Física Quântica I / Mecânica Quântica

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 11

Exemplo de dinâmica no tempo: precessão de spin num campo magnético

Sumário sobre spin 1/2

Representação da esfera de Bloch

Acoplamento a um campo magnético constante

Evolução temporal do vetor de estado

Constantes de movimento

Valores esperados quânticos e a descrição clássica

Cálculo via operador de evolução

Descrição dos estados de spin (resumo)

Interpretação das experiências de S-G

- O spin é um grau de liberdade interno, não orbital.
- Manifesta-se fisicamente através do mom. magnético associado:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{g|\mu_B|}{\hbar}\boldsymbol{\mathcal{S}}.$$

- A projeção de $\boldsymbol{\mathcal{S}}$ segundo qualquer direção é quantizada:

$$\boldsymbol{\mathcal{S}} \cdot \boldsymbol{u} \longrightarrow \pm\hbar/2.$$

- Representação matricial de uma projeção de spin:

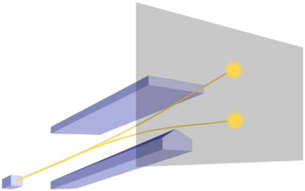
$$\hat{\mathrm{S}} \cdot \boldsymbol{u} \mapsto \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{u}, \qquad \hat{\mathrm{S}}_{x,y,z} \mapsto \frac{\hbar}{2}\sigma_{x,y,z}.$$

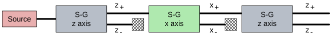
- Através de um seletor SG podemos preparar um estado definido de spin a "apontar" segundo qualquer direção $\boldsymbol{u}$ pretendida:

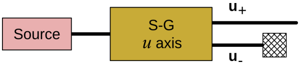
$$|+\rangle_{\boldsymbol{u}} = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle_z.$$

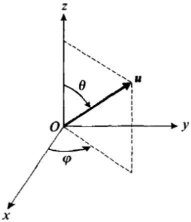
- Apenas uma projeção de spin pode ser conhecida.
- Projeções distintas são incompatíveis entre si porque

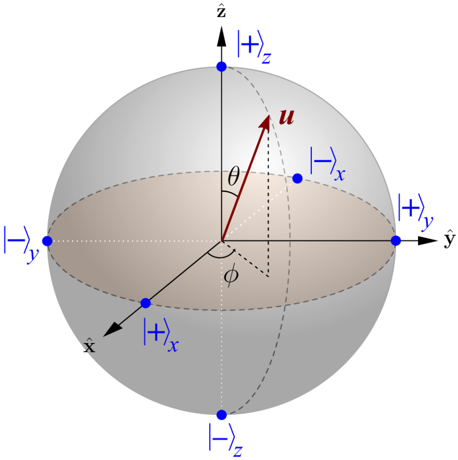
$$[\hat{\mathrm{S}}_\alpha, \hat{\mathrm{S}}_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\mathrm{S}}_\gamma.$$











Direção dada pelo vetor unitário (espaço real):

$$\boldsymbol{u} = \sin\theta\cos\phi\,\hat{\mathbf{x}} + \sin\theta\sin\phi\,\hat{\mathbf{y}} + \cos\theta\,\hat{\mathbf{z}}.$$

Vetor do estado quântico (espaço de estados):

$$|+\rangle_{\boldsymbol{u}} = \cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}\,e^{i\phi}\,|-\rangle_z.$$

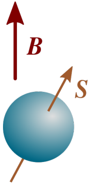
(representa o spin apontando na direção de $\boldsymbol{u}$.)

Por definição, é o auto-estado “positivo” de $\hat{\mathbf{S}}\cdot\boldsymbol{u}$:

$$(\hat{\mathbf{S}}\cdot\boldsymbol{u})\,|+\rangle_{\boldsymbol{u}} = +\frac{\hbar}{2}\,|+\rangle_{\boldsymbol{u}}.$$

Acoplamento a um campo magnético constante

Hamiltoniano de interação de um spin com um campo magnético $\boldsymbol{B}$ constante:



$$\hat{\mathrm{H}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{B} = \frac{g|\mu_B|}{\hbar}\,\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{B} = \frac{g|\mu_B|}{\hbar}\,(\hat{\mathrm{S}}_x B_x + \hat{\mathrm{S}}_y B_y + \hat{\mathrm{S}}_z B_z).$$

Alternativamente, se escrevermos $\boldsymbol{B} = B\,\boldsymbol{n}$ ($\boldsymbol{n}$ um vetor unitário),

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{g|\mu_B|B}{\hbar}\,\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{n} = \omega_0\,\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{n}, \qquad \omega_0 \equiv \frac{g|\mu_B|B}{\hbar} \quad \text{(frequência Larmor).}$$

Primeiro exemplo – para ser concreto, suponhamos que

$$\boldsymbol{B} = B\,\hat{\mathbf{z}} \qquad \text{e então} \qquad \hat{\mathrm{H}} = \omega_0\,\hat{\mathrm{S}}_z.$$

Como varia (no tempo) o vetor de estado genérico

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_{\boldsymbol{u}} = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle_z\ ?$$

Prescrição geral para a evolução temporal do vetor de estado (Lição 10)

1. Determinar os auto-estados e valores próprios do Hamiltoniano:
$$\hat{\mathrm{H}}\,|\varepsilon_n\rangle = E_n\,|\varepsilon_n\rangle.$$
2. Aplicar a dependência temporal seguindo
$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle\varepsilon_n|\psi(t_0)\rangle\, e^{-i\,E_n(t-t_0)/\hbar}\,|\varepsilon_n\rangle.$$

1. Auto-estados e valores próprios de $\hat{\mathrm{H}}$

Como $\hat{\mathrm{H}} = \omega_0\, \hat{\mathrm{S}}_z$, então o espetro e os auto-estados são

$$\hat{\mathrm{H}}\,|\varepsilon_n\rangle = E_n\,|\varepsilon_n\rangle \quad\longrightarrow\quad E_\pm = \pm\frac{\hbar\omega_0}{2}, \qquad |\varepsilon_+\rangle = |+\rangle_z, \quad |\varepsilon_-\rangle = |-\rangle_z.$$

2. Dependência temporal de $|\psi(t)\rangle$

Dado então o vetor de estado inicial a $t = 0$,

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_{\boldsymbol{u}} = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle_z,$$

teremos

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \sum_n \langle\varepsilon_n|\psi(0)\rangle\, e^{-i\,E_n(t-t_0)/\hbar}\,|\varepsilon_n\rangle = \langle\varepsilon_+|\psi(0)\rangle\, e^{-i\,E_+ t/\hbar}\,|\varepsilon_+\rangle + \langle\varepsilon_-|\psi(0)\rangle\, e^{-i\,E_- t/\hbar}\,|\varepsilon_-\rangle \\
&= {}_z\langle+|+\rangle_{\boldsymbol{u}}\; e^{-i\,\omega_0 t/2}\;|+\rangle_z + {}_z\langle-|+\rangle_{\boldsymbol{u}}\; e^{+i\,\omega_0 t/2}\;|-\rangle_z \\
&= \cos\frac{\theta}{2}\; e^{-i\omega_0 t/2}\;|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}\; e^{i\varphi}\; e^{i\omega_0 t/2}\;|-\rangle_z \\
&= e^{-i\omega_0 t/2}\left[\cos\frac{\theta}{2}\;|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}\; e^{i(\varphi+\omega_0 t)}\;|-\rangle_z\right].
\end{aligned}$$

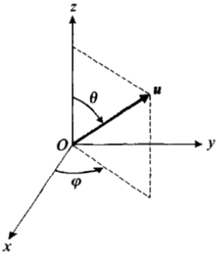
Precessão de Larmor (exemplo 1)

Como interpretar o que está a acontecer com o spin em função do tempo?

$$|\psi(t)\rangle = \cancel{e^{-i\omega_0 t/2}} \left[\cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}\,e^{i(\varphi+\omega_0 t)}\,|-\rangle_z\right]$$

Se definirmos $\tilde{\varphi}(t) \equiv \varphi + \omega_0 t$, re-escrevemos

$$|\psi(t)\rangle = \cos\tfrac{\theta}{2}\,|+\rangle_z + \sin\tfrac{\theta}{2}\,e^{i\,\tilde{\varphi}(t)}\,|-\rangle_z$$



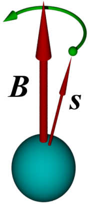
Ou seja:

- O ângulo polar θ (do spin com $\hat{\mathbf{z}}$) permanece fixo.
- O ângulo azimutal φ varia com o tempo segundo

$$\varphi \quad \to \quad \tilde{\varphi}(t) = \varphi + \omega_0 t.$$

- O spin precessa em torno de $\boldsymbol{B}$.
- A frequência de precessão é constante:

$$\omega_0 = \frac{g\mu_B B}{\hbar} \qquad \text{(frequência de Larmor)}$$



Evolução temporal do vetor de estado (exemplo 2)

Segundo exemplo – suponhamos agora que $\boldsymbol{B} = B\,\hat{\mathbf{x}}$

$$\hat{\mathrm{H}} = \omega_0\,\hat{\mathrm{S}}_x.$$

1. Auto-estados e valores próprios de $\hat{\mathrm{H}}$

Analogamente ao exemplo anterior,

$$\hat{\mathrm{H}}\,|\varepsilon_n\rangle = E_n\,|\varepsilon_n\rangle \quad\longrightarrow\quad E_\pm = \pm\frac{\hbar\omega_0}{2}, \qquad |\varepsilon_\pm\rangle = |\pm\rangle_x = \tfrac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle_z \pm \tfrac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_z.$$

2. Dependência temporal de $|\psi(t)\rangle$

Dado o vetor de estado inicial a $t = 0$,

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_{\boldsymbol{u}} = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle_z,$$

teremos agora

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \langle\varepsilon_+|\psi(0)\rangle\; e^{-i\,E_+t/\hbar}\;|\varepsilon_+\rangle + \langle\varepsilon_-|\psi(0)\rangle\; e^{-i\,E_-t/\hbar}\;|\varepsilon_-\rangle \\
&= {}_x\langle+|+\rangle_{\boldsymbol{u}}\; e^{-i\,\omega_0 t/2}\;|+\rangle_x + {}_x\langle-|+\rangle_{\boldsymbol{u}}\; e^{+i\,\omega_0 t/2}\;|-\rangle_x \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\tfrac{\theta}{2} + \sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right)e^{-i\omega_0 t/2}\;|+\rangle_x + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\tfrac{\theta}{2} - \sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right)e^{i\omega_0 t/2}\;|-\rangle_x
\end{aligned}$$

Precessão de Larmor (exemplo 2)

Como interpretar neste caso o que está a acontecer com o spin?

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\tfrac{\theta}{2} + \sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right)e^{-i\omega_0 t/2}\,|+\rangle_x + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\tfrac{\theta}{2} - \sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right)e^{i\omega_0 t/2}\,|-\rangle_x$$

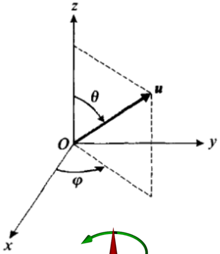
Poderíamos expandir $|\pm\rangle_x$ na base $|\pm\rangle_z$,

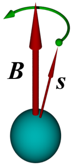
$$|\psi(t)\rangle = \left[\frac{1}{2}\left(\cos\tfrac{\theta}{2} + \sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right)e^{-i\omega_0 t/2} + \frac{1}{2}\left(\cos\tfrac{\theta}{2} - \sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right)e^{i\omega_0 t/2}\right]|+\rangle_z \;+\; \ldots$$

e, tal como no exemplo 1 atrás, deduzir o que acontece com a orientação do spin.

Mas basta-nos calcular $\langle\hat{\mathrm{S}}_x\rangle$ para percebermos:

$$\begin{aligned}
\langle\psi(t)|\hat{\mathrm{S}}_x|\psi(t)\rangle &= \frac{\hbar}{2}\,|{}_x\langle+|\psi(t)\rangle|^2 - \frac{\hbar}{2}\,|{}_x\langle-|\psi(t)\rangle|^2 \\
&= \frac{\hbar}{4}\left|\cos\tfrac{\theta}{2} + \sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right|^2 - \frac{\hbar}{4}\left|\cos\tfrac{\theta}{2} - \sin\tfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right|^2 \\
&= \left(\frac{\hbar}{2}\right)\cos\theta\cos\varphi \qquad \text{(constante no tempo)} \\
&= \langle\psi(0)|\hat{\mathrm{S}}_x|\psi(0)\rangle
\end{aligned}$$





O spin precessa em torno de $\boldsymbol{B}$, que neste caso é paralelo à direção $\hat{\mathbf{x}}$!

Constantes de movimento

Recordemos que, para qualquer observável $\hat{\mathrm{A}}$ (teorema de Ehrenfest, L7-4):

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathrm{A}}\rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\Big\langle[\hat{\mathrm{A}}(t),\hat{\mathrm{H}}(t)]\Big\rangle_\psi + \Big\langle\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathrm{A}}(t)\Big\rangle_\psi$$

e que essa observável será uma constante de movimento sempre que

- não depende explicitamente do tempo;
- comuta com o Hamiltoniano do sistema.

No primeiro exemplo acima de um spin sob influência de um campo constante $\boldsymbol{B} = B\,\hat{\mathbf{z}}$:

- $\hat{\mathrm{H}} = \omega_0\,\hat{\mathrm{S}}_z$;
- $\hat{\mathrm{H}}$ é independente do tempo: $\partial\hat{\mathrm{H}}/\partial t = 0$;
- $[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{S}}_z] = \omega_0[\hat{\mathrm{S}}_z,\hat{\mathrm{S}}_z] = 0$;
- Logo, $\langle\hat{\mathrm{S}}_z\rangle$ é uma constante de movimento!

Podemos confirmar explicitamente que é verdade:

$$\langle\psi(t)|\hat{\mathrm{S}}_z|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i(\varphi+\omega_0 t)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i(\varphi+\omega_0 t)}\end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta \qquad \checkmark$$

E, no caso do segundo exemplo ($\boldsymbol{B} = B\,\hat{\mathbf{x}}$), a constante de movimento é $\langle\hat{\mathrm{S}}_x\rangle$, como já vimos.

Ainda no caso do primeiro exemplo ($\boldsymbol{B} = B\,\hat{\mathbf{z}}$), além da constante de movimento

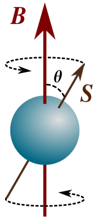
$$\langle \hat{\mathrm{S}}_z \rangle_\psi = \langle \psi(t) | \hat{\mathrm{S}}_z | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos\theta,$$

podemos verificar que o valor esperado das restantes componentes é fisicamente intuitivo:

$$\langle \psi(t) | \hat{\mathrm{S}}_x | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega_0 t)} \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sin\theta \cos(\varphi + \omega_0 t)$$

Em resumo:

$$\langle \psi(t) | \hat{\mathrm{S}}_x | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin\theta \cos(\varphi + \omega_0 t)$$
$$\langle \psi(t) | \hat{\mathrm{S}}_y | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin\theta \sin(\varphi + \omega_0 t)$$
$$\langle \psi(t) | \hat{\mathrm{S}}_z | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos\theta$$



Os $\langle \hat{\mathrm{S}}_{x,y,z} \rangle$ têm o comportamento que esperaríamos na precessão de um mom. magnét. clássico!

Na lição anterior aprendemos que podemos obter a dependência temporal através de

$$|\psi(t)\rangle = \hat{\mathrm{U}}(t,0)\,|\psi(0)\rangle, \qquad \hat{\mathrm{U}}(t,t_0) = e^{-i\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)/\hbar}$$

Qual a representação matricial de $\hat{\mathrm{U}}$ quando $\boldsymbol{B} = B\,\hat{\mathbf{x}}$?

$$\hat{\mathrm{H}} = \omega_0 \hat{\mathrm{S}}_x \quad \longrightarrow \quad \hat{\mathrm{U}}(t,0) = e^{-i\omega_0 \hat{\mathrm{S}}_x t/\hbar} \quad \xrightarrow{\hat{\mathrm{S}}_x \mapsto \frac{\hbar}{2}\sigma_x} \quad e^{-i\omega_0 \sigma_x t/2}.$$

Recordando que (L3-3 ou Folha de Problemas 1):

$$e^{i\,\alpha\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}} = \mathbf{1}\cos\alpha + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\sin\alpha \;\longrightarrow\; e^{-i\omega_0\sigma_x t/2} = \mathbf{1}\cos\left(\frac{\omega_0}{2}\,t\right) - i\sigma_x\,\sin\left(\frac{\omega_0}{2}\,t\right) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\omega_0 t}{2} & -i\sin\frac{\omega_0 t}{2} \\ -i\sin\frac{\omega_0 t}{2} & \cos\frac{\omega_0 t}{2} \end{bmatrix}$$

Portanto, partindo de

$$|\psi(0)\rangle = \cos\tfrac{\theta}{2}\,|+\rangle_z + \sin\tfrac{\theta}{2}\,e^{i\varphi}\,|-\rangle_z \quad \xrightarrow[\text{matricial}]{\text{repres.}} \quad \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix} \qquad (\text{na base } \{|+\rangle_z, |-\rangle_z\})$$

obtemos o vetor de estado no instante t através do produto

$$\hat{\mathrm{U}}(t,0)|\psi(0)\rangle \quad \mapsto \quad \begin{bmatrix} \cos\frac{\omega_0 t}{2} & -i\sin\frac{\omega_0 t}{2} \\ -i\sin\frac{\omega_0 t}{2} & \cos\frac{\omega_0 t}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\omega_0 t}{2} - i\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\omega_0 t}{2}e^{i\varphi} \\ -i\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\omega_0 t}{2} + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\omega_0 t}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$

...que é resultado que obtivemos atrás na pág. L11-7, quando expresso na base $\{|+\rangle_z,\ |-\rangle_z\}$.