Jaime Santos
Universidade do Minho

Licenciatura em Física
Ano letivo 2022/2023

Física Quântica II

Soluções

Exercício 18: *Evolução de um spin 1/2 num campo magnético*

Um eletrão cujo spin 1/2 se encontra inicialmente no estado próprio $|+\rangle$ de $\hat{\sigma}_z$ (i.e. $\hat{\sigma}_z |+\rangle = |+\rangle$), viaja a uma velocidade v, suposta constante (e ao longo de x), através de uma região de comprimento L onde existe um campo magnético $\boldsymbol{B} = B\hat{\boldsymbol{e}}_x$.

O Hamiltoniano de interação do momento magnético do eletrão $\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e}{m}\hat{\boldsymbol{S}}$, em que $\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, com o campo magnético, é dado por

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{B} = \frac{e\hbar B}{2m}\hat{\sigma}_x \tag{75}$$

Os estados próprios deste Hamiltoniano são os estados próprios de $\hat{\sigma}_x$, $|+, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$ e $|-, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$, com energias iguais a $E_\pm = \pm\hbar\omega_{\mathrm{L}}$, em que $\omega_{\mathrm{L}} = \frac{eB}{2m}$ é a frequência de Larmor do eletrão.

O estado inicial pode escrever-se à custa destes estados como $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle + |-, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle)$.

A sua evolução temporal é dada por

$$\begin{aligned}
|\psi_t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{iE_+}{\hbar}t}|+, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle + e^{-\frac{iE_-}{\hbar}t}|-, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\omega_{\mathrm{L}}t}|+, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle + e^{i\omega_{\mathrm{L}}t}|-, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle) \\
&= \cos(\omega_{\mathrm{L}}t)|+\rangle - i\sin(\omega_{\mathrm{L}}t)|-\rangle\,,
\end{aligned} \tag{76}$$

onde reexpressamos a evolução temporal em termos da base de auto-estados de $\hat{\sigma}_z$.

A probabilidade de medir o valor de spin do electrão ao longo de uma direção arbitrária $\hat{\boldsymbol{n}} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$, em que θ e φ são os ângulos polares que caracterizam a direção do versor $\hat{\boldsymbol{n}}$, igual a $-\hbar/2$, após o eletrão atravessar a dita região, é simplesmente dada por $p_{\hat{\boldsymbol{n}}}(-) = \langle\psi_{t_L}|\hat{P}_{\hat{\boldsymbol{n}}}(-)|\psi_{t_L}\rangle$ em que $t_L = L/v$ é o tempo de travessia (o eletrão desloca-se com velocidade constante v ao longo do eixo dos x, não está sujeito a qualquer força e o seu movimento é retilíneo) e $\hat{P}_{\hat{\boldsymbol{n}}}(-) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} - \hat{\boldsymbol{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})$ é o projetor no estado $|-, \hat{\boldsymbol{n}}\rangle$.

Obtemos

$$\begin{aligned}
p_{\hat{\boldsymbol{n}}}(-) &= \begin{pmatrix}\cos(\omega_{\mathrm{L}}L/v) & i\sin(\omega_{\mathrm{L}}L/v)\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}\frac{1}{2}(1-\hat{n}_z) & -\frac{1}{2}(\hat{n}_x - i\hat{n}_y) \\ -\frac{1}{2}(\hat{n}_x + i\hat{n}_y) & \frac{1}{2}(1+\hat{n}_z)\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}\cos(\omega_{\mathrm{L}}L/v) \\ -i\sin(\omega_{\mathrm{L}}L/v)\end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\left[1 - \cos\theta\cos(2\omega_{\mathrm{L}}L/v) + \sin\theta\sin\varphi\sin(2\omega_{\mathrm{L}}L/v)\right],
\end{aligned} \tag{77}$$

onde espressamos as componentes do versor $\hat{\boldsymbol{n}}$ em termos das coordenadas esféricas θ e φ e onde utilizamos a representação explícita dos operadores de Pauli em termos de matrizes 2×2.

Exercício 19: *Integral da função* $\frac{\sin^2 u}{u^2}$

Utilizando a identidade $\frac{1}{u^2} = \int_0^\infty dy\, y\, e^{-yu}$ e substituindo no integral em questão, obtemos

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty du\, \frac{\sin^2 u}{u^2} &= \int_0^\infty du\, \sin^2 u \int_0^\infty dy\, y\, e^{-yu} \\
&= \frac{1}{2}\int_0^\infty dy\, y \int_0^\infty du\, e^{-yu}(1-\cos(2u)) \\
&= \frac{1}{2}\int_0^\infty dy\, y \int_0^\infty du\, e^{-yu}\left[1-\frac{1}{2}(e^{2iu}+e^{-2iu})\right] \\
&= \frac{1}{2}\int_0^\infty dy\, y \left[\frac{1}{y}-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{y-2i}+\frac{1}{y+2i}\right)\right] \\
&= 2\int_0^\infty \frac{dy}{y^2+4} \\
&= \int_0^\infty \frac{dy}{y^2+1} = \frac{\pi}{2},
\end{aligned}
\tag{78}
$$

onde o último integral pode facilmente ser calculado recorrendo à substituição $y = \tan(\theta/2)$.

Exercício 20: *Conservação da probabilidade em teoria de perturbações em ordem* λ^2

O objetivo deste exercício é provar que $\sum_j |\gamma_j(t)|^2 = 1$ em segunda ordem em λ^2, em que os coeficientes $\gamma_j(t)$ são os coeficientes de expansão da função de onda $|\psi_t\rangle$ de um sistema descrito por um Hamiltoniano dependente do tempo, $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1(t)$, i.e.

$$
|\psi_t\rangle = \sum_l \gamma_l(t) e^{-i\frac{E_l}{\hbar}(t-t_0)}\, |l\rangle\ , \tag{79}
$$

em que $|l\rangle$ são os estados próprios de $\hat{H}_0$, supostos conhecidos, com energias próprias associadas iguais a E_l, sendo que $\gamma(0) = a_l^0$, determinando as amplitudes a_l^0, o estado inicial a $t = t_0$, i.e. $|\psi_{t_0}\rangle = \sum_l a_l^0\, |l\rangle$.

a) A equação diferencial que foi obtida na aula teórica para os coeficientes $\gamma_j(t)$ é dada por

$$
\frac{d\gamma_j}{dt} = -\frac{i\lambda}{\hbar}\sum_l \langle j|\, \hat{H}_1(t)\, |l\rangle\, e^{-i\omega_{lj}(t-t_0)}\gamma_l(t)\,, \tag{80}
$$

em que $\omega_{lj} = \frac{E_l - E_j}{\hbar}$. Basta agora integrar esta equação entre t_0 e t, sendo que do lado esquerdo obteremos $\gamma_j(t) - \gamma_j(t_0)$ e do lado direito o integral do lado direito de (80), entre t_0 e t. Como $\gamma_j(t_0) = a_j^0$, obtemos

$$
\gamma_j(t) = a_j^0 - \frac{i\lambda}{\hbar}\sum_l \int_{t_0}^t du\ \langle j|\, \hat{H}_1(u)\, |l\rangle\, e^{-i\omega_{lj}(u-t_0)}\gamma_l(u)\,. \tag{81}
$$

b) Escrevendo, $\gamma_j(t) = \sum_{n=0}^\infty \gamma_{nj}(t)\lambda^n$, numa série de potências em λ, e substituindo em ambos os lados da equação (81), obtemos a seguinte relação entre as diferentes ordens, para $n \geq 0$

$$
\gamma_{n+1\,j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_l \int_{t_0}^t du\ \langle j|\, \hat{H}_1(u)\, |l\rangle\, e^{-i\omega_{lj}(u-t_0)}\gamma_{nl}(u)\,, \tag{82}
$$

em que $\gamma_{0j}(t) = a_0^j$. Se agora $a_l^0 = \delta_{l,i}$, obtemos, substituindo esta identidade em (82), com $n = 0$

$$\gamma_{1j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} du\ \langle j|\, \hat{H}_1(u)\, |i\rangle\, e^{-i\omega_{ij}(u-t_0)}\,. \tag{83}$$

c*) A equação (82), com $n = 1$, fica

$$\gamma_{2\,j}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_l \int_{t_0}^{t} du\ \langle j|\, \hat{H}_1(u)\, |l\rangle\, e^{-i\omega_{lj}(u-t_0)}\gamma_{1l}(u)\,. \tag{84}$$

Substituindo agora $\gamma_{1l}(u)$ tal como é dado pela equação (83), na equação (84), obtemos

$$\gamma_{2\,j}(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\sum_l \int_{t_0}^{t} du \int_{t_0}^{u} dv\ \langle j|\, \hat{H}_1(u)\, |l\rangle\, e^{-i\omega_{lj}(u-t_0)}\ \langle l|\, \hat{H}_1(v)\, |i\rangle\, e^{-i\omega_{il}(v-t_0)}\,. \tag{85}$$

Definindo agora $\hat{H}_1^{\text{int}}(u) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 u}\hat{H}_1(u)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 u}$ e $\hat{H}_1^{\text{int}}(v) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 v}\hat{H}_1(v)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 v}$, a perturbação na representação de interação, é fácil ver que $\langle j|\, \hat{H}_1(u)\, |l\rangle\, e^{-i\omega_{lj}u} = \langle j|\, \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\, |l\rangle$ e $\langle l|\, \hat{H}_1(v)\, |i\rangle\, e^{-i\omega_{il}v} = \langle l|\, \hat{H}_1^{\text{int}}(v)\, |i\rangle$, pelo que, substituindo acima, obtemos

$$\gamma_{2\,j}(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\sum_l \int_{t_0}^{t} du \int_{t_0}^{u} dv\ \langle j|\, \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\, |l\rangle\, \langle l|\, \hat{H}_1^{\text{int}}(v)\, |i\rangle\, e^{i\omega_{ij}t_0}\,. \tag{86}$$

Utilizando agora a relação de completude dos estados, $\sum_l |l\rangle\langle l| = \hat{\mathbb{1}}$, fica

$$\gamma_{2j}(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} du \int_{t_0}^{u} dv\, \langle j|\, \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v)\, |i\rangle\, e^{i\omega_{ij}t_0}\,. \tag{87}$$

d*) Note-se que para $j \neq i$, $|\gamma_j(t)|^2$ já é de segunda ordem em λ se incluirmos apenas a contribuição de $\gamma_{1j}(t)$ para esta quantidade. No entanto, para $j = i$, temos

$$\gamma_i(t) \;=\; 1 - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_{t_0}^{t} du\ \langle i|\, \hat{H}_1(u)\, |i\rangle - \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} du \int_{t_0}^{u} dv\, \langle i|\, \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v)\, |i\rangle, \tag{88}$$

pelo que será necessário manter todos os termos até λ^2 quando calcularmos o módulo quadrado desta quantidade. Obtemos

$$\begin{aligned}
|\gamma_i(t)|^2 \;=\; & 1 - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_{t_0}^{t} du\ \langle i|\, \hat{H}_1(u)\, |i\rangle + \frac{i\lambda}{\hbar}\int_{t_0}^{t} du\, \overline{\langle i|\, \hat{H}_1(u)\, |i\rangle} \\
& + \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t} du\ \langle i|\, \hat{H}_1(u)\, |i\rangle\right|^2 \\
& - \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} du \int_{t_0}^{u} dv\, \langle i|\, \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v)\, |i\rangle \\
& - \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} du \int_{t_0}^{u} dv\, \overline{\langle i|\, \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v)\, |i\rangle}.
\end{aligned} \tag{89}$$

Uma vez que $\overline{\langle i|\, \hat{H}_1(u)\, |i\rangle} = \langle i|\, \hat{H}_1(u)\, |i\rangle$ (a perturbação é representada por um operador hermítico), o terceiro termo desta equação cancela o segundo. Podemos agora escrever o último termo desta equação, utilizando a propriedade do integral $\int_{t_0}^{t} du \int_{t_0}^{u} dv f(u,v) =$

$\int_{t_0}^t dv \int_v^t du f(u,v) = \int_{t_0}^t du \int_u^t dv f(v,u)$, onde $f(u,v)$ é função genérica de duas variáveis, como $\int_{t_0}^t du \int_{t_0}^u dv \overline{\langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v) |i\rangle} = \int_{t_0}^t du \int_u^t dv \overline{\langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(v)\hat{H}_1^{\text{int}}(u) |i\rangle}$. Utilisando ainda a propriedade, $\overline{\langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(v)\hat{H}_1^{\text{int}}(u) |i\rangle} = \langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v) |i\rangle$, verificamos que

$$\int_{t_0}^t du \int_{t_0}^u dv \overline{\langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v) |i\rangle} = \int_{t_0}^t du \int_u^t dv \ \langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v) |i\rangle \,.$$

Substituindo acima, obtém-se

$$\begin{aligned} |\gamma_i(t)|^2 &= 1 + \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t du \ \langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u) |i\rangle \right|^2 \\ &\quad - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t du \int_{t_0}^t dv \, \langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v) |i\rangle \,, \end{aligned} \tag{90}$$

que é verdadeiro até ordem λ^2, e onde usamos a identidade, $\langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u) |i\rangle = \langle i| \hat{H}_1(u) |i\rangle$. Podemos ainda escrever, para $j \neq i$

$$|\gamma_j(t)|^2 = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t du \ \langle j| \hat{H}_1^{\text{int}}(u) |i\rangle \right|^2 \,, \tag{91}$$

como referimos acima, de modo que temos, até à ordem λ^2

$$\begin{aligned} \sum_j |\gamma_j(t)|^2 &= 1 + \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_j \left| \int_{t_0}^t du \ \langle j| \hat{H}_1^{\text{int}}(u) |i\rangle \right|^2 \\ &\quad - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t du \int_{t_0}^t dv \, \langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v) |i\rangle \\ &= 1 + \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t du \int_{t_0}^t dv \sum_j \langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u) |j\rangle \langle j| \hat{H}_1^{\text{int}}(v) |i\rangle \\ &\quad - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t du \int_{t_0}^t dv \, \langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u)\hat{H}_1^{\text{int}}(v) |i\rangle \\ &= 1, \end{aligned} \tag{92}$$

onde fizemos uso de $\overline{\langle j| \hat{H}_1^{\text{int}}(u) |i\rangle} = \langle i| \hat{H}_1^{\text{int}}(u) |j\rangle$, e da relação de completude.