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

Pedro Rangel Caetano*

Universidade Estadual de Campinas, 1o. semestre de 2017

Sumário

*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.

$$S^2 \left| s\, m_s \right\rangle = s(s+1)\hbar^2 \left| s\, m_s \right\rangle \qquad S_z \left| s\, m_s \right\rangle = m_s \hbar \left| s\, m_s \right\rangle \tag{1}$$

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:

$$\left|1\right\rangle \equiv \left|1\,1\right\rangle \qquad \left|0\right\rangle \equiv \left|1\,0\right\rangle \qquad \left|-1\right\rangle \equiv \left|1\,-1\right\rangle$$

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

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

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

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

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

$$S^2\left|1\right\rangle = 2\hbar^2\left|1\right\rangle \qquad S^2\left|0\right\rangle = 2\hbar^2\left|0\right\rangle \qquad S^2\left|-1\right\rangle = 2\hbar^2\left|-1\right\rangle$$

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

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

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

$$S_z |1\rangle = \hbar |1\rangle \qquad S_z |0\rangle = \hbar |0\rangle \qquad S_z |{-1}\rangle = -\hbar |{-1}\rangle$$

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

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

Portanto

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

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

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

e, portanto

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

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

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 simplemente 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

$$|\Psi(t=0)\rangle = |+\rangle \tag{2}$$

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.

(a) Se o observável S_x é medido no tempo $t = 0$, quais resultados são possíveis e com quais probabilidades?

(b) 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.

(c) 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?

(d) 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:

(a) 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

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

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 esta no estado $|+\rangle$, temos que a probabilidade de obter o valor $\hbar/2$ para uma medida de S_x é

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

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

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

(b) Começamos lembrando que a energia potencial de uma particula 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, então[1]

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

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 esta 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

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

[1]Onde 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

$$1 = |+\rangle_{y\,y}\langle+| + |-\rangle_{y\,y}\langle-|$$

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

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

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:

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

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

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

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

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

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 $\langle S_x\rangle = \mathcal{P}\left[S_x = \hbar/2\right]\frac{\hbar}{2} + \mathcal{P}\left[S_x = -\hbar/2\right]\frac{-\hbar}{2}$ 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.