

Física Quântica II

Soluções

Exercício 11: *Diagonalização do Hamiltoniano para um sistema a dois níveis e probabilidades de medição num estado singlete de 2 spins 1/2.*

Escrevemos o Hamiltoniano de um sistema a dois níveis como

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma^* \\ \gamma & \beta \end{pmatrix}, \quad (46)$$

que é a forma genérica de um operador hermítico num espaço de Hilbert a duas dimensões, e onde as constantes reais α e β e a constante complexa, $\gamma = \gamma_R + i\gamma_I$, são genéricas.

a) Escrevemos \hat{H} como

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \gamma_R \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \gamma_I \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Definindo agora $A = \frac{1}{2}(\alpha + \beta)$, $B = \sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2}{4} + \gamma_R^2 + \gamma_I^2}$, $\hat{n}_x = \frac{\gamma_R}{\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2}{4} + \gamma_R^2 + \gamma_I^2}}$, $\hat{n}_y = \frac{\gamma_I}{\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2}{4} + \gamma_R^2 + \gamma_I^2}}$ e $\hat{n}_z = \frac{\alpha - \beta}{2\sqrt{\frac{(\alpha - \beta)^2}{4} + \gamma_R^2 + \gamma_I^2}}$, podemos finalmente escrever

$$\hat{H} = A\hat{1} + B(\hat{n} \cdot \hat{\sigma}),$$

que é o resultado desejado. É imediato verificar que se tem igualmente $\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2 = 1$, ou seja, \hat{n} é um vetor unitário.

Este exercício mostra que a diagonalização de qualquer operador no espaço de Hilbert bidimensional se reduz à diagonalização de $\hat{n} \cdot \hat{\sigma}$.

b) Vimos no exercício 6, que $(\hat{n} \cdot \hat{\sigma})^2 = \hat{1}$. Escrevendo, $\hat{n}_x = \sin \theta \cos \varphi$, $\hat{n}_y = \sin \theta \sin \varphi$ e $\hat{n}_z = \cos \theta$ (parametrização em termos de coordenadas esféricas, na esfera unitária ou de Bloch, e em que θ e φ são determinados em função de α , β , γ_R e γ_I), podemos escrever o operador $\hat{n} \cdot \hat{\sigma}$ na forma matricial como

$$\hat{n} \cdot \hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (48)$$

A equação secular correspondente ao problema de valores próprios para esta matriz é dada por $\det(\hat{n} \cdot \hat{\sigma} - \lambda \hat{1}) = \lambda^2 - 1 = 0$, logo os valores próprios desta matriz são $+1$ e -1 , o que simplesmente reflete a isotropia do espaço, como notamos acima no problema 6.

Conhecidos os valores próprios, os vectores próprios obedecem à equação matricial

$$\begin{pmatrix} \cos \theta \mp 1 & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \mp 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_{\pm} \\ \beta_{\pm} \end{pmatrix} = \hat{0}, \quad (49)$$

que tem, respetivamente, as soluções $\beta_+ = \tan \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \alpha_+$ e $\beta_- = -\cot \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \alpha_-$.

Como $|\alpha_{\pm}|^2 + |\beta_{\pm}|^2 = 1$, já que os dois estados estão normalizados, obtemos

$$|+, \hat{n}\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} |-\rangle, \quad (50)$$

$$|-, \hat{n}\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} |-\rangle, \quad (51)$$

onde $|+\rangle$ e $|-\rangle$ são os estados próprios com valor próprio $+1$ e -1 , respetivamente, de $\hat{\sigma}_z$.

c) Temos, com $\nu, \mu = \pm 1$, $\hat{P}_{\hat{n}}(\nu) | \mu, \hat{n} \rangle = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \nu \hat{n} \cdot \hat{\sigma}) | \mu, \hat{n} \rangle = \frac{1}{2}(1 + \nu\mu) | \mu, \hat{n} \rangle = \delta_{\nu\mu} | \mu, \hat{n} \rangle$, a equação obtida no exercício 8 para um projetor, neste caso num espaço bidimensional, já que $\hat{n} \cdot \hat{\sigma} | \mu, \hat{n} \rangle = \mu | \mu, \hat{n} \rangle$.

d) Para um estado singleto de dois spins $1/2$, que escrevemos como $|\Psi\rangle$ (ver exercício 7), temos simplesmente que a probabilidade de medir a componente do primeiro spin ao longo do eixo \hat{n}^1 e obter $\nu^1 = \pm 1$, e medir a componente do segundo spin ao longo do eixo \hat{n}^2 e obter $\nu^2 = \pm 1$, é dada por (ver exercício 8), $p_{\hat{n}^1 \hat{n}^2}(\nu^1, \nu^2) = \langle \Psi | \hat{P}_{\hat{n}^1}(\nu^1) \hat{P}_{\hat{n}^2}(\nu^2) | \Psi \rangle$, com $\hat{P}_{\hat{n}^1}(\nu^1) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \nu^1 \hat{n}^1 \cdot \hat{\sigma}^1)$ e $\hat{P}_{\hat{n}^2}(\nu^2) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \nu^2 \hat{n}^2 \cdot \hat{\sigma}^2)$, donde obtemos, utilizando os resultados dos exercício 7, $p_{\hat{n}^1 \hat{n}^2}(\nu^1, \nu^2) = \frac{1}{4}[1 - \nu^1 \nu^2 (\hat{n}^1 \cdot \hat{n}^2)]$ (normalizamos as componentes de cada spin a $\hbar/2$, de modo que o que medimos são os valores próprios das matrizes de Pauli).

e) Se os eixos forem paralelos, i.e. $\hat{n}^1 = \hat{n}^2$, $p_{\hat{n}^1 \hat{n}^1}(\nu^1, \nu^2) = \frac{1}{4}[1 - \nu^1 \nu^2 (\hat{n}^1 \cdot \hat{n}^1)] = \frac{1}{4}(1 - \nu^1 \nu^2)$, logo se $\nu^1 = \nu^2$, $p_{\hat{n}^1 \hat{n}^1}(\nu^1, \nu^1) = 0$.

Isto significa que a probabilidade de medir os mesmos valores para a componente de cada spin ao longo desse eixo é sempre nula.

Ou seja, se num contexto experimental medirmos a componente do primeiro (resp. segundo) spin ao longo de um eixo, sabemos que uma medição da mesma componente do segundo (resp. primeiro) spin dará sempre o resultado oposto.

O critério de realidade de EPR (Einstein, Podolsky e Rosen) define que se é possível prever com probabilidade 1 o valor da medição de uma dada quantidade física, então existe um elemento de realidade associado a essa quantidade.

Nesse sentido, podemos dizer que existe esse elemento de realidade associado a qualquer componente do momento angular total do sistema de dois spins (ela é sempre nula), mas veremos na próxima folha de exercícios que tal já não pode ser afirmado relativamente às componentes de cada spin separadamente, porque de outro modo uma desigualdade (dita de Bell) que iremos derivar não seria violada, e é-o pela Mecânica Quântica (e pela realidade que nos rodeia, já que as experiências confirmam que as previsões da Mecânica Quântica estão corretas, experiências essas que foram galardoadas com o Prémio Nobel da Física de 2022).

f) A probabilidade $p_{\hat{n}^1}(\nu^1)$ de medir um dado valor ν^1 ao longo do eixo \hat{n}^1 é simplesmente dada por $p_{\hat{n}^1}(\nu^1) = \sum_{\nu^2=\pm 1} p_{\hat{n}^1 \hat{n}^2}(\nu^1, \nu^2) = \frac{1}{4} \sum_{\nu^2=\pm 1} [1 - \nu^1 \nu^2 (\hat{n}^1 \cdot \hat{n}^2)] = 1/2$, ou seja, a probabilidade de medir a componente do primeiro spin igual a $+1$ ou -1 ao longo de um eixo arbitrário é $1/2$, se a medição sobre o segundo spin não for realizada (ou se não conhecermos o seu resultado).

Note que este resultado é independente do eixo \hat{n}^2 , pelo que não obtemos qualquer informação sobre a medição efectuada no segundo spin efectuando apenas uma medida sobre o primeiro, qualquer que seja o eixo \hat{n}^1 segundo o qual efectuamos essa medida.

Isto significa em particular que se os dois elementos do singlete forem separados e dois observadores a grande distância um do outro efectuarem medidas sobre cada um dos respectivos spins ao longo de eixos arbitrários, eles não poderão obter qualquer informação sobre a orientação escolhida pelo outro observador ou sobre o valor obtido nessa medição (*no-signaling condition*).

Exercício 12: *Correções anarmónicas à energia do estado fundamental de um OH*

A correção anarmónica em primeira ordem à energia no estado fundamental é simplesmente dada pelo valor expectável, $E_{10} = \frac{C}{4!} \langle 0 | \hat{x}^4 | 0 \rangle$, da perturbação neste estado. Só precisamos de substituir $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger)$ nesta expressão, obtendo

$$\begin{aligned}
 E_{10} &= \frac{C}{4!} \langle 0 | \hat{x}^4 | 0 \rangle \\
 &= \frac{C\hbar^2}{96m^2\omega_0^2} \langle 0 | (\hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger)^4 | 0 \rangle \\
 &= \frac{C\hbar^2}{96m^2\omega_0^2} \langle 1 | (\hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger)^2 | 1 \rangle \\
 &= \frac{C\hbar^2}{96m^2\omega_0^2} \langle 1 | \hat{a}_0^2 + 2\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0 + \hat{1} + (\hat{a}_0^\dagger)^2 | 1 \rangle \\
 &= \frac{C\hbar^2}{96m^2\omega_0^2} \langle 1 | 2\hat{n}_0 + \hat{1} | 1 \rangle \\
 &= \frac{C\hbar^2}{32m^2\omega_0^2}, \tag{52}
 \end{aligned}$$

onde utilizamos as identidades $\hat{a}_0 | 0 \rangle = 0$, $\hat{a}_0^\dagger | 0 \rangle = | 1 \rangle$, $\langle 0 | \hat{a}_0^\dagger = 0$, $\langle 0 | \hat{a}_0 = \langle 1 |$, assim como as relações de comutação para os operadores de destruição e criação, e a definição $\hat{n}_0 = \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0$, do operador número de ocupação.

Exercício 13: *Interação hiperfina em iões hidrogenóides*

O termo de contacto de Fermi da interação hiperfina entre o spin do electrão e o núcleo de carga $+Ze$ de um ião hidrogenóide (carga $+(Z-1)e$) é dado por

$$\hat{H}_{\text{hyp}} = \frac{Ze^2 g_N}{3\varepsilon_0 M_N m c^2} \delta^3(\mathbf{r}) (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{I}}), \tag{53}$$

onde ε_0 é a permissividade do vazio, c a velocidade da luz, m a massa do electrão e M_N a do núcleo, enquanto g_N é o factor de Landé do dito núcleo. O operador $\hat{\mathbf{S}}$ é o operador de spin do electrão e $\hat{\mathbf{I}}$ é o operador do momento angular do núcleo (para $Z > 1$, este pode ser caracterizado por um número quântico, $i > 1/2$). A função delta assegura que só estados s veem a sua energia modificada por esta interação.

Consideramos a função de onda conjunta para o estado $1s$ do electrão, o seu spin e o momento angular nuclear, como sendo dada por $\psi_{n=1,l=0,m=0}(\mathbf{r}) \otimes |s, m_s\rangle \otimes |i, m_i\rangle$, em que $\psi_{n=1,l=0,m=0}(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}}$ é a parte orbital desta função, sendo que $a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{mZe^2}$ é o raio de Bohr para este ião.

Dado que a projecção do momento angular nuclear caracterizado pelo número quântico i ao longo do eixo dos z pode tomar $2i + 1$ valores, $|m_i| \leq i$, e a projecção do spin electrónico ao longo de z pode tomar dois valores $m_s = \pm 1/2$, a degenerescência dos estados na ausência da perturbação é igual a $4i + 2$.

No entanto, vemos que a perturbação é diagonal na base que diagonaliza o quadrado do momento angular total, $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{S}}$, assim como a sua projecção segundo o eixo dos z , ou seja, os operadores $\hat{\mathbf{F}}^2$ e \hat{F}_z . Esta é a base $|f m_f, i s\rangle$, cujos estados próprios e valores próprios determinamos no problema 5, ou seja, os estados próprios deste problema são simplesmente as funções de onda $\psi_{n=1, l=0, m=0}(\mathbf{r}) |f m_f, i s\rangle$.

Como $f = i \pm 1/2$, temos para a correcção à energia em primeira ordem

$$\begin{aligned} E_{1f=i\pm 1/2} &= \frac{Ze^2 g_N}{6\epsilon_0 M_N m c^2} \langle f m_f, i s | (\hat{\mathbf{F}}^2 - \hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) | f m_f, i s \rangle \int d^3 r \delta^3(\mathbf{r}) |\psi_{n=1, l=0, m=0}(\mathbf{r})|^2 \\ &= \frac{Ze^2 g_N \hbar^2}{6\pi\epsilon_0 M_N m c^2 a_B^3} [\pm (i + 1/2) - 1/2] . \end{aligned} \quad (54)$$

O splitting hiperfino entre os níveis de energia do sistema é dado por $\Delta E_{\text{hyp}} = E_{1f=i+1/2} - E_{1f=i-1/2} = \frac{8\pi g_N E_{1s}^2}{3M_N c^2} (2i + 1)$, onde $E_{1s} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 a_B}$ é a energia do nível $1s$ do ião.

É fácil perceber porque podemos aplicar a teoria de perturbações, já que o resultado anterior é da ordem do módulo da energia do estado fundamental $|E_{1s}|$, multiplicado pelo fator $|E_{1s}|/(M_N c^2) \ll 1$, já que o denominador desta expressão é a massa-energia do núcleo em repouso, e a aproximação é tanto melhor quanto mais massivo for o núcleo em questão.