

Aplicações dos Postulados da Mecânica Quântica Para Simples Casos: Sistema de Spin 1/2 e de Dois Níveis

Bruno Felipe Venancio

28 de abril de 2014

1 Partícula de Spin 1/2: Quantização do Momento Angular

1.1 A Experiência de Stern-Gerlach e o Spin do Elétron

A medida dos possíveis valores das componentes do momento angular dos elétrons de um átomo foi realizada pela primeira vez em 1922 por O. Stern e W. Gerlach. Em seu experimento Stern e Gerlach exploraram a dinâmica do momento magnético formado por átomos de prata na presença de um campo magnético externo não uniforme.

Na Fig. (1) temos a descrição do aparato experimental, onde E é um forno em alta temperatura que emite um feixe de átomos de prata, F é um colimador, em A temos um magneto que gera o campo externo não uniforme e em P temos a placa onde serão depositados os átomos após passarem pelo interior do campo.

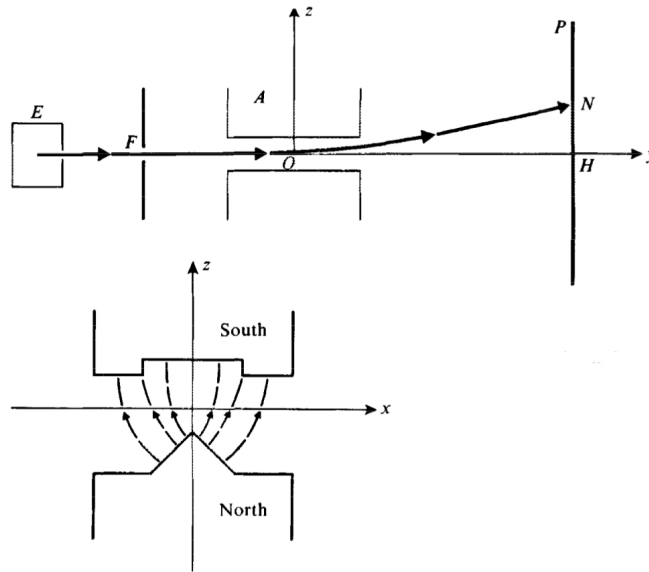


Figura 1: Aparato experimental da experiência de Stern-Gerlach.

Quando um dipolo magnético está sujeito a um campo magnético externo não uniforme seus polos ficam sujeitos a forças de intensidade distintas, Fig. (2). Assim, a força resultante sobre o átomo faz ele se deslocar na direção z no interior do campo magnético.

A energia potencial associada a um corpúsculo com momento de dipolo magnético $\vec{\mu}$ imerso em um campo magnético \vec{B} é dada por

$$U = \vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (1)$$

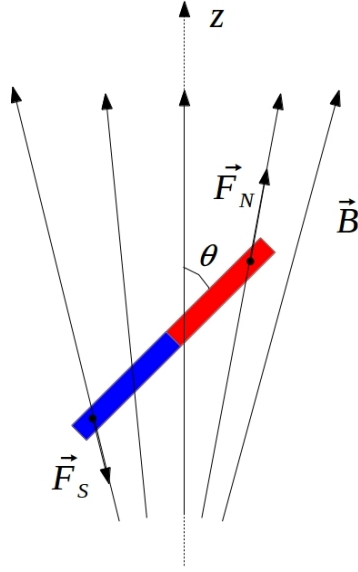


Figura 2: Comportamento de um dipolo magnético na presença de um campo magnético não uniforme.

Assim a força resultante sobre o corpúsculo pode ser obtida através de

$$\vec{F} = -\nabla U = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}). \quad (2)$$

Na região central do ímã podemos escrever:

$$F_z = \frac{\partial}{\partial z}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (3)$$

Para determinar o momento de dipolo magnético do átomo, vamos primeiro considerar um modelo clássico de um átomo de Bohr de um elétron de carga $-e$ e massa m em uma órbita circular de raio r , movendo-se com velocidade v , Fig. (3).

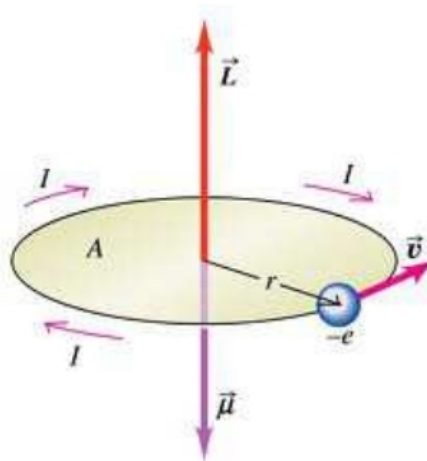


Figura 3: Esquema de um átomo de Bohr em uma órbita circular.

O elétron em movimento circular gera uma corrente elétrica de módulo I dada por

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r} \quad (4)$$

onde T é o período da órbita e $v = 2\pi r/T$. Do eletromagnetismo sabemos que uma corrente circular gera um campo magnético que a grande distâncias equivale a um campo magnético gerado por um dipolo magnético, $\vec{\mu}$, localizado no centro da órbita, como na Fig. (3).

Se a órbita circular tem área $A = \pi r^2$, então, o módulo do dipolo magnético será dado por

$$\mu = IA = I\pi r^2. \quad (5)$$

O momento angular do sistema é dado por

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m(\vec{r} \times \vec{v}). \quad (6)$$

Uma vez que \vec{r} e \vec{v} são perpendiculares entre si, a direção de \vec{L} é dada na Fig. (3). Observe que devido a carga negativa do elétron, seu momento de dipolo magnético e seu momento angular são antiparalelos, portanto

$$\vec{\mu} = -k\vec{L} \quad (7)$$

onde k é uma constante de proporcionalidade.

O módulo do momento angular é dado por

$$L = mrv \quad (8)$$

combinando as Eqs. (4) e (5), temos

$$v = \frac{2\mu}{er}. \quad (9)$$

Portanto $\mu = (e/2m)L$, ou seja,

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L}. \quad (10)$$

No experimento de Stern-Gerlach foram utilizados átomos de prata, pois sua configuração eletrônica é dada por

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10} 5s^1.$$

Uma vez que o momento angular total dos orbitais internos,

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10},$$

é zero, o átomo de prata pode ser aproximado para um átomo de um elétron, logo

$$F_z \approx \frac{\partial}{\partial z}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (11)$$

Como $\mu_z = -\frac{e}{2m}L \cos \theta$, então

$$F_z \approx -\frac{e}{2m}L \cos \theta \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (12)$$

Assim, segundo a teoria clássica, deveríamos observar uma mancha contínua na placa fotográfica, mas isso não ocorre, veja a Fig. (4).

Esses resultados indicam que deve haver algum momento magnético no átomo que não foi considerado. Se, como proposto por Bohr e Sommerfeld, o elétron possui um momento angular intrínseco \vec{S} , denominado de Spin, seu momento angular total será:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (13)$$

com

$$\vec{\mu}_s = -\frac{ge}{2m}\vec{S}, \quad (14)$$

onde g é o fator giromagnético, e no caso de elétrons $g = 1$.

Hoje, sabe-se que, a medida da componente S_z do momento angular intrínseco do elétron resulta em dois valores discretos, $\pm \frac{\hbar}{2}$; que o spin do elétron é uma propriedade puramente quântica que não tem nenhum análogo clássico, e é previsto à partir de um tratamento relativístico da teoria quântica de Schrödinger; e não podemos medir simultaneamente as três componentes de \vec{S} , (S_x , S_y e S_z), pois elas estão associados a operadores que não comutam entre si.

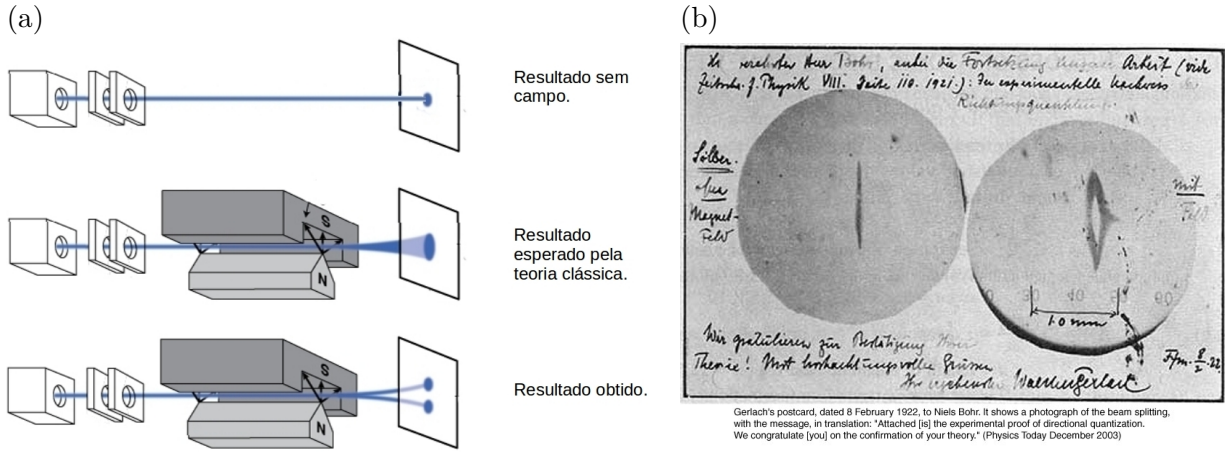


Figura 4: (a) Esquema dos resultados esperados e obtidos da experiência de Stern-Gerlach. (b) Postal enviado por Walther Gerlach a Niels Bohr em 8 de fevereiro de 1922, que mostra uma foto onde aparece a prata depositada na placa de vidro, após uma revelação (fotográfica), para os casos sem campo (esquerda) e com campo magnético (direita). Gerlach escreve: “Anexo [está] a prova experimental da quantização direcional. Nós felicitamos [você] pela confirmação de sua teoria”.

2 Descrição Teórica do Spin

2.1 O Observável S_z

A componente μ_z do momento magnético intrínseco do elétron associamos um observável S_z , tal que

$$S_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle. \quad (15)$$

com

$$\hat{1} = \sum_{\sigma=\pm} |\sigma\rangle\langle\sigma|, \quad (16)$$

$$\langle\sigma|\sigma'\rangle = \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (17)$$

O estado mais geral do elétron associado a seu Spin pode é dado por

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle, \quad (18)$$

com

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (19)$$

Na base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ S_z é representado por

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

2.2 Outros observáveis: S_x e S_y

Na base dos autovetores de S_z , $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ S_x e S_y , são representados por

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Vamos agora determinar os autovalores e autovetores dos observáveis S_x e S_y . Para S_x obtemos a seguinte equação característica

$$\det(S_x - \lambda \hat{1}) = 0, \quad (22)$$

onde

$$S_x - \lambda \hat{1} = \begin{pmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & \lambda \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Assim temos

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (24)$$

Para achar o autovalor associado ao autovetor $\lambda = +\frac{\hbar}{2}$, basta substituir o valor de λ na Eq. (23), e atuar sobre um vetor genérico dado na base de autovetores de S_z , e impor que o resultado seja zero. Assim temos

$$S_x - (+\hbar/2)\hat{1}|\psi\rangle = 0$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Da equação acima obtemos o seguinte sistema

$$\begin{cases} -\alpha + \beta = 0 \\ \alpha - \beta = 0 \end{cases} \quad (25)$$

cuja uma solução, que satisfaz a condição de normalização $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ é dada por $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$. O mesmo deve ser feito para o autovalor $\lambda = -\hbar/2$, neste caso obtemos $\alpha = -\beta = 1/\sqrt{2}$. Logo os autovetores associados aos autovalores do observável S_x , na base de autovetores de S_z são dados por.

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle \pm |-\rangle). \quad (26)$$

Para achar os autovalores e autovetores do observável S_y , devemos proceder da mesma forma, assim pode se mostrar que $\lambda = \pm\hbar/2$ e

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle \pm i|-\rangle). \quad (27)$$

2.3 Caso Geral: $S_{\vec{u}}$

Um observável genérico dado na direção do vetor \vec{u} , Fig. (5), $S_{\vec{u}}$ é dado por

$$S_{\vec{u}} = \vec{S} \cdot \vec{u} = S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta. \quad (28)$$

Matricialmente temos

$$S_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (29)$$

Seus autovalores são $\lambda = \pm\hbar/2$ e seus autovetores

$$|+\rangle_{\vec{u}} = \cos(\theta/2)e^{-i\varphi/2}|+\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\varphi/2}|-\rangle \quad (30)$$

$$|-\rangle_{\vec{u}} = -\sin(\theta/2)e^{-i\varphi/2}|+\rangle + \cos(\theta/2)e^{i\varphi/2}|-\rangle. \quad (31)$$

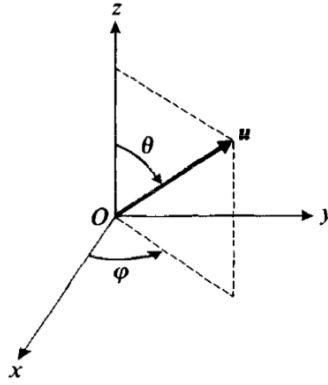


Figura 5: Representação do vetor \vec{u} em coordenadas cartesianas e esféricas.

3 Aplicação dos Postulados no Caso de um Spin 1/2

Vamos agora aplicar os postulados da mecânica quântica a um sistema de spin 1/2, para preparar o sistema em estados conhecidos e para realizar medidas das componentes do observável \vec{S} .

3.1 Preparando o Estado do Sistema

Para realizar experiências com o aparato de Stern-Gerlach, precisamos preparar o estado inicial do sistema. Podemos fazer isso adicionando magnetos no aparato original, pois eles funcionam como “filtros” dos estados associados as componentes do observável \vec{S} , veja a Fig. (6). Antes de passar pelos magnetos temos uma mistura de átomos nos mais variados estados associados as componentes de \vec{S} . Após passar pelos magnetos os átomos vão para estados bem definidos. Isso é decorrente do postulado da medida, pois ao passarem pelos magnetos os átomos sofrem um processo de medida de uma componente do observável \vec{S} . Assim, imediatamente após a medida o estado do sistema deve ser um auto estado do observável medido.

3.2 Realizando Medidas de Spin

Vamos discutir a realização de dois experimentos simples, descritos na Fig. (7). O primeiro consiste em passar o feixe de átomo de prata por dois magnetos na direção z , e o segundo consiste em passar por um magneto na direção $\vec{u}(\theta, \varphi = 0)$ e depois por um na direção z .

Observa-se que no primeiro caso, temos 100% de probabilidade de encontrar o sistema no autovalor $|+\rangle$, e no segundo temos $\cos^2 \theta/2$ para o estado $|+\rangle$ e $\sin^2 \theta/2$ para o estado $|-\rangle$. Além disso é fácil verificar que o valor médio de S_z para cada experiência é dado por:

- 1º experimento:

$$\langle S_z \rangle = \langle + | S_z | + \rangle = \langle + | + \rangle \frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{2}; \quad (32)$$

- 2º experimento: lembrando que para $\varphi = 0$, $|+\rangle_{\vec{u}} = \cos(\theta/2)|+\rangle + \sin(\theta/2)|-\rangle$,

Magnetos

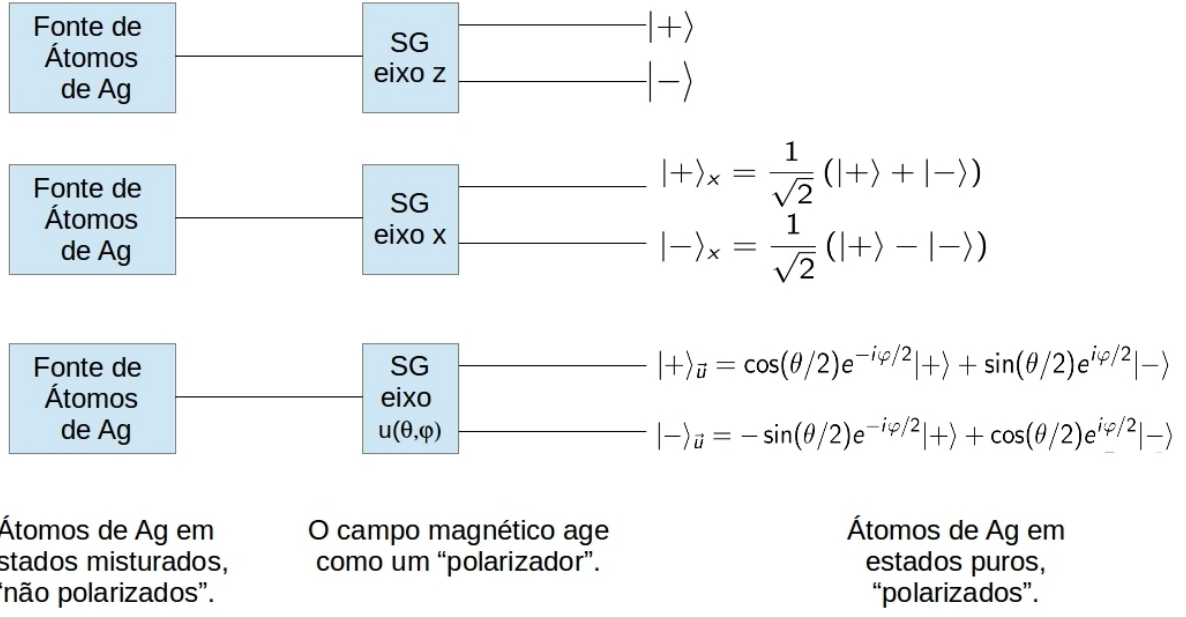


Figura 6: Aparato experimental para prepara o sistema em estado bem definidos.

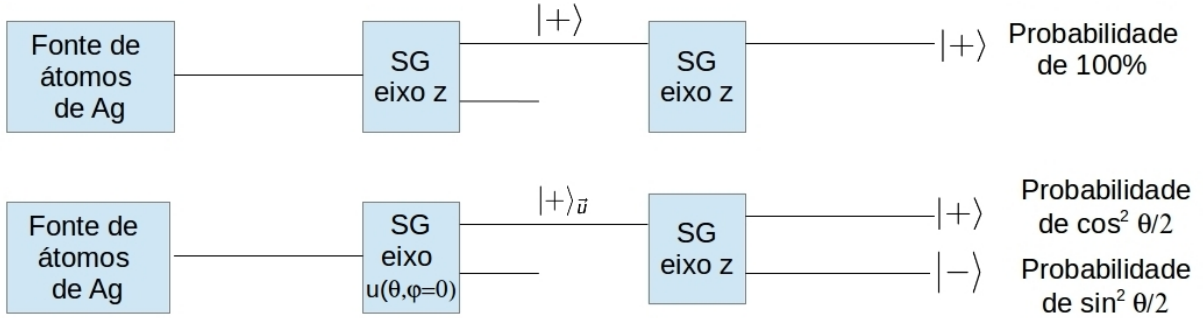


Figura 7: Experiencias derivadas do experimento de Stern-Gerlach.

$$\begin{aligned}
 \langle S_z \rangle &= \vec{u} \cdot \langle + | S_z | + \rangle \vec{u} \\
 \langle S_z \rangle &= (\cos(\theta/2) \langle + | + \rangle + \sin(\theta/2) \langle - | - \rangle) S_z (\cos(\theta/2) | + \rangle + \sin(\theta/2) | - \rangle) \\
 \langle S_z \rangle &= \cos^2(\theta/2) \langle + | S_z | + \rangle + \sin^2(\theta/2) \langle - | S_z | - \rangle + \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \left(\underbrace{\langle + | S_z | - \rangle}_{=\frac{\hbar}{2} \langle + \rangle - \langle - \rangle = 0} + \underbrace{\langle - | S_z | + \rangle}_{=\frac{\hbar}{2} \langle - \rangle + \langle + \rangle = 0} \right) \\
 \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} (\cos^2(\theta/2) \langle + | + \rangle - \sin^2(\theta/2) \langle - | - \rangle) \\
 \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \left(\underbrace{\cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2)}_{=\cos \theta} \right) \\
 \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta.
 \end{aligned} \tag{33}$$

3.3 Valor Médio S_i , $i = z, x, y$

O estado mais geral para representar o sistema é dado por

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle,$$

com

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Pode-se mostrar, que a menos de um fator de fase global, se

$$\cos \theta/2 = |\alpha|, \text{ e } \sin \theta/2 = |\beta|,$$

temos

$$|\psi\rangle = |+\rangle_{\vec{u}} = e^{-i\xi/2} \left(\cos(\theta/2)e^{-i\varphi/2}|+\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\varphi/2}|-\rangle \right). \quad (34)$$

Para S_z temos

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &=_{\vec{u}} \langle +|S_z|+ \rangle_{\vec{u}} \\ \langle S_z \rangle &= \left(\cos(\theta/2)e^{i\varphi/2}\langle +| + \sin(\theta/2)e^{-i\varphi/2}\langle -| \right) S_z \left(e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2)|+\rangle + \sin e^{i\varphi/2}(\theta/2)|-\rangle \right) \\ \langle S_z \rangle &= \cos^2(\theta/2)\langle +|S_z|+ \rangle + \sin^2(\theta/2)\langle -|S_z|-\rangle + \cos(\theta/2)\sin(\theta/2) \left(\underbrace{e^{i\varphi} \langle +|S_z|-\rangle}_{=\frac{\hbar}{2}|+\rangle - =0} + \underbrace{e^{-i\varphi} \langle -|S_z|+\rangle}_{=\frac{\hbar}{2}|-\rangle + =0} \right) \\ \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} (\cos^2(\theta/2)\langle +|+ \rangle - \sin^2(\theta/2)\langle -|-\rangle) \\ \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \left(\underbrace{\cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2)}_{=\cos \theta} \right) \\ \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta. \end{aligned} \quad (35)$$

Para calcular o valor médio de S_x e S_y em um estado genérico, precisamos saber qual é o resultado da ação dos operadores S_x e S_y nos autovetores de S_z . Assim temos para S_x

$$\begin{aligned} S_x|\pm\rangle &= S_x \hat{\mathbf{1}}_x |\pm\rangle \\ S_x|\pm\rangle &= S_x [\langle +|_x|+\rangle_x + \langle +|_x|-\rangle_x] |\pm\rangle \\ S_x|\pm\rangle &= \frac{\hbar}{2} \left[\frac{1}{2} (|+\rangle + |-\rangle) (\langle +| + \langle -|) - \frac{1}{2} (|+\rangle - |-\rangle) (\langle +| + \langle -|) \right] |\pm\rangle \\ S_x|\pm\rangle &= \frac{\hbar}{2} [|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|] |\pm\rangle \\ S_x|\pm\rangle &= \frac{\hbar}{2} [|+\rangle\langle -|\pm\rangle + |-\rangle\langle +|\pm\rangle] \\ S_x|\pm\rangle &= \frac{\hbar}{2} |\mp\rangle. \end{aligned} \quad (36)$$

Da mesma maneira, podemos calcular para S_y e obter o seguinte resultado

$$S_y|\pm\rangle = \pm \frac{i\hbar}{2} |\mp\rangle. \quad (37)$$

Logo, para S_x temos

$$\begin{aligned}
\langle S_x \rangle &= \vec{u} \langle +|S_x|+ \rangle \vec{u} \\
\langle S_x \rangle &= \left(\cos(\theta/2) e^{i\varphi/2} \langle +| + \sin(\theta/2) e^{-i\varphi/2} \langle -| \right) S_x \left(e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) |+\rangle + \sin e^{i\varphi/2}(\theta/2) |-\rangle \right) \\
\langle S_x \rangle &= \cos^2(\theta/2) \underbrace{\langle +|S_x|+ \rangle}_{=\frac{\hbar}{2} \langle +|- \rangle = 0} + \sin^2(\theta/2) \underbrace{\langle -|S_x|-\rangle}_{=\frac{\hbar}{2} \langle -|+ \rangle = 0} + \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \left(e^{i\varphi} \underbrace{\langle +|S_x|-\rangle}_{=\frac{\hbar}{2} \langle +|+ \rangle} + e^{-i\varphi} \underbrace{\langle -|S_x|+ \rangle}_{=\frac{\hbar}{2} \langle -|- \rangle} \right) \\
\langle S_x \rangle &= \frac{\hbar}{2} \underbrace{\cos(\theta/2) \cos(\theta/2)}_{=\frac{1}{2} \sin \theta} \left(\underbrace{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}_{2 \cos \varphi} \right) \\
\langle S_x \rangle &= \sin \theta \sin \varphi.
\end{aligned} \tag{38}$$

O mesmo pode ser feito para S_y ,

$$\begin{aligned}
\langle S_y \rangle &= \vec{u} \langle +|S_y|+ \rangle \vec{u} \\
\langle S_y \rangle &= \left(\cos(\theta/2) e^{i\varphi/2} \langle +| + \sin(\theta/2) e^{-i\varphi/2} \langle -| \right) S_y \left(e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) |+\rangle + \sin e^{i\varphi/2}(\theta/2) |-\rangle \right) \\
\langle S_y \rangle &= \cos^2(\theta/2) \underbrace{\langle +|S_y|+ \rangle}_{=\frac{i\hbar}{2} \langle +|- \rangle = 0} + \sin^2(\theta/2) \underbrace{\langle -|S_y|-\rangle}_{=-\frac{i\hbar}{2} \langle -|+ \rangle = 0} + \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \left(e^{i\varphi} \underbrace{\langle +|S_y|-\rangle}_{=\frac{i\hbar}{2} \langle +|+ \rangle} + e^{-i\varphi} \underbrace{\langle -|S_y|+ \rangle}_{=-\frac{i\hbar}{2} \langle -|- \rangle} \right) \\
\langle S_y \rangle &= \frac{\hbar}{2} \underbrace{\cos(\theta/2) \cos(\theta/2)}_{=\frac{1}{2} \sin \theta} \left(\underbrace{-i(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})}_{2 \sin \varphi} \right) \\
\langle S_y \rangle &= \sin \theta \sin \varphi.
\end{aligned} \tag{39}$$

Resumindo, temos

$$\vec{u} \langle +|S_z|+ \rangle \vec{u} = \frac{\hbar}{2} \cos \theta, \tag{40}$$

$$\vec{u} \langle +|S_x|+ \rangle \vec{u} = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi, \tag{41}$$

$$\vec{u} \langle +|S_y|+ \rangle \vec{u} = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi. \tag{42}$$

Observe que os valores médio das componentes do operador \vec{S} são iguais as componente de um momento angular clássico de módulo $\hbar/2$ orientado ao longo do vetor \vec{u} definido pelos ângulos polares θ e φ .