

Resolução da Lista 6 de Mecânica Quântica I (F689, Turma B)

Pedro Rangel Caetano*

Universidade Estadual de Campinas, 10. semestre de 2017

Sumário

Exercício 1	2
Exercício 2	4

*Email: p.r.caetano@gmail.com

1. Dado a equação de autovalores para spin $s = 1$, ache a representação matricial de S^2 , S_z , S_x e S_y .

$$S^2 |s m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s m_s\rangle \quad S_z |s m_s\rangle = m_s \hbar |s m_s\rangle \quad (1)$$

siga o raciocínio feito na aula do dia 12 de junho e descrito nas notas de aula 22 a 24 que estão no link do curso nas páginas 217 a 219. A forma matricial de S_x é igual à de L_x dada no exercício 4 da Lista 5.

Resolução:

Quando $s = 1$, m_s pode assumir os valores 1, 0 e -1 . Há portanto três autoestados simultâneos de S^2 e S_z :

$$|1\rangle \equiv |1\ 1\rangle \quad |0\rangle \equiv |1\ 0\rangle \quad |-1\rangle \equiv |1\ -1\rangle$$

Lembremos agora como obter a representação de um operador A numa base ortonormal $|e_i\rangle$ de um espaço vetorial: se $|v\rangle = \sum v_i |e_i\rangle$ e $|w\rangle = A |v\rangle = \sum w_i |e_i\rangle$ temos

$$\begin{aligned} w_i &= \langle e_i | w \rangle \\ &= \langle e_i | A | v \rangle \\ &= \sum_j \langle e_i | A | e_j \rangle v_j \\ &= \sum_j A_{ij} v_j \end{aligned}$$

ou seja, o elemento A_{ij} da representação matricial de A é dado por

$$A_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle$$

Começaremos então escrevendo a representação matricial de S^2 . Primeiramente, calculando S^2 nos vetores da base temos

$$S^2 |1\rangle = 2\hbar^2 |1\rangle \quad S^2 |0\rangle = 2\hbar^2 |0\rangle \quad S^2 |-1\rangle = 2\hbar^2 |-1\rangle$$

A representação matricial de S^2 é portanto (lembrando que a base $\{|1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$ é ortonormal)

$$S^2 = \begin{pmatrix} \langle 1 | S^2 | 1 \rangle & \langle 1 | S^2 | 0 \rangle & \langle 1 | S^2 | -1 \rangle \\ \langle 0 | S^2 | 1 \rangle & \langle 0 | S^2 | 0 \rangle & \langle 0 | S^2 | -1 \rangle \\ \langle -1 | S^2 | 1 \rangle & \langle -1 | S^2 | 0 \rangle & \langle -1 | S^2 | -1 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{pmatrix}$$

o que já era esperado pois a base que utilizamos é, por definição, a base comum de S^2 e S_z : S^2 e S_z devem portanto ser diagonais. Para S_z portanto obtemos

$$S_z |1\rangle = \hbar |1\rangle \quad S_z |0\rangle = 0\hbar |0\rangle \quad S_z |-1\rangle = -\hbar |-1\rangle$$

logo

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle 1|S_z|1\rangle & \langle 1|S_z|0\rangle & \langle 1|S_z|-1\rangle \\ \langle 0|S_z|1\rangle & \langle 0|S_z|0\rangle & \langle 0|S_z|-1\rangle \\ \langle -1|S_z|1\rangle & \langle -1|S_z|0\rangle & \langle -1|S_z|-1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

Para calcular S_x e S_y , o truque é lembrar que os operadores de levantamento/abaixamento são escritos

$$S_+ = S_x + iS_y \quad S_- = S_x - iS_y$$

Portanto

$$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2} \quad S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i}$$

Basta portanto obter as representações matriciais de S_+ e S_- e conseguiremos as representações de S_x e S_y . Como

$$S_{\pm} |s m_s\rangle = \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} \hbar |s m_s \pm 1\rangle$$

temos

$$\begin{aligned} S_+ |1\rangle &= 0 & S_+ |0\rangle &= \sqrt{2}\hbar |1\rangle & S_+ |-1\rangle &= \sqrt{2}\hbar |-1\rangle \\ S_- |1\rangle &= \sqrt{2}\hbar |0\rangle & S_- |0\rangle &= \sqrt{2}\hbar |-1\rangle & S_- |-1\rangle &= 0 \end{aligned}$$

e, portanto

$$\begin{aligned} S_+ &= \begin{pmatrix} \langle 1|S_+|1\rangle & \langle 1|S_+|0\rangle & \langle 1|S_+|-1\rangle \\ \langle 0|S_+|1\rangle & \langle 0|S_+|0\rangle & \langle 0|S_+|-1\rangle \\ \langle -1|S_+|1\rangle & \langle -1|S_+|0\rangle & \langle -1|S_+|-1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ S_- &= \begin{pmatrix} \langle 1|S_-|1\rangle & \langle 1|S_-|0\rangle & \langle 1|S_-|-1\rangle \\ \langle 0|S_-|1\rangle & \langle 0|S_-|0\rangle & \langle 0|S_-|-1\rangle \\ \langle -1|S_-|1\rangle & \langle -1|S_-|0\rangle & \langle -1|S_-|-1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Note duas coisas: primeiramente, só precisamos calcular uma dentre S_+ e S_- para obter a outra, pois, como $S_- = S_+^\dagger$, podemos obter a representação matricial de uma a partir da outra simplesmente transpondo e conjugando. Ademais, note que S_+ possui apenas a diagonal imediatamente acima da diagonal principal preenchida (e S_- a diagonal imediatamente abaixo). Isto sempre acontece com os operadores levantamento e abaixamento (afinal, eles são operadores de levantamento e abaixamento!).

Agora, é imediato obter

$$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

e

$$S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

Note que S_x e S_y são hermiteanos, como necessariamente deveriam ser!

2. Cohen, página 476, Complemento J_{IV}, exercício 1.

Precessão de Larmor

Considere uma partícula de spin 1/2 de momento magnético $\vec{M} = \gamma \vec{S}$. Os estados de spin são descritos na base de vetores $|+\rangle$ e $|-\rangle$, autovetores de S_z com autovalores $\hbar/2$ e $-\hbar/2$. No tempo $t = 0$, o estado do sistema é

$$|\Psi(t=0)\rangle = |+\rangle \quad (2)$$

Observação: na notação do Cohen $|+\rangle$ é o estado de spin up na direção z, ou sendo mais preciso, $|1/2 \ 1/2\rangle_z$.

Observação: na notação do Griffiths, $\gamma = \frac{qg_s}{2m}$, onde q é a carga, g_s é o fator giromagnético e m é a massa da partícula.

- Se o observável S_x é medido no tempo $t = 0$, quais resultados são possíveis e com quais probabilidades?
- Em vez de medir o resultado no tempo $t = 0$, o sistema é deixado evoluir sob a influência de um campo magnético na direção y, de módulo B_0 . Calcule na base $|+\rangle, |-\rangle$, o estado do sistema no instante t .
- No tempo t , nós medimos os observáveis S_x , S_y e S_z . Quais são os valores destas quantidades que podemos encontrar e com quais probabilidades?
- Qual é a relação entre B_0 e t para qual o resultado de uma das medidas é sem incerteza? Dê uma interpretação física desta condição.

Resolução:

- Como de costume, os valores possíveis são os autovalores do operador S_x e as respectivas probabilidades são obtidas pela projeção nos autovetores. Já esperamos que os autovalores sejam $\hbar/2$ e $-\hbar/2$, como os de S_z , mas podemos checar isto: o operador S_x é representado na base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ como

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Logo os autovalores são dados por

$$\begin{vmatrix} -s_x & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -s_x \end{vmatrix} = 0$$

$$s_x^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0$$

$$\therefore s_x = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Representando o autovetor associado a $\hbar/2$ como $|+\rangle_x$ (e o autovetor associado a $-\hbar/2$, $|-\rangle_x$) temos

$$S_x |+\rangle_x = \frac{\hbar}{2} |+\rangle_x$$

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

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}$$

Já impondo a normalização, temos portanto que $|+\rangle_x$ é representado na base de autovetores de S_z como

$$|+\rangle_x = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle$$

Procedimento semelhante para $|-\rangle_x$ fornece

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle$$

(alternativamente podemos lembrar que, já que $|+\rangle_x$ e $|-\rangle_x$ devem ser ortogonais, basta trocar o sinal de uma das componentes para obter um a partir do outro).

Como em $t = 0$ a partícula está no estado $|+\rangle$, temos que a probabilidade de obter o valor $\hbar/2$ para uma medida de S_x é

$$\mathcal{P}[S_x = \hbar/2] = |\langle + |_x |+\rangle|^2$$

$$= \left| \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle - | \right] |+\rangle \right|^2$$

$$= \frac{1}{2}$$

e a probabilidade de obter o valor $-\hbar/2$ por sua vez vale

$$\begin{aligned}\mathcal{P}[S_x = -\hbar/2] &= |\langle -|+\rangle|^2 \\ &= \left| \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \langle +| - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle -| \right] |+\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

- (b) Começamos lembrando que a energia potencial de uma partícula com momento magnético \vec{M} num campo magnético \vec{B} é dada por $-\vec{M} \cdot \vec{B}$. A energia potencial neste caso vale, portanto, $-\gamma B_0 S_y$. O Hamiltoniano da partícula é, então¹

$$H = -V = \gamma B_0 S_y$$

Os autoestados de H são então $|+\rangle_y$ e $|-\rangle_y$, os autovetores de S_y . Na base destes autovetores, o Hamiltoniano é representado como

$$H = \frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix}$$

A vantagem de trabalhar na base de autoestados é que a evolução temporal é simples: se em $t = 0$ o sistema está no estado $a|+\rangle_y + b|-\rangle_y$, no tempo t sabemos que ele estará no estado $ae^{-\frac{iE_+t}{\hbar}}|+\rangle_y + be^{-\frac{iE_-t}{\hbar}}|-\rangle_y$. Para obter o estado do sistema no instante t temos então que

- Escrever o estado do sistema em $t = 0$ na base de autovetores de S_y , a base de autoestados de H ;
- Nesta nova base, calcular o estado do sistema no tempo t e, por fim;
- Reescrever o estado do sistema na base original

Para realizar essas mudanças de base precisamos calcular os autovetores de S_y na base de S_z . Lembrando que a representação de S_y nesta base é

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

temos que o autovetor $|+\rangle_y$ pode ser calculado por

$$\begin{aligned}S_y |+\rangle_y &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle_y \\ \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -i\beta \\ i\alpha \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}\end{aligned}$$

¹Onde foi parar a energia cinética? Neste caso a dinâmica dos graus de liberdade ligados à translação é desacoplada da dinâmica dos graus de liberdade de spin. Podemos resolvê-los separadamente, portanto. A situação é de certa forma análoga à separação de variáveis ao resolver uma EDP.

já normalizando o vetor, encontramos então

$$\begin{aligned} |+\rangle_y &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle \end{aligned}$$

Procedendo analogamente, ou utilizando a condição de ortogonalidade, temos que $|-\rangle_y$ é dado por

$$\begin{aligned} |-\rangle_y &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle \end{aligned}$$

Para expressar $|+\rangle$ na base de S_y , lembremos agora a identidade

$$1 = |+\rangle_y \langle +| + |-\rangle_y \langle -|$$

de onde obtemos

$$|+\rangle = 1 |+\rangle = {}_y \langle +| + \rangle |+\rangle + {}_y \langle -| + \rangle |-\rangle$$

Portanto, conjugando as expressões para $|+\rangle_y$ e $|-\rangle_y$ obtidas

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \langle +| + \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \langle -| + \rangle \right] |+\rangle_y + \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \langle +| - \rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} \langle -| - \rangle \right] |-\rangle_y \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle_y + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle_y \end{aligned}$$

Já expressamos $|\Psi(t=0)\rangle$ na base de S_y . Seguindo com nosso plano, podemos agora calcular $|\Psi(t)\rangle$ nesta base

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_+ t/\hbar} |+\rangle_y + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_- t/\hbar} |-\rangle_y \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\gamma B_0 t/2} |+\rangle_y + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\gamma B_0 t/2} |-\rangle_y \end{aligned}$$

Por fim, resta-nos reexpressar este estado na base de S_z :

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\gamma B_0 t/2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle \right] + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\gamma B_0 t/2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle \right] \\ &= \frac{1}{2} \left(e^{-\gamma B_0 t/2} + e^{\gamma B_0 t/2} \right) |+\rangle + \frac{1}{2i} \left(e^{\gamma B_0 t/2} - e^{-\gamma B_0 t/2} \right) |-\rangle \\ &= \cos \frac{\gamma B_0 t}{2} |+\rangle + \sin \frac{\gamma B_0 t}{2} |-\rangle \\ &= \cos \omega t |+\rangle + \sin \omega t |-\rangle \end{aligned}$$

- (c) Os valores que podemos encontrar são os autovalores dos observáveis: $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$. Como já obtemos $|\Psi(t)\rangle$ e as expressões das bases de S_x e S_y em termos da base de S_z , tudo o que nos resta são contas corriqueiras. Começando com S_x , podemos calcular as probabilidades

$$\begin{aligned}\mathcal{P}\left[S_x = \frac{\hbar}{2}\right] &= |\langle + | \Psi(t) \rangle|^2 \\ &= \left| \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle - | \right] [\cos \omega t | + \rangle + \sin \omega t | - \rangle] \right|^2 \\ &= \left| \frac{\cos \omega t}{\sqrt{2}} + \frac{\sin \omega t}{\sqrt{2}} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} [1 + \sin \gamma B_0 t]\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\mathcal{P}\left[S_x = -\frac{\hbar}{2}\right] &= 1 - \mathcal{P}\left[S_x = \frac{\hbar}{2}\right] \\ &= \frac{1}{2} [1 - \sin \gamma B_0 t]\end{aligned}$$

Já para S_y :

$$\begin{aligned}\mathcal{P}\left[S_y = \frac{\hbar}{2}\right] &= |\langle + | \Psi(t) \rangle|^2 \\ &= \left| \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | - \frac{i}{\sqrt{2}} \langle - | \right] [\cos \omega t | + \rangle + \sin \omega t | - \rangle] \right|^2 \\ &= \left| \frac{\cos \omega t}{\sqrt{2}} - \frac{i \sin \omega t}{\sqrt{2}} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

e portanto

$$\mathcal{P}\left[S_y = \frac{\hbar}{2}\right] = \frac{1}{2}$$

Por fim, temos para S_z :

$$\begin{aligned}\mathcal{P}\left[S_z = \frac{\hbar}{2}\right] &= |\langle + | \Psi(t) \rangle|^2 \\ &= |\langle + | [\cos \omega t | + \rangle + \sin \omega t | - \rangle]|^2 \\ &= \cos^2 \frac{\gamma B_0 t}{2}\end{aligned}$$

e

$$\mathcal{P}\left[S_z = -\frac{\hbar}{2}\right] = \sin^2 \frac{\gamma B_0 t}{2}$$

- (d) Para que o resultado de uma medida seja sem incerteza, a probabilidade de obtê-la deve ser exatamente 1. Das expressões deduzidas no item anterior, notamos que tanto para S_x quanto para S_z esta condição pode ser satisfeita. Para que uma medida de S_x resulte $\hbar/2$ ou $-\hbar/2$ com certeza, é necessário que

$$\gamma B_0 t = \frac{\pi}{2} + 2n\pi \quad \text{ou} \quad \gamma B_0 t = \frac{3\pi}{2} + 2n\pi$$

Por outro lado, para que uma medida de S_z resulte $\hbar/2$ ou $-\hbar/2$ com certeza, devemos ter

$$\gamma B_0 t = 2n\pi \quad \text{ou} \quad \gamma B_0 t = (2n+1)\pi$$

O que todas estas relações tem em comum é que, a cada intervalo de tempo de $T = \frac{2\pi}{\gamma B_0}$ elas se repetem. Este tempo é justamente o período de precessão. Classicamente, quando aplicamos um campo magnético $\vec{B} = B_0 \hat{y}$ a um sistema com momento de dipolo $\vec{M} = \gamma L_z \hat{z}$, este sistema sofre um torque $\vec{\tau} = \vec{M} \times \vec{B} = \gamma B_0 L_z \hat{x}$. Como este torque é perpendicular ao momento angular L_z , este momento precessiona ao redor do eixo y , com velocidade angular de precessão

$$\omega_p = \frac{\tau}{L_z} = \gamma B_0$$

O período de precessão é portanto

$$T = \frac{2\pi}{\omega_p} = \frac{2\pi}{\gamma B_0}$$

O que coincide exatamente com o período que encontramos acima. Na transição de clássico para quântico, o que acontece é que a maneira correta de interpretar a precessão é diferente: agora pensamos na precessão do valor esperado do observável \vec{S} . Ocorre que, no caso que estamos tratando, quando os valores esperados das componentes S_x ou S_z são $\pm\hbar/2$ não pode haver incerteza (por exemplo, note que se o valor esperado de S_x for $\hbar/2$, sendo este valor dado por $\langle S_x \rangle = \mathcal{P}[S_x = \hbar/2] \frac{\hbar}{2} + \mathcal{P}[S_x = -\hbar/2] \frac{-\hbar}{2}$ é claro que a probabilidade de obter o resultado $\hbar/2$ deve ser 1). Para uma discussão mais detalhada, recomendo consultar a seção 4.4.2 do Griffiths.