

# Spin $1/2$ e sistemas de dois níveis

## Motivação

- Ilustrar os postulados da Mecânica Quântica.
- Começar com algo simples: dimensão do espaço  $\mathcal{E}$  é finita e igual a 2.
- Interesse não é só por simplicidade. De fato, esse assunto apresenta efeitos quânticos típicos que podem ser verificados experimentalmente.

## Roteiro

- O spin  $1/2$  (maiores detalhes no capítulo 9, na disciplina F789).
- A experiência de Stern-Gerlach.
  - Verificou-se a quantização do momento angular (em qualquer direção) do átomo de prata  $\begin{cases} +\hbar/2 \\ -\hbar/2 \end{cases} \Rightarrow$  só dois valores possíveis!
  - Dizemos que o átomo de prata, com seus 47 elétrons (47 prótons e neutrons), em seu estado fundamental, é uma partícula de spins  $1/2$ . Precisamos discutir isso melhor, pois os componentes do átomo (elétrons, prótons e neutrons) são, por si só, partículas de spin  $1/2$ .
- Veremos como a mecânica quântica trata spin (momento angular intrínseco), uma propriedade das partículas que não tem análogo clássico (não pode ser descrita em termos das coordenadas canônicas  $\vec{r}$  e  $\vec{p}$ ).

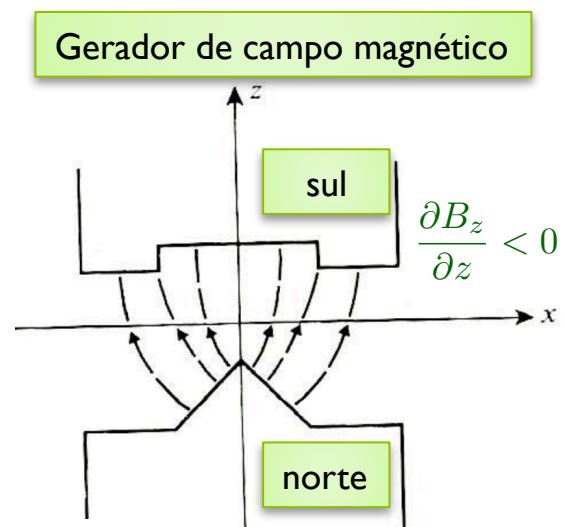
# Spin 1/2 e sistemas de dois níveis

Roteiro (continuação).

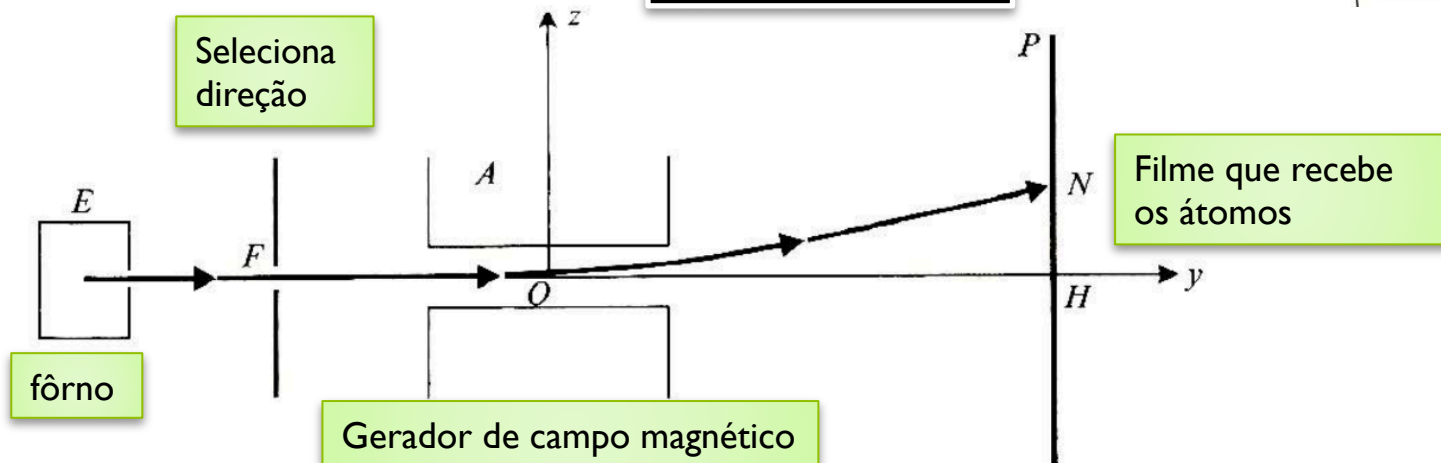
- Como preparar estados (spin) → verificação experimental dos postulados.
- Evolução temporal de uma partícula com spin em um campo magnético constante (precessão de Larmor).
- Como generalizar a discussão sobre spin 1/2 para sistemas de dois níveis.

## A experiência de Stern-Gerlach

- Objetivo:  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Estudar a deflexão de um feixe de átomos} \\ \text{paramagnéticos neutros em um campo} \\ \text{magnético altamente não homogêneo.} \end{array} \right.$



Figs. I, cap. 4 do texto



# A experiência de Stern-Gerlach

## Algumas questões iniciais:

- O que são átomos paramagnéticos?
  - Possuem momentos magnéticos ( $\vec{\mathcal{M}}$ ) permanentes e se alinham sob ação de um campo magnético ( $\vec{B}$ ) externo. Energia potencial:  $U = -\vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{B}$ .
- O que o spin tem a ver com isso?
  - O spin é momento angular e veremos que podemos associar momento angular à momento magnético.
  - O caso orbital tem análogo clássico.
- Porque o campo precisa ser não homogêneo? A força que causa desvio é  $\vec{F} = -\vec{\nabla}U = \vec{\nabla}(\vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{B})$ . Se  $\vec{B}$  não varia no espaço, ela é zero.
- ★ *Começemos pelo gerador de campo magnético do slide anterior. Ele produz um campo com as seguintes propriedades:*
  - $\vec{B}$  tem um plano de simetria  $yOz$  que contém a direção inicial dos átomos ( $Oy$ ).
  - $\vec{B}$  é igual em  $\forall$  linha  $\parallel Oy$  e equidistante à  $yOz$  (perceba uma de cada lado). Negligencia-se efeitos de borda.
  - $\vec{B}$  não tem componente na direção  $Oy$ . Sua maior componente é na direção  $Oz$  que varia fortemente com  $z$ .

## A experiência de Stern-Gerlach

### ★ Cálculo clássico da deflexão.

- Átomos de prata são neutros. Quanto vale a força de Lorentz  $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ ? Como  $q = 0$ , a força é nula. A origem da deflexão não é devido à carga total do átomo, mas devido ao momento magnético permanente  $\vec{M}$  do átomo.
- Qual é origem do momento magnético permanente  $\vec{M}$ ?

Duas fontes  $\left\{ \begin{array}{l} \text{orbital: movimento de elétrons ao redor do núcleo (espiras)} \\ \text{spin - o chamado momento angular (giro) intrínseco} \end{array} \right.$

- Em ambos os casos podemos associar um momento angular  $\vec{J}$  e definir  $\vec{M} = \gamma \vec{J}$ , onde  $\gamma$  é a razão giromagnética.
- Como explicar os casos de átomos com momento magnético  $\vec{M}$  nulo? A origem de  $\vec{M} = 0$  está num cancelamento, fruto da soma de todas as contribuições orbitais e de spin para o momento magnético. Mais tarde veremos que esses átomos têm momento angular total nulo, isto é  $\vec{J} = 0$ , ao longo da componente campo magnético fortemente variável.
- No caso do átomo de prata, a soma  $\vec{J}_{\text{orbital}} = 0$  e a soma  $\vec{J}_{\text{spin}}$  se reduz a contribuição do spin do elétron mais externo. Por isso dizemos que tudo se passa como se o átomo tivesse spin  $1/2$ .

## A experiência de Stern-Gerlach

- Observe, na figura do slide 2, a existência de um forno que liberta e lança átomos de prata na direção do magneto (gerador de campos magnéticos). Como não há nenhum controle, podemos afirmar que antes de entrarem no eletromagneto, os momentos magnéticos dos átomos estão orientados aleatoriamente.
- O que acontece quando  $\vec{B}$  age em  $\vec{\mathcal{M}}$ ? Como  $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$ , fica claro que para uma força não nula,  $\vec{B}$  precisa variar espacialmente, pois  $\vec{\mathcal{M}}$  não depende da posição do átomo.
- A mecânica clássica nos ensina que existe um torque sobre esse momento magnético, dado por  $\vec{\Gamma} = \vec{\mathcal{M}} \times \vec{B}$ . Qual seria seu efeito sobre o átomo?

Lembre que da mesma forma que temos  $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$ , similarmente

temos que  $\vec{\Gamma} = \frac{d\vec{\mathcal{J}}}{dt}$ , o torque é a taxa de variação do momento

angular e isso nos leva à:  $\frac{d\vec{\mathcal{J}}}{dt} = \gamma \vec{\mathcal{J}} \times \vec{B}$ . Como  $\frac{d\vec{\mathcal{J}}}{dt} \perp \vec{\mathcal{J}}$ , o

átomo se comporta como um giroscópio.  $\theta$  se mantém constante, a velocidade angular é  $\omega = \gamma B$  e as componentes de  $\vec{\mathcal{M}}$ , perpendiculares à  $\vec{B}$ , oscilam passando por zero.

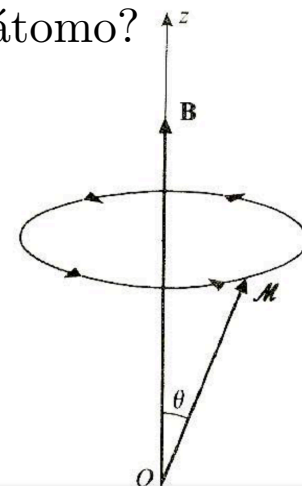


Fig. 2, cap. 4 do texto

## A experiência de Stern-Gerlach

- Como calcular  $\vec{F}$ ?

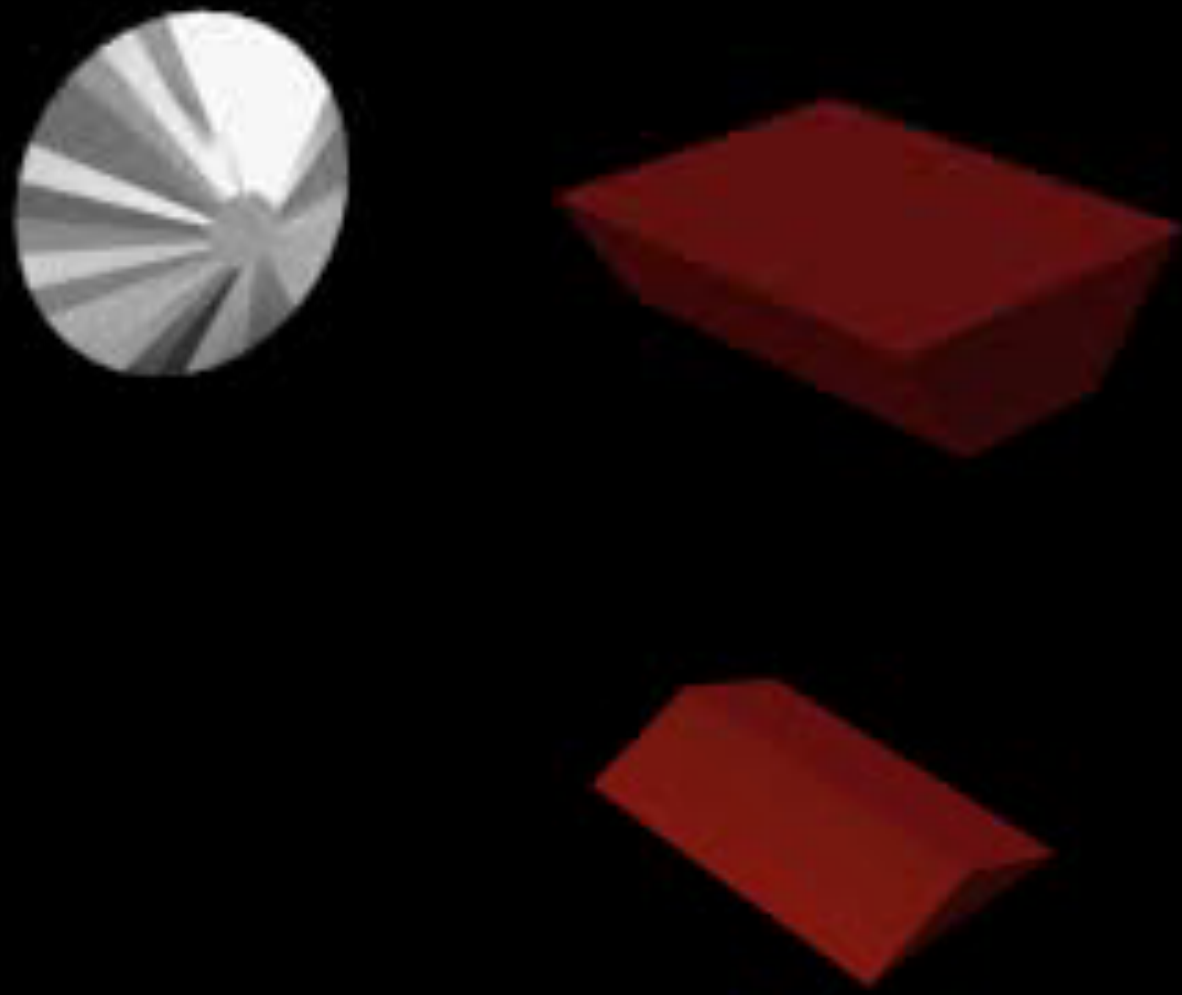
Negligencie  $\mathcal{M}_x$  e  $\mathcal{M}_y$ , pois,  $\overline{\mathcal{M}_x} = \overline{\mathcal{M}_y} = 0$  e tome  $\mathcal{M}_z = \text{cte}$

*frequência de oscilação é tão grande que só a média interessa*

$$\text{Assim, } \vec{F} \approx \vec{\nabla}(\mathcal{M}_z B_z) = \mathcal{M}_z \vec{\nabla} B_z = \mathcal{M}_z \left( \frac{\partial B_z}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial B_z}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial B_z}{\partial z} \hat{k} \right) = \mathcal{M}_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \hat{k}$$

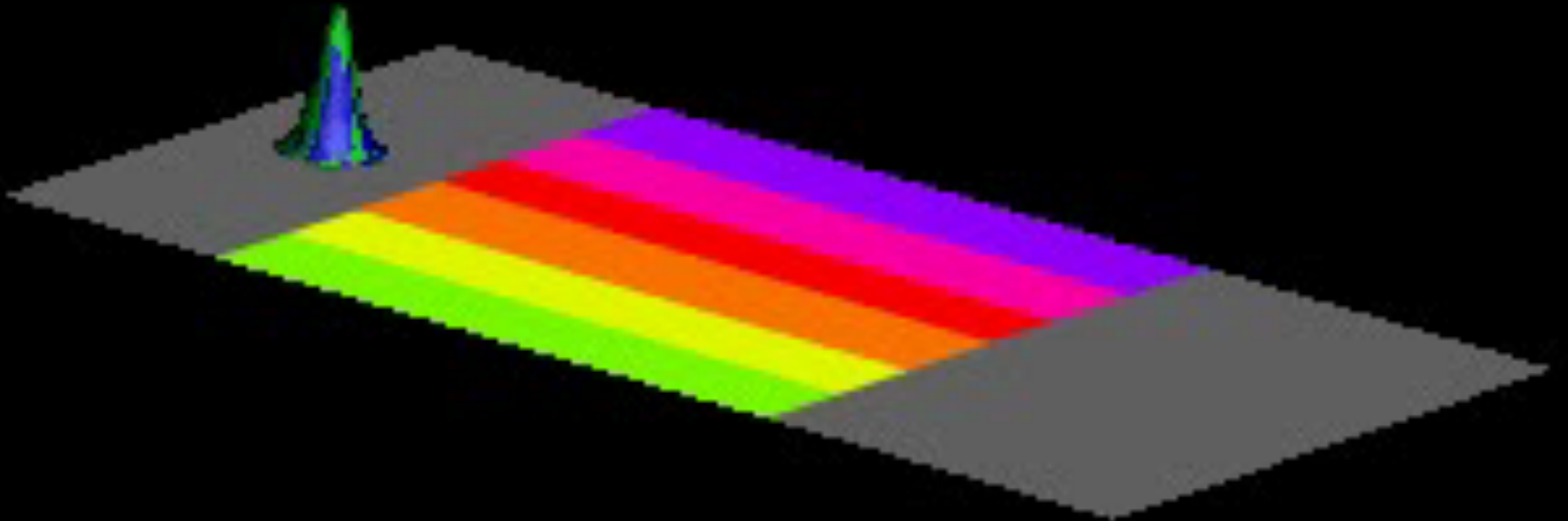
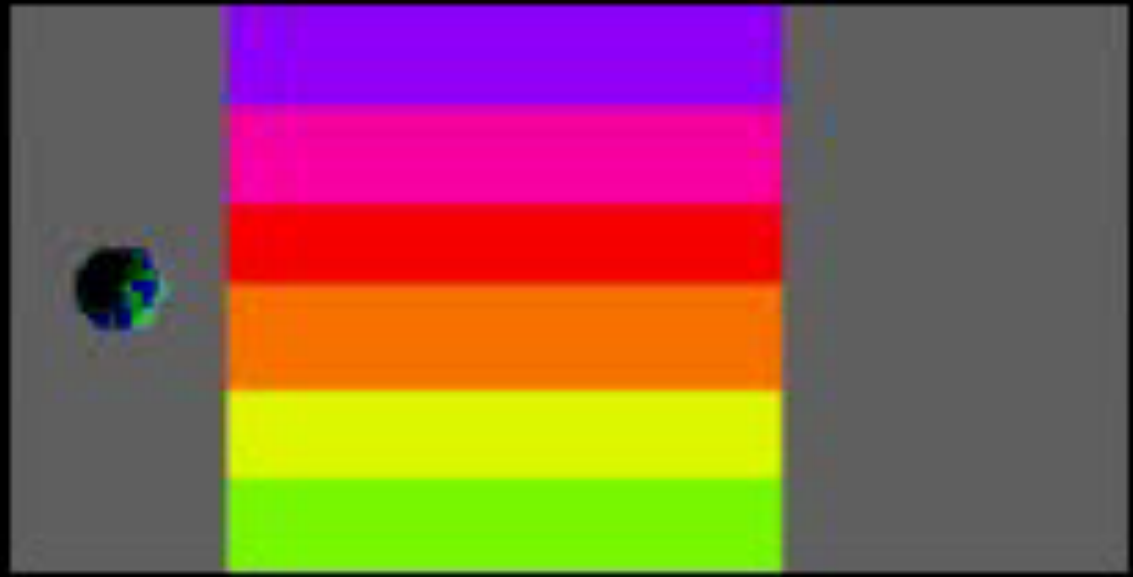
$$\approx 0 \text{ por construção}$$

- A força  $\vec{F} = \mathcal{M}_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \hat{k}$  é a causadora da deflexão.  $\therefore$  medir a distância  $\overline{HN}$  da figura do slide 2, é medir  $\mathcal{M}_z$  e conseqüentemente  $\mathcal{J}_z$ .
- Como os átomos entram no magneto com orientações aleatórias de  $\vec{\mathcal{M}}$ , a expectativa clássica seria obter uma distribuição simétrica de marcas no filme (ver figura do slide 2) com respeito à  $H$ . Considerando as orientações equiprováveis, esperaríamos encontrar, de forma homogênea, após um grande número de medidas, todos os valores de  $\mathcal{M}_z$  entre  $-|\vec{\mathcal{M}}|$  e  $+|\vec{\mathcal{M}}|$ . *Esse resultado não foi encontrado experimentalmente, conforme discussão a seguir.*



# Experimento de Stern-Gerlach: o spin do elétron

## Visão Clássica

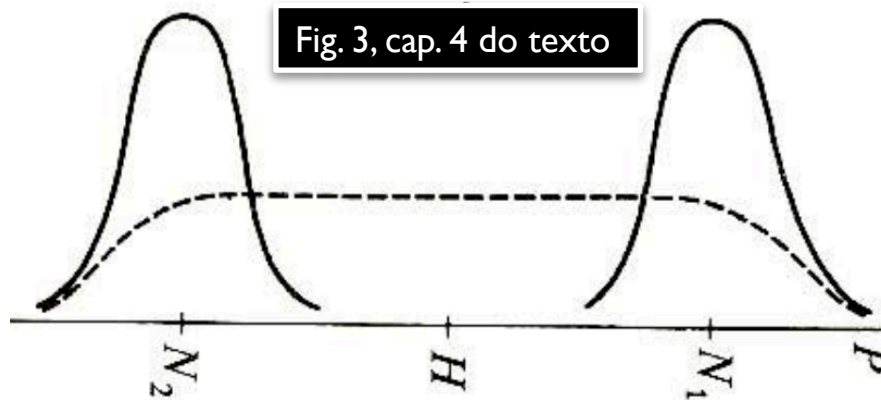


Experimento de Stern-Gerlach: o spin do elétron  
Visão Quântica



## A experiência de Stern-Gerlach (1922)

- O experimento não mostrou uma única mancha centrada em  $H$ , mas duas manchas centradas em  $N_1$  e  $N_2$ , simétricas com respeito à  $H$  (a largura foi interpretada como efeito de dispersão das velocidades iniciais e outros efeitos da fenda que seleciona o feixe de átomos).
- Para explicar o que está acontecendo, será que precisamos considerar  $\vec{r}$  e  $\vec{p}$ , as coordenadas canônicas do centro de massa do átomo de prata? ou bastaria tratar quanticamente as coordenadas internas  $\vec{M}$  e  $\vec{J}$ ?
- Para responder a essa questão, precisamos ver se é possível construir pacotes de ondas para átomos de prata que satisfaçam  $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar$  e cujas dimensões sejam desprezíveis com respeito as dimensões do problema. Se, sim, sabemos que o movimento do centro do pacote seria descrito pela mecânica clássica e poderíamos atribuir as diferenças nos resultados obtidos à quantização das coordenadas internas  $\Rightarrow$  cuidado,  $\exists$  ressalvas importantes (pacote se divide)!



## A experiência de Stern-Gerlach (1922)

- Um bom começo seria perguntar como seria o experimento de desligássemos o magneto? Neste caso esperaríamos que a distribuição de marcas no filme fosse fina e ao redor de  $H$ . A largura fina indicaria efeitos controláveis de difração.
- Na ausência de campos magnéticos, quão fina seria essa distribuição? Esperaríamos que tivesse as características semelhantes às aquelas distribuições apresentadas ao redor de  $N_1$  e  $N_2$  do slide anterior.
- Ao ligar o magneto, o pacote se divide em dois, sendo que cada qual se move como se fosse o centro de massa de um átomo de prata viajando em uma trajetória clássica, mas lembre a dupla de pacotes representa apenas uma partícula. Ou ela é colhida em cima ou embaixo. A medida seguida de um colapso da função de onda garante isso. Nunca, uma partícula é colhida nos dois lugares. Ver discussão no artigo:
  - ★ **Quantum “Ghosts”**, Gabriela M. Amaral, David Q. Arequipa, Ludwig F. M. Camacho, Luiz F. C. Faria, Sofía I. C. Guzmán, Damaris T. Maimone, Melissa Mendes, and Marco A. P. Lima, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. **38**, n<sup>o</sup> 3, e3309 (2016).
- Como próximo passo para essa discussão, vamos estimar o tamanho do pacote de ondas de um átomo de prata viajando no experimento.

## A experiência de Stern-Gerlach (1922)

- O átomo de prata  $\left\{ \begin{array}{l} \text{massa } M = 1,8 \times 10^{-25} \text{ kg} \\ \Delta z \Delta P_z \geq \hbar \rightarrow \Delta z \Delta v_z \geq \hbar/M \approx 10^{-9} \text{ unidades MKSA} \end{array} \right.$
- Dimensões do problema  $\left\{ \begin{array}{l} \text{largura de } F : 0,1 \text{ mm} \\ \text{distância } \overline{N_1 N_2} : \text{muitos milímetros} \\ \vec{B} \text{ varia apreciavelmente em: } B/\frac{\partial B}{\partial z} = \frac{10^4 \text{ gauss}}{10^5 \text{ gauss/cm}} = 1 \text{ mm} \\ \text{velocidade típica (1000K)} \approx 500 \text{ m/s} \rightarrow \Delta v_z \approx \text{m/s} \end{array} \right.$
- $\Delta z \Delta v_z \geq \hbar/M \approx 10^{-9} \rightarrow$  permite um pacote  $\ll$  que as dimensões envolvidas. Conforme estudamos, nessas condições o centro desse pequeno pacote deveria viajar segundo uma trajetória clássica. Atingir o filme significa realizar uma medida e isso gera uma pequena marca sobre ele. Se tivéssemos um contínuo de valores de  $\mathcal{M}_z$  teríamos uma distribuição contínua de pontos no filme. Ter apenas dois picos indica que o momento magnético está quantizado com dois valores, um positivo e outro negativo. Sob o ponto de vista quântico o estado do átomo é uma combinação de spin para cima com spin para baixo. Isso faz com que haja uma separação do pacote de ondas (estado delocalizado): um pedaço caminha como se fosse  $\mathcal{M}_z > 0$  e o outro como se fosse  $\mathcal{M}_z < 0$ .
- Veremos que atribuir ao elétron que: *em qualquer direção  $\vec{n}$ , a projeção  $\vec{J} \cdot \vec{n}$  tem apenas dois valores,  $\pm \hbar/2$ , explica completamente este experimento.*

## Descrição teórica (detalhes no capítulo 9 – F789)

- Neste capítulo, vamos apenas criar a linguagem necessária para estudos gerais de sistemas com dois níveis (preparar, fazer evoluir e medir em sistemas de dois níveis). Após estudar a descrição de momento angular na mecânica quântica, apresentaremos um estudo mais completo sobre partículas com spin  $1/2$ .
- A uma medida associamos uma observável. Chamamos de  $\vec{J}$  a quantidade física, momento angular (orbital ou de spin). Para distinguí-las chamaremos de  $\vec{S}$  a de spin e a ela associaremos uma observável  $\vec{S}$ .

$$\vec{J} = (\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y, \mathcal{J}_z) \stackrel{\text{spin } 1/2}{=} \vec{S} = (\mathcal{S}_x, \mathcal{S}_y, \mathcal{S}_z) \iff \vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$$

- Podemos medir  $\mathcal{S}_x, \mathcal{S}_y, \mathcal{S}_z$  ou  $\forall \mathcal{S}_u = \vec{S} \cdot \vec{u}$  com  $\vec{u} \equiv$  vetor unitário arbitrário.

- Defina  $S_z$ , uma observável com dois autovalores  $\pm \hbar/2$  e dois autovetores  $\begin{cases} |+\rangle \\ |-\rangle \end{cases}$

Isso é o mesmo que dizer  $\begin{cases} S_z|+\rangle = +\hbar/2|+\rangle \\ S_z|-\rangle = -\hbar/2|-\rangle \end{cases}$  com  $\begin{cases} \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1 \\ \langle +|-\rangle = \langle -|+\rangle = 0 \end{cases}$  e que

$\mathcal{E}_S = \{|+\rangle, |-\rangle\}$  é completo com  $\mathbb{1} = |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|$ . Note que  $S_z$  é um CCOC.

- O vetor normalizado mais geral de  $\mathcal{E}_S$  é  $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$  com  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ .

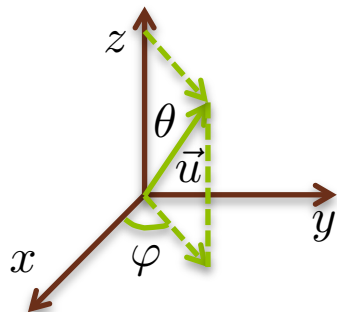
*Como seria sua representação matricial? e o  $S_x$  e  $S_y$ ? O que esperamos de seus autovalores?*

## Spin 1/2 e sistemas de dois níveis

- A matriz representando  $S_z$  é dada por (use relações do slide anterior):

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \text{ Sem demonstrar dizemos que } \begin{cases} S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

- Para obter  $S_u$ , basta fazer  $S_u = \vec{S} \cdot \vec{u} = S_x u_x + S_y u_y + S_z u_z$ .



$$\Rightarrow \begin{cases} \vec{u} \text{ é um vetor unitário definido por:} \\ \vec{u} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \\ \text{onde } \theta \text{ e } \varphi \text{ estão indicados na figura.} \end{cases}$$

Com isso, temos

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \cos \varphi & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \sin \theta \sin \varphi \\ +i \sin \theta \sin \varphi & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 \\ 0 & -\cos \theta \end{pmatrix} \right\} \quad \therefore S_u = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{+i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

*O que as observáveis  $S_z, S_x, S_y$  e  $S_u$  tem em comum?*

## Spin $1/2$ e sistemas de dois níveis

- Para que nossas definições reflitam a experiência é preciso que as observáveis  $S_z, S_x, S_y$  e  $S_u$  tenham o mesmo espectro. Lembre que qualquer medida de spin em qualquer direção fornece  $\pm \hbar/2$ .

- Por construção  $S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  tem autovalores  $\begin{cases} +\hbar/2 \\ -\hbar/2 \end{cases}$  e autokets  $\begin{cases} |+\rangle \\ |-\rangle \end{cases}$

- Mostre que:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ tem autovalores } \begin{cases} +\hbar/2 \\ -\hbar/2 \end{cases} \text{ e autokets } \begin{cases} |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \\ |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \end{cases}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ tem autovalores } \begin{cases} +\hbar/2 \\ -\hbar/2 \end{cases} \text{ e autokets } \begin{cases} |+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle) \\ |-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - i|-\rangle) \end{cases}$$

E com algum cuidado com fases globais, mostre que

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{+i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \text{ tem autovalores } \begin{cases} +\hbar/2 \\ -\hbar/2 \end{cases}$$

$$\text{e autokets } \begin{cases} |+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \\ |-\rangle_u = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{+i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \end{cases}$$