & -\text{sen}\theta e^{-i\eta}\cos\theta' \\ \text{sen}\theta e^{i\eta}\cos\theta' & \text{sen}\theta e^{i\eta}\text{sen}\theta' e^{-i\eta'} & -\cos\theta\cos\theta' & -\cos\theta\text{sen}\theta' e^{-i\eta'} \\ \text{sen}\theta e^{i\eta}\text{sen}\theta' e^{i\eta'} & -\text{sen}\theta e^{i\eta}\cos\theta' & -\cos\theta\text{sen}\theta' e^{i\eta'} & \cos\theta\cos\theta' \end{pmatrix}\quad (31)$$

El valor esperado solicitado se puede escribir

$$\langle \Psi_{AB} | (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}_A) \otimes (\hat{m} \cdot \vec{\sigma}_B) | \Psi_{AB} \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}_A)(\hat{m} \cdot \vec{\sigma}_B) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}\quad (32)$$

y finalmente

$$\langle \Psi_{AB} | (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}_A) \otimes (\hat{m} \cdot \vec{\sigma}_B) | \Psi_{AB} \rangle = -\cos\theta\cos\theta' - \text{sen}\theta\text{sen}\theta'\cos(\eta - \eta') = -\cos\phi\quad (33)$$

(c) Sea el operador densidad que describe el estado del sistema de dos qubits dado por

$$\hat{\rho}_{AB} = F |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}| + \left(\frac{1-F}{4}\right) \hat{I}_{AB}\quad (34)$$

donde F es una cantidad escalar real positiva entre 0 y 1 mientras que \hat{I}_{AB} es la matriz identidad 4×4 . Corresponde este operador densidad a un estado puro o a un estado mixto?. Justifique su respuesta.

El estado descrito por el operador densidad $\hat{\rho}_{AB}$ corresponde a un estado puro sólo si $F = 1$ ($\text{Tr}\{\rho_{AB}^2\} = 1$) y corresponde a un estado mixto si $0 \leq F < 1$ porque

$$\hat{\rho}_{AB}^2 = F^2 |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}| + \frac{F(1-F)}{2} |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}| + \left(\frac{1-F}{4}\right)^2 I_{AB}\quad (35)$$

Dado que $Tr\{|\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}|\} = 1$ y $Tr\{I_{AB}\} = 4$ entonces

$$Tr\{\hat{\rho}_{AB}^2\} = \frac{3F^2 + 1}{4} \leq 1 \quad (36)$$

(d) Se definen los siguientes operadores:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \hat{\sigma}_{A,z} \\ \hat{A}' &= \hat{\sigma}_{A,z}\cos(\phi) + \hat{\sigma}_{A,x}\sen(\phi) \\ \hat{B} &= \hat{\sigma}_{B,z} \\ \hat{B}' &= \hat{\sigma}_{B,z}\cos(\phi) - \hat{\sigma}_{B,x}\sen(\phi) \end{aligned}$$

donde $\hat{\sigma}$ representa matrices de Pauli. Determine el rango de valores de F del operador densidad del literal (c) para el cual $\hat{\rho}_{AB}$ viola la desigualdad de Bell

$$| \langle \hat{A} \otimes \hat{B} \rangle + \langle \hat{A}' \otimes \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \otimes \hat{B}' \rangle - \langle \hat{A}' \otimes \hat{B}' \rangle | \leq 2 \quad (37)$$

Con la ayuda de la Ec.(33) se calculan los 4 valores esperados

$$\langle \hat{A} \otimes \hat{B} \rangle = Tr\{\rho_{AB}\sigma_{A,z} \otimes \sigma_{B,z}\} = F\langle\Psi_{AB} | \sigma_{A,z} \otimes \sigma_{B,z} | \Psi_{AB}\rangle + \frac{1-F}{4}Tr_A\{\sigma_{A,z}\}Tr_B\{\sigma_{B,z}\} = -F \quad (38)$$

$$\langle \hat{A}' \otimes \hat{B} \rangle = Tr\{\rho_{AB}(\sigma_{A,z}\cos(\phi) + \sigma_{A,x}\sen(\phi)) \otimes \sigma_{B,z}\} = -F\cos(\phi) \quad (39)$$

$$\langle \hat{A} \otimes \hat{B}' \rangle = Tr\{\rho_{AB}\sigma_{A,z} \otimes (\sigma_{B,z}\cos(\phi) - \sigma_{B,x}\sen(\phi))\} = -F\cos(\phi) \quad (40)$$

$$\langle \hat{A}' \otimes \hat{B}' \rangle = Tr\{\rho_{AB}(\sigma_{A,z}\cos(\phi) + \sigma_{A,x}\sen(\phi)) \otimes (\sigma_{B,z}\cos(\phi) - \sigma_{B,x}\sen(\phi))\} = -F\cos(2\phi) \quad (41)$$

Entonces,

$$| \langle \hat{A} \otimes \hat{B} \rangle + \langle \hat{A}' \otimes \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \otimes \hat{B}' \rangle - \langle \hat{A}' \otimes \hat{B}' \rangle | = 2F|1 + \cos(\phi) - \cos^2(\phi)| \quad (42)$$

Este último resultado presentará un máximo cuando $\cos(\phi) = 1/2$ con un valor de $5F/2$. Por lo tanto, si $F \leq 4/5$ la desigualdad de Bell siempre se mantiene válida (no presenta violación alguna).

4. **Nota=1.5/5** Considere un sistema de fermiones idénticos con sólo dos sitios accesibles A y B , y dos posibilidades de spin en cada sitio \uparrow, \downarrow . Sean $\hat{c}_{X,\sigma}^\dagger$ y $\hat{c}_{X,\sigma}$ los operadores fermiónicos de creación y aniquilación de una partícula en el sitio $X = A, B$ con spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

(a) Hasta cuántos fermiones puede contener este sistema?

Este sistema de dos estados con spin puede contener hasta un máximo de 4 fermiones.

(b) Qué representa el operador $\hat{n}_{X,\sigma} = \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{X,\sigma}$? Si nos restringimos a la situación de medio-llenado, es decir, tenemos la mitad del número máximo de fermiones permitidos, y los fermiones interactúan de la forma dada por el siguiente Hamiltoniano

$$\hat{H}_U = U \sum_{X=A,B} \hat{n}_{X,\uparrow} \hat{n}_{X,\downarrow} \quad (43)$$

escriba explícitamente los 6 estados propios de \hat{H}_U en términos de combinaciones de los operadores $\hat{c}_{X,\sigma}^\dagger$ actuando sobre el vacío de fermiones y las energías correspondientes.

Sea $\hat{n}_{X,\sigma} = \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{X,\sigma}$ el operador número de fermiones en el estado $|X, \sigma\rangle$. Situación de medio llenado implica que nos restringimos a considerar estados con exactamente 2 fermiones. Los estados posibles son entonces

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \hat{c}_{B,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{A,\uparrow}^\dagger |0\rangle & , & \quad E_1 = 0 \\ |2\rangle &= \hat{c}_{B,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{A,\downarrow}^\dagger |0\rangle & , & \quad E_2 = 0 \\ |3\rangle &= \hat{c}_{B,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{A,\uparrow}^\dagger |0\rangle & , & \quad E_3 = 0 \\ |4\rangle &= \hat{c}_{B,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{A,\downarrow}^\dagger |0\rangle & , & \quad E_4 = 0 \\ |5\rangle &= \hat{c}_{A,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{A,\downarrow}^\dagger |0\rangle & , & \quad E_5 = U \\ |6\rangle &= \hat{c}_{B,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{B,\downarrow}^\dagger |0\rangle & , & \quad E_6 = U \end{aligned} \quad (44)$$

(c) Considere ahora nuevos términos en el Hamiltoniano total

$$\hat{H} = H_U + \sum_{X,\sigma} \left(-t \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\bar{X},\sigma} + \frac{V}{2} \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\bar{X},\bar{\sigma}}^\dagger \hat{c}_{X,\sigma} \hat{c}_{\bar{X},\sigma} \right) \quad (45)$$

donde los símbolos con barra significan los contrarios. Identifique 2 de los 6 estados propios de \hat{H}_U que siguen siendo estados propios de \hat{H} . Explique por qué lo siguen siendo. Construya la matriz que representa al operador \hat{H} en el sub-espacio de los 4 estados propios de \hat{H}_U que NO SON estados propios de \hat{H} .

Los estados polarizados de spin $|1\rangle$ y $|2\rangle$ son estados propios de \hat{H} con valores propios idénticos a 0. Los nuevos términos $\hat{H}_t = -t \sum_{X,\sigma} \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\bar{X},\sigma}$ y $\hat{H}_V = \frac{V}{2} \sum_{X,\sigma} \hat{c}_{X,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\bar{X},\bar{\sigma}}^\dagger \hat{c}_{X,\sigma} \hat{c}_{\bar{X},\sigma}$ no tienen

efecto sobre estos estados porque: (i) el primero transporta un fermión de un sitio a otro sin cambiar su spin lo cual es imposible sobre estos estados, por el principio de exclusión de Pauli; (ii) el segundo empieza aniquilando un fermión en cada sitio con spins distintos. Sobre los estados restantes las acciones de \hat{H}_t y \hat{H}_V vienen dadas por

$$\begin{aligned}\hat{H}_t|3\rangle &= -t(|5\rangle + |6\rangle) \\ \hat{H}_t|4\rangle &= -t(|5\rangle + |6\rangle) \\ \hat{H}_t|5\rangle &= -t(|3\rangle + |4\rangle) \\ \hat{H}_t|6\rangle &= -t(|3\rangle + |4\rangle)\end{aligned}\tag{46}$$

y

$$\begin{aligned}\hat{H}_V|3\rangle &= V|4\rangle \\ \hat{H}_V|4\rangle &= V|3\rangle \\ \hat{H}_V|5\rangle &= 0 \\ \hat{H}_V|6\rangle &= 0\end{aligned}\tag{47}$$

Por lo tanto la representación matricial de \hat{H} en estos 4 estados es

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & V & -t & -t \\ V & 0 & -t & -t \\ -t & -t & U & 0 \\ -t & -t & 0 & U \end{pmatrix}\tag{48}$$

(d) *La anterior matriz 4×4 se puede reducir a 2 matrices independientes cada una 2×2 por medio de la transformación unitaria*

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \hat{U} & 0 \\ 0 & \hat{U} \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\tag{49}$$

Encuentre los estados propios y energías exactas de \hat{H} .

Se tiene que hacer:

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \hat{U} & 0 \\ 0 & \hat{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & V & -t & -t \\ V & 0 & -t & -t \\ -t & -t & U & 0 \\ -t & -t & 0 & U \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{U}^\dagger & 0 \\ 0 & \hat{U}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V & 0 & -2t & 0 \\ 0 & -V & 0 & 0 \\ -2t & 0 & U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U \end{pmatrix}\tag{50}$$

Se encuentra que $|e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle - |4\rangle)$ es estado propio de \hat{H} con energía $e_1 = -V$ y $|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|5\rangle - |6\rangle)$ es estado propio de \hat{H} con energía $e_2 = U$. Notar que el estado $|e_1\rangle$ no es otra cosa

que el estado triplete con componente z de spin $S_z = 0$ que acompaña a los dos otros estados tripletes polarizados $|1\rangle$ y $|2\rangle$.

Los dos estados restantes $\frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle + |4\rangle)$ y $\frac{1}{\sqrt{2}}(|5\rangle + |6\rangle)$ están acoplados por \hat{H} . Diagonalizando la matriz 2×2 que queda se obtienen los siguientes valores propios:

$$\begin{aligned} e_3 &= \frac{1}{2} \left[U + V + \sqrt{(U - V)^2 + 16t^2} \right] \\ e_4 &= \frac{1}{2} \left[U + V - \sqrt{(U - V)^2 + 16t^2} \right] \end{aligned} \quad (51)$$

y vectores propios correspondientes (normalizados):

$$\begin{pmatrix} |e_3\rangle \\ |e_4\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |3\rangle + |4\rangle \\ |5\rangle + |6\rangle \end{pmatrix} \quad (52)$$

con $\tan(\theta) = -\frac{4t}{U-V}$.

Examen de Conocimientos – Mecánica estadística

1. (20) (Pregrado) Dos sistemas, A y B, tienen el número de microestados en función de la energía que indica la siguiente tabla:

E_A	Ω_A		E_B	Ω_B
1	1		1	1
2	4		2	8
3	9		3	27
4	16		4	64

Si estos sistemas están en contacto, y la energía total es $E_T=5$,

- Encuentre el estado más probable, descrito por E_A^* .
- Encuentre la probabilidad de estar en un estado donde $E_A > E_A^*$ y donde $E_A < E_A^*$.
- Encuentre el flujo de energía esperado si el sistema comienza en E_A^* .
- Haciendo una aproximación continua, donde $\Omega_A = a^* E_A^2$ y $\Omega_B = b^* E_B^3$, encuentre la energía de equilibrio y la temperatura.

2. (20) (Pregrado) Potencial químico

a) Obtenga el potencial químico por molécula para un gas ideal a partir de

$$S = Nk \left[\ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{4\pi m E}{3N h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right) + \frac{5}{2} \right].$$

b) Obtenga el potencial químico por molécula para un gas de van der Waals a partir de

$$\Omega_{E,n,V} = \left(\frac{E}{c_V} + \frac{an}{V c_V} \right)^{\frac{c_V}{k}} \left(\frac{V}{n} - b \right)^{n N_A}.$$

c) Suponga que un gas de átomos x se comporta como un gas de van der Waals, mientras que su versión diatómica x_2 se comporta como un gas ideal. Para un número total N de átomos, una temperatura T dada y un volumen total V dado, halle la condición de equilibrio y las ecuaciones para los números de átomos y moléculas en equilibrio.

3. (30) (Postgrado) Una aleación binaria de metales consiste de N_A átomos del metal A y N_B átomos del metal B. Los átomos se encuentran en una estructura cristalina cúbica con interacción con los 6 vecinos más cercanos. Asuma una energía de interacción atractiva (-J) para vecinos iguales y repulsiva (+J) para pares diferentes.

a)Cuál es la configuración de mínima energía?

- b) Estime la energía total de interacción asumiendo que los átomos se encuentran distribuidos uniformemente, es decir, con probabilidades independientes y proporcionales a su densidad.
- c) Estime la entropía de mezclado en la misma aproximación.
- d) Usando esto obtenga la energía libre $F(N_A, N_B)$. Escríbala en términos de $x = (N_A - N_B)/N$. Expanda F a cuarto orden en x y muestre que la condición de convexidad se pierde por debajo de una temperatura T_C .
- e) Usando la expansión del punto anterior, grafique $F(x)$ para $T > T_C$, $T = T_C$ y $T < T_C$. Para $T < T_C$, existe un rango de $x < |x_s(T)|$ tal que $F(x)$ no es convexo y por tanto la composición es localmente inestable. Encuentre $x_s(T)$.
- f) La aleación se separa en 2 fases con alta densidad de A y B respectivamente, con composición $\pm x_{eq}(T)$. Dado que $x_{eq}(T)$ minimiza $F(x)$, encuentre $x_{eq}(T)$.
- g) En el plano (T, x) ilustre la frontera $\pm x_{eq}(T)$ y $x_s(T)$.

4. (30) Un gas clásico de átomos indistinguibles no interactuantes está en equilibrio a temperatura T en un recipiente de volumen V y área superficial A . Los átomos tienen energía potencial 0 en el volumen y energía potencial $-E_0$ cuando se adhieren a la superficie, donde se comportan como un gas ideal bidimensional.

- a) Encuentre la función de partición y la energía libre de Helmholtz para cada fase.
- b) Encuentre una expresión analítica para la densidad superficial $\sigma_{(n,T)} = \frac{N_{superficie}}{A}$ en función de la densidad $n = \frac{N_{volumen}}{V}$ y la temperatura. La expresión resultante muestra el interesante efecto de que σ sería 0 si \hbar fuese 0.

Expresiones útiles: $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = 1$ $N! \approx \left(\frac{N}{e}\right)^N$

Examen de Conocimientos – Mecánica estadística - Solución

1. (15) (Pregrado) Dos sistemas, A y B, tienen el número de microestados en función de la energía (en unidades arbitrarias) que indica la siguiente tabla:

E_A	Ω_A		E_B	Ω_B
1	1		1	1
2	4		2	8
3	9		3	27
4	16		4	64

Si estos sistemas están en contacto, y la energía total es $E_T=5$,

a) Encuentre el estado más probable, descrito por E_A^* .

E_A	Ω_A	E_B	Ω_B	Ω_T
1	1	4	64	64
2	4	3	27	108
3	9	2	8	72
4	16	1	1	16
			Suma:	260

El (macro)estado más probable es $E_A^*=2$.

b) Encuentre la probabilidad de estar en un estado donde $E_A > E_A^*$ y donde $E_A < E_A^*$.

De la tabla, la probabilidad de estar en un estado donde $E_A > E_A^*$ es $(72+16)/260=34\%$ y la probabilidad de estar en un estado donde $E_A < E_A^*$ es $64/260=25\%$.

c) Encuentre el flujo de energía esperado hacia el sistema A si éste comienza en E_A^* .

$$\langle \Delta E \rangle = -1 \cdot 64/260 + 1 \cdot 72/260 + 2 \cdot 16/260 = 0.15$$

d) Haciendo una aproximación continua, donde $\Omega_A = a \cdot E_A^2$ y $\Omega_B = b \cdot E_B^3$, encuentre la energía de equilibrio y la temperatura.

$$\frac{d \log \Omega}{d E_A} = \frac{2}{E_A} - \frac{3}{E_T - E_A} \rightarrow E_A^* = \frac{2}{5} E_T$$

2. (15) (Pregrado) Potencial químico

a) Obtenga el potencial químico por molécula para un gas ideal a partir de

$$S = Nk \left[\ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{4\pi m E}{3N h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right) + \frac{5}{2} \right].$$

$$\frac{\mu}{T} = - \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V}$$

$$\frac{\mu}{T} = -k \ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{4\pi m E}{3N h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right) - Nk \left(-\frac{5}{2N} \right) - \frac{5}{2}k$$

Utilizando $E = \frac{3}{2}NkT$

$$\frac{\mu}{T} = -k \ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{4\pi m E}{3N h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right)$$

$$\mu = -kT \ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right)$$

b) Obtenga el potencial químico por molécula para un gas de van der Waals a partir de

$$\Omega_{E,n,V} = \left(\frac{E}{c_V} + \frac{an}{Vc_V} \right)^{\frac{c_V}{k}} \left(\frac{V}{n} - b \right)^{nN_A}$$

$$S = k \ln \Omega$$

$$S = c_V \ln \left(\frac{E}{c_V} + \frac{aN}{N_A V c_V} \right) + kN \ln \left(\frac{VN_A}{N} - b \right)$$

$$\frac{\mu}{T} = - \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V}$$

$$= -c_V \frac{1}{\frac{E}{c_V} + \frac{aN}{N_A V c_V}} \frac{a}{N_A V c_V} + k \ln \left(\frac{VN_A}{N} - b \right) + kN \frac{VN_A}{N(bN - VN_A)}$$

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\frac{E}{c_V} + \frac{aN}{N_A V c_V}}$$

$$\rightarrow \frac{E}{c_V} = T - \frac{aN}{N_A V c_V} \rightarrow E = Tc_V - \frac{aN}{VN_A}$$

Reemplazando lo anterior,

$$\mu = -\frac{a}{N_A V} + kT \ln \left(\frac{VN_A}{N} - b \right) + Tk \frac{VN_A}{(bN - VN_A)}$$

c) Suponga que un gas de átomos x se comporta como un gas de van der Waals, mientras que su versión diatómica x_2 se comporta como un gas ideal. Para un número total N de átomos, una temperatura T dada y un volumen total V dado, halle la condición de equilibrio y las ecuaciones para los números de átomos y moléculas en equilibrio.

En equilibrio, los potenciales químicos de los dos sistemas deben ser iguales:

$$-kT \ln \left(\frac{V}{N - N_V} \left(\frac{2\pi m kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right) = -\frac{a}{N_A V} + kT \ln \left(\frac{VN_A}{N_V} - b \right) + Tk \frac{VN_A}{(bN_V - VN_A)}$$

Resolviendo la ecuación anterior se puede encontrar el número de moléculas y átomos

3. (35) Una aleación binaria de metales consiste de N_A átomos del metal A y N_B átomos del metal B. Los átomos se encuentran en una estructura cristalina cúbica con interacción con los 6 vecinos más cercanos. Asuma una energía de interacción atractiva (-J) para vecinos iguales y repulsiva (+J) para pares diferentes.

a) Estime la energía total de interacción asumiendo que los átomos se encuentran distribuidos uniformemente, es decir, con probabilidades independientes y proporcionales a su densidad.

$$E_T = 3N \langle \epsilon \rangle = -3N J \left(\frac{N_A - N_B}{N} \right)^2$$

b) Estime la entropía de mezclado en la misma aproximación.

$$S = K \ln \left(\frac{N!}{N_A! N_B!} \right)$$

c) Usando esto obtenga la energía libre $F(N_A, N_B)$. Escríbala en términos de $x = (N_A - N_B)/N$. Expanda F a cuarto orden en x y muestre que la condición de convexidad se pierde por debajo de una temperatura T_c .

$$F = -N T K \ln 2 + x^2 N \left(-3J + \frac{T}{2} \right) + \frac{N T K}{12} x^4$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = 2N \left(-3J + \frac{T}{2} K \right) + N T K x^2 = 0 \Rightarrow T_c = \frac{6J}{K}$$

d) Usando la expansión del punto anterior, grafique $F(x)$ para $T > T_c$, $T = T_c$ y $T < T_c$. Para $T < T_c$, existe un rango de $x < |x_s(T)|$ tal que $F(x)$ no es convexo y por tanto la composición es localmente inestable. Encuentre $x_s(T)$.



$$x_s = \sqrt{\frac{6J}{TK} - 1}$$

e) La aleación se separa en 2 fases con alta densidad de A y B respectivamente, con composición $\pm x_{eq}(T)$. Dado que $x_{eq}(T)$ minimiza $F(x)$, encuentre $x_{eq}(T)$.

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=x_{eq}} = 0 \Rightarrow x_{eq} = -\sqrt{\frac{1875}{KT} - 3}$$

4. (35) Un gas clásico de átomos indistinguibles no interactuantes está en equilibrio a temperatura T en un recipiente de volumen V y área superficial A . Los átomos tienen energía potencial 0 en el volumen y energía potencial $-E_0$ cuando se adhieren a la superficie, donde se comportan como un gas ideal bidimensional.

a) Encuentre la función de partición y la energía libre de Helmholtz para cada fase.

Para el gas en el volumen:

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

$$\begin{aligned} Z(N_1, T, V) &= \frac{1}{N_1! h^{3N_1}} V^{N_1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p^2}{2m}} dp \right]^{3N_1} \\ &= \frac{V^{N_1}}{N_1! h^{3N_1}} \left[\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \right]^{3N_1} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \right]^{3N_1} \\ &= \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2} \right)^{\frac{3N_1}{2}} \frac{V^{N_1}}{N_1!} \approx \left[\frac{e}{N_1} \frac{V}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \right]^{N_1} \end{aligned}$$

$$F = -kT \ln Z = -kT N_1 \ln \left[\frac{eV}{N_1 h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

$$N_1 = \left. \frac{\partial F}{\partial N_1} \right|_{T,V} = -kT \ln \left[\frac{eV}{N_1 h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \right] + kT$$

Para el gas en la superficie:

$$E = -E_0 + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}$$

$$\begin{aligned} Z(N_2, T, A) &= \frac{A^{N_2}}{N_2! h^{2N_2}} \left[e^{\beta E_0} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p^2}{2m}} dp \right)^2 \right]^{N_2} \\ &= \frac{1}{N_2!} \left[\frac{A}{h^2} e^{\beta E_0} \frac{2\pi m}{\beta} \right]^{N_2} \approx \left[\frac{eA}{N_2 h^2} e^{\beta E_0} \frac{2\pi m}{\beta} \right]^{N_2} \end{aligned}$$

$$F = -kT \ln Z = -kT N_2 \ln \left[\frac{eA}{N_2 h^2} e^{\beta E_0} \frac{2\pi m}{\beta} \right]$$

$$N_2 = \left. \frac{\partial F}{\partial N_2} \right|_{T,V} = -kT \ln \left[\frac{eA}{N_2 h^2} e^{\beta E_0} \frac{2\pi m}{\beta} \right] + kT$$

b) Encuentre una expresión analítica para la densidad superficial $\sigma_{(n,T)} = \frac{N_{superficie}}{A}$ en función de la densidad $n = \frac{N_{volumen}}{V}$ y la temperatura. La expresión resultante muestra el interesante efecto de que σ sería 0 si \hbar fuese 0.

$$\begin{aligned}
 \text{Usando } \mu_s = \mu_v, \quad \frac{N_s}{A} = \sigma, \quad \frac{N_v}{V} = n \\
 \Rightarrow \left[\frac{e}{n \hbar} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \right] = \left[\frac{e}{\sigma \hbar} e^{\beta \epsilon_0} \frac{2\pi m}{\beta} \right] \\
 \Rightarrow \frac{1}{n \hbar} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{\sigma \hbar} e^{\beta \epsilon_0} \\
 \Rightarrow \sigma = \frac{n \hbar}{\sqrt{2\pi m A T}} e^{\frac{\epsilon_0}{kT}}
 \end{aligned}$$

Expresiones útiles: $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = 1$ $N! \approx \left(\frac{N}{e}\right)^N$