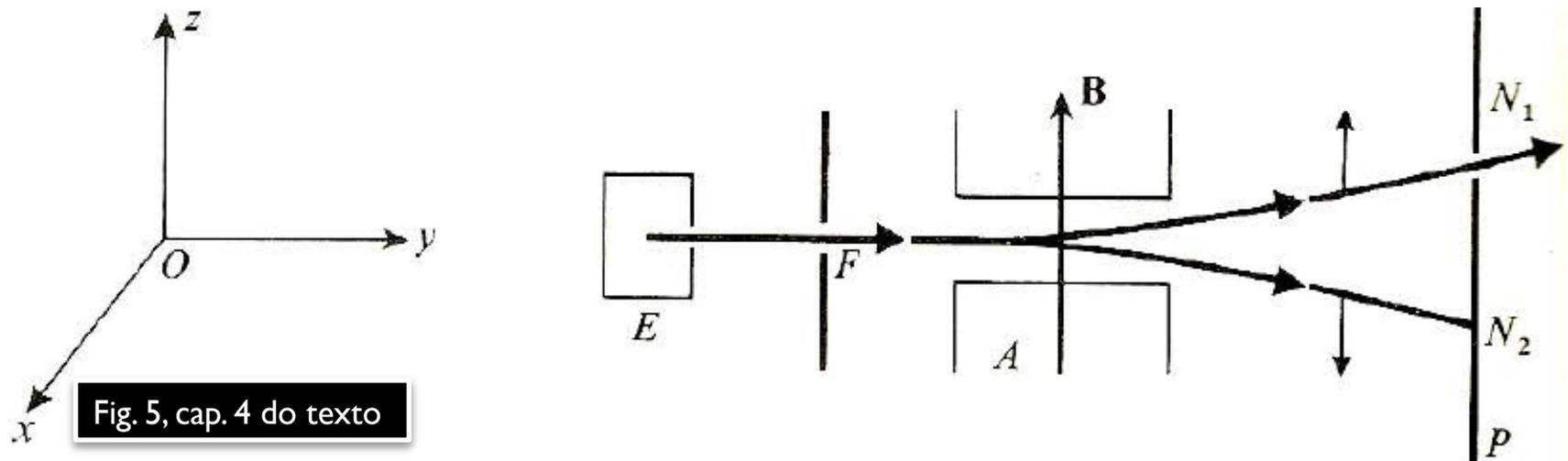


Spin $1/2$ - Ilustrando os postulados

- Discutiremos algumas experiências com partículas de spin $1/2$ para ilustrar os postulados da Mecânica Quântica.
- Um bom começo é preparar estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$. Para tanto basta passar um feixe de partículas com spin $1/2$ por um experimento de Stern-Gerlach. As partículas que desviarem para “cima” (defina z como sendo o eixo onde \vec{B} varia fortemente) estarão no estado $|+\rangle$ e as que desviaram para “baixo”, no estado $|-\rangle$.



- Note que a fenda 2 está fechada. Assim, todas as partículas que passarem pelo anteparo P (no caso, só pela fenda 1) estarão no estado $|+\rangle$.
- O que aconteceria se fizéssemos um novo experimento de Stern-Gerlach para o feixe de partículas que saem pela fenda 1? Se o campo magnético fosse como o do primeiro experimento, todas as partículas desviariam para a cima.

Spin 1/2 - Ilustrando os postulados

- E se quiséssemos preparar o sistema em um auto estado de S_x ? Para tanto, bastaria passar um feixe de partículas com spin 1/2 por um experimento de Stern-Gerlach, conforme a figura (campo magnético variando fortemente na direção x).
- Nesse experimento, todas as partículas que passassem pela fenda 1 estariam no estado $|+\rangle_x$.

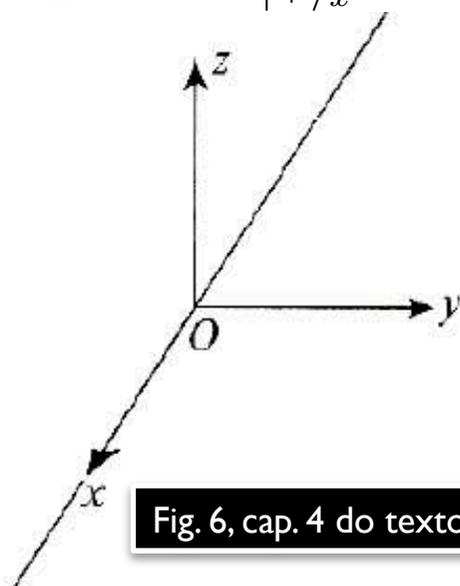
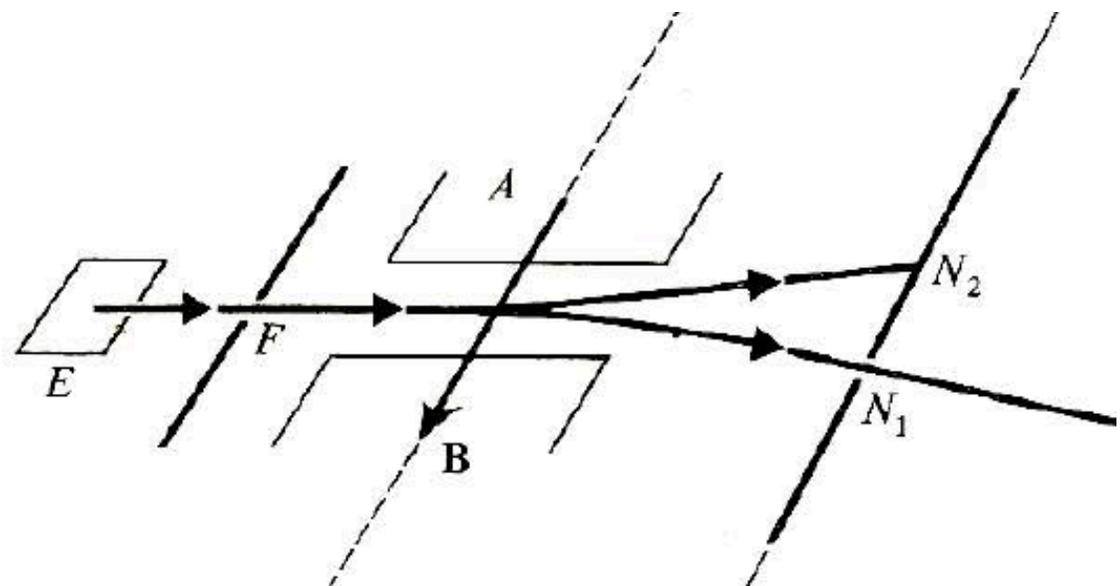
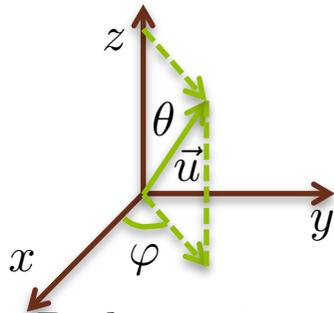


Fig. 6, cap. 4 do texto



- Se fechássemos a fenda 1 e abrísssemos a fenda 2, obteríamos o sistema no estado $|-\rangle_x$.
- Como preparar o sistema nos estados $|+\rangle_u$ e $|-\rangle_u$? Basta colocar $\vec{B} \parallel \vec{u}$, onde $\vec{u} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$.



Spin 1/2 e sistemas de dois níveis

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

- Podemos imaginar o feixe vindo perpendicularmente ao plano contendo \vec{u} e o eixo z da figura. A escolha do plano (qualquer um que contenha \vec{u} serve) e da direção do feixe é arbitrária, basta que passe pelo campo magnético variando fortemente na direção \vec{u} .
- Em \forall escolha $\begin{cases} \text{desvio ao longo de } \vec{u} \rightarrow |+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \\ \text{desvio contrário a } \vec{u} \rightarrow |-\rangle_u = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{+i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \end{cases}$
- Será que esse experimento pode ser útil para preparar o sistema em um estado geral $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$, sendo que α e β são números complexos de sua escolha que satisfaçam $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$? A resposta é sim. Para isso, basta que encontremos θ e φ que tornem $|+\rangle_u$ colinear com $|\psi\rangle$. Se isso sempre for possível, o estado $|+\rangle_u$ de um experimento de Stern-Gerlach com campo fortemente variável na direção \vec{u} , preparará $|+\rangle_u = e^{-i\frac{\chi}{2}} |\psi\rangle$ (diferem apenas por uma fase global - o $\chi/2$ é de quem sabe a resposta).

Spin 1/2 e sistemas de dois níveis

- Se queremos $|+\rangle_u$ colinear com $|\psi\rangle$, precisamos impor
$$\begin{cases} |\alpha| = |\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}| \\ |\beta| = |\sin \frac{\theta}{2} e^{+i\varphi}| \end{cases}$$

Isso é o mesmo que pedir que
$$\begin{cases} |\alpha| = \cos \frac{\theta}{2} \\ |\beta| = \sin \frac{\theta}{2} \end{cases}$$
 se tomarmos $0 \leq \theta \leq \pi$.

Nestas condições $\cos \frac{\theta}{2} \geq 0$ e $\sin \frac{\theta}{2} \geq 0$ e $\tan \frac{\theta}{2} = \left| \frac{\beta}{\alpha} \right|$ define θ de forma única.

- Sabemos que somente as diferenças de fase entre α e β afetam as previsões

físicas. Assim chame
$$\begin{cases} \varphi \equiv \arg \beta - \arg \alpha \\ \chi \equiv \arg \beta + \arg \alpha \end{cases}$$
 e obtenha
$$\begin{cases} \arg \beta = \frac{1}{2}\chi + \frac{1}{2}\varphi \\ \arg \alpha = \frac{1}{2}\chi - \frac{1}{2}\varphi \end{cases}$$

- Use isso para escrever

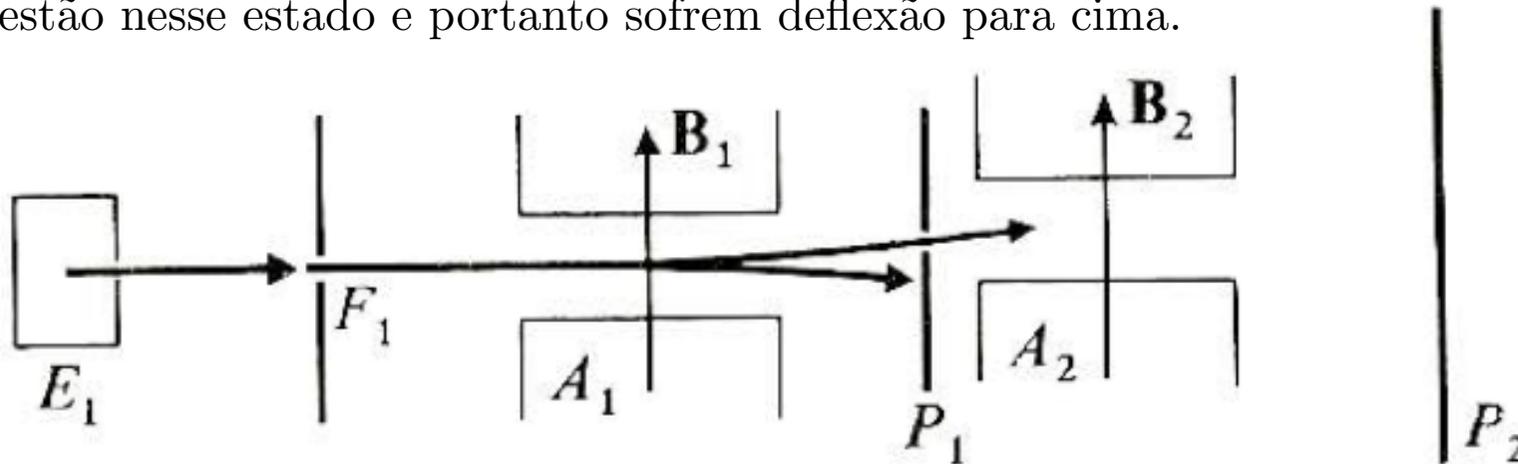
$$|\psi\rangle = |\alpha| e^{i \arg \alpha} |+\rangle + |\beta| e^{i \arg \beta} |-\rangle = e^{i \frac{\chi}{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i \frac{\varphi}{2}} |-\rangle \right) = e^{i \frac{\chi}{2}} |+\rangle_u$$

- As escolhas
$$\begin{cases} \tan \frac{\theta}{2} = \left| \frac{\beta}{\alpha} \right| \\ \varphi = \arg \beta - \arg \alpha \\ \chi = \arg \beta + \arg \alpha \end{cases} \Rightarrow$$
 tornam $|+\rangle_u$ colinear com o $|\psi\rangle$ desejado.

Aprendemos com isso a colocar o sistema em um estado arbitrário $|\psi\rangle$. Isso foi feito para um sistema de spin 1/2, mas a estratégia pode ser utilizada para sistemas mais complexos.

Medidas de spin – colocar magnetos um atrás do outro

- A figura abaixo mostra a situação com dois experimentos de Stern-Garlech alinhados ($\vec{B}_1 \parallel \vec{B}_2$). Todos os átomos que forem empurrados para cima no aparelho A_1 sofrerão o mesmo efeito em A_2 . Isso é porque qualquer que seja o estado do átomo antes dele chegar em A_1 , a medida causa o colapso do estado para o estado $|+\rangle$. Todos os átomos que chegam no aparelho A_2 estão nesse estado e portanto sofrem deflexão para cima.

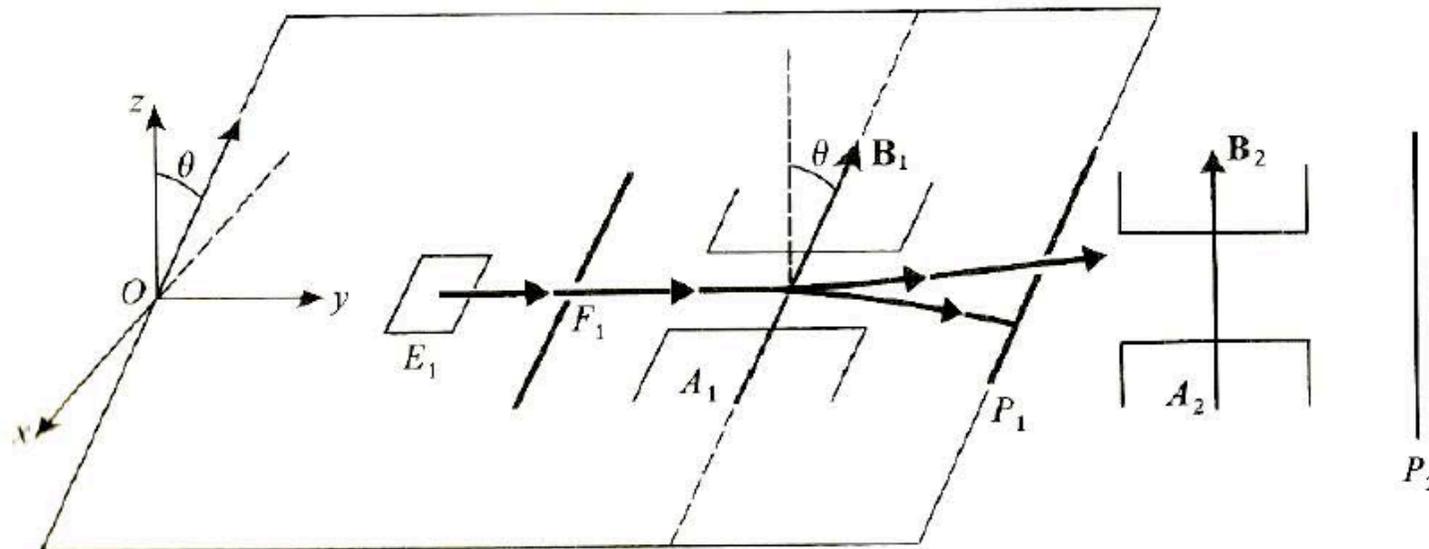


- Esta experiência é uma clara confirmação da validade do postulado 5 (a medida causa um colapso do estado original para o autoestado associado ao autovalor medido da observável S_z . No caso o autoestado $|+\rangle$ associado ao autovalor $+\hbar/2$. Note que nenhum átomo em A_2 moveria para baixo.

- O átomo em A_2 está no estado $|+\rangle$, \therefore medir S_z $\begin{cases} \mathcal{P}(+\hbar/2) = 1 \\ \mathcal{P}(-\hbar/2) = 0 \end{cases}$

Medidas de spin – colocar magnetos um atrás do outro

- A figura abaixo mostra a situação com dois experimentos de Stern-Garlech desalinhados (B_1 faz $\angle \theta$ com B_2). Todos os átomos que forem empurrados para cima no aparelho A_1 saem no estado $|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle$ com $\varphi = 0$ (nossa escolha). Ou seja em uma combinação de autoestados de S_z dada por $|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle$. Quais são os resultados possíveis em A_2 e com que probabilidades? (Note que a figura é para $\varphi = \pi$ e não $\varphi = 0$).



- Nesse experimento, o postulado de decomposição espectral é prontamente

$$\text{verificado } \begin{cases} \mathcal{P}(+\hbar/2) = |\langle + | \Psi \rangle|^2 = \cos^2 \theta/2 \\ \mathcal{P}(-\hbar/2) = |\langle - | \Psi \rangle|^2 = \sin^2 \theta/2 \end{cases} \Rightarrow \mathcal{P}(+\hbar/2) + \mathcal{P}(-\hbar/2) = 1$$

Medidas de spin – colocar magnetos um atrás do outro

- Considere um experimento conforme figura do slide anterior, mas com o aparelho A_2 , medindo S_x e não S_z . Neste caso, quais seriam as chances de se obter $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$?

Novamente após passar por A_1 os átomos estarão no estado

$$|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle.$$

Se queremos informação sobre a observável S_x , precisamos do operador unidade $\mathbb{1} = |+\rangle_x \langle +| + |-\rangle_x \langle -|$ para escrever $|\psi\rangle = |+\rangle_u$ nesta base, isto é:

$$|+\rangle_u = \mathbb{1} |+\rangle_u = |+\rangle_x \langle +| |+\rangle_u + |-\rangle_x \langle -| |+\rangle_u$$

- Isso informa que ao medir S_x , teremos $\begin{cases} \mathcal{P}(+\hbar/2) = |{}_x \langle + | + \rangle_u|^2 \\ \mathcal{P}(-\hbar/2) = |{}_x \langle - | + \rangle_u|^2 \end{cases}$

Sabendo que $\begin{cases} |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \\ |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle) \end{cases}$ teremos amplitudes

dadas por $\begin{cases} {}_x \langle + | + \rangle_u = \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \theta/2 + \sin \theta/2) = \cos (\pi/4 - \theta/2) \\ {}_x \langle - | + \rangle_u = \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \theta/2 - \sin \theta/2) = \sin (\pi/4 - \theta/2) \end{cases}$

e $\therefore \begin{cases} \mathcal{P}(+\hbar/2) = \cos^2 (\pi/4 - \theta/2) \\ \mathcal{P}(-\hbar/2) = \sin^2 (\pi/4 - \theta/2) \end{cases}$ Esperado? $\begin{cases} \text{Troque } \underbrace{\theta} \rightarrow \underbrace{\pi/2 - \theta} \text{ no} \\ \angle \hat{z} \& \vec{B} \quad \angle \hat{x} \& \vec{B} \\ \text{experimento anterior} \end{cases}$

Medidas de spin – Valores médios

- Considere novamente a figura do slide 6 com $\varphi = 0$. Os átomos que saem pela fenda em P_1 estão no estado $|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle$. Se medíssemos agora o spin na direção \hat{z} , qual seria o valor médio dos resultados obtidos?

Duas formas de calcular essa média:

- Primeiro considere as probabilidades previstas no postulado 4. Se medirmos \mathcal{S}_z , em um sistema que se encontra no estado $|+\rangle_u$, as probabilidades de encontrar

$$\text{os autovalores são } \begin{cases} \mathcal{P}(+\hbar/2) = |\langle + | + \rangle_u|^2 = \cos^2 \theta/2 \\ \mathcal{P}(-\hbar/2) = |\langle - | + \rangle_u|^2 = \sin^2 \theta/2 \end{cases} \Rightarrow \text{se realizássemos } \mathcal{N}$$

medidas esperaríamos encontrar

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \left[\frac{\hbar}{2} \mathcal{N} \cos^2 \theta/2 - \frac{\hbar}{2} \mathcal{N} \sin^2 \theta/2 \right] = \frac{\hbar}{2} \cos \theta.$$

- Outra forma de calcular a média seria segundo a fórmula $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$, que fornece $\langle S_z \rangle = {}_u \langle + | S_z | + \rangle_u = \cos^2 \theta/2 \langle + | S_z | + \rangle + \sin^2 \theta/2 \langle - | S_z | - \rangle + \cos \theta/2 \sin \theta/2 \left[\underbrace{\langle + | S_z | - \rangle}_0 + \underbrace{\langle - | S_z | + \rangle}_0 \right] = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \theta/2 - \frac{\hbar}{2} \sin^2 \theta/2 = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$

- E se medíssemos \mathcal{S}_x , qual seria a média dos valores obtidos? Em seguida, aplicaremos as duas fórmulas acima para obter $\langle S_x \rangle$.

Medidas de spin – Valores médios

- Primeiro considere as probabilidades previstas no postulado 4. Se medirmos S_x , em um sistema que se encontra no estado $|+\rangle_u (\varphi = 0)$, as probabilidades de

obter os autovalores são
$$\begin{cases} \mathcal{P}(+\hbar/2) = |{}_x\langle +|+\rangle_u|^2 = \cos^2(\pi/4 - \theta/2) \\ \mathcal{P}(-\hbar/2) = |{}_x\langle -|+\rangle_u|^2 = \sin^2(\pi/4 - \theta/2) \end{cases} \quad \text{conforme}$$

vimos no slide 7. Se realizássemos \mathcal{N} medidas esperaríamos encontrar

$$\langle S_x \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \left[\frac{\hbar}{2} \mathcal{N} \cos^2(\pi/4 - \theta/2) - \frac{\hbar}{2} \mathcal{N} \sin^2(\pi/4 - \theta/2) \right] = \frac{\hbar}{2} \cos(\pi/2 - \theta) = \frac{\hbar}{2} \sin \theta.$$

- A outra forma de calcular a média seria segundo a fórmula $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$, que

forneceria
$$\langle S_x \rangle = {}_u\langle + | S_x | + \rangle_u = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & \sin \theta/2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix}.$$

Ou seja,
$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sin \theta/2 & \cos \theta/2 \\ \cos \theta/2 & \sin \theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} 2 \sin \theta/2 \cos \theta/2 = \frac{\hbar}{2} \sin \theta.$$

- Seguindo um raciocínio clássico, quais seriam as componentes do momento

angular após o feixe ter sido polarizado por \vec{B}_1 do slide 6?
$$\begin{cases} \frac{\hbar}{2} \cos \theta \hat{z} \\ \frac{\hbar}{2} \sin \theta \hat{x} \end{cases}$$

Medidas de spin – Valores médios

- Relaxe agora a condição de $\varphi = 0$. Os átomos que saem do aparelho A_1 estarão no estado $|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\varphi/2} |-\rangle$. Que previsão podemos fazer sobre os valores médios de S_x , S_y , e S_z ? Basta usar $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$.

- Comece por $\langle S_z \rangle = {}_u \langle + | S_z | + \rangle_u$, isto é:

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 e^{+i\varphi/2} & \sin \theta/2 e^{-i\varphi/2} \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 e^{-i\varphi/2} \\ \sin \theta/2 e^{+i\varphi/2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cos \theta.$$

- Em seguida, calcule $\langle S_x \rangle = {}_u \langle + | S_x | + \rangle_u$, que na forma matricial é dada por:

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 e^{+i\varphi/2} & \sin \theta/2 e^{-i\varphi/2} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 e^{-i\varphi/2} \\ \sin \theta/2 e^{+i\varphi/2} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sin \theta/2 e^{-i\varphi/2} & \cos \theta/2 e^{+i\varphi/2} \\ \sin \theta/2 e^{+i\varphi/2} & \cos \theta/2 e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 e^{-i\varphi/2} \\ \sin \theta/2 e^{+i\varphi/2} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta/2 \sin \theta/2 (e^{-i\varphi} + e^{+i\varphi}) = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi. \end{aligned}$$

- De forma análoga, calcule $\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi$

Estes valores médios são iguais às componentes clássicas do momento angular de módulo $\hbar/2$, orientado ao longo do vetor \vec{u} , cujos ângulos polares são: θ e φ .

Note, entretanto que cada medida fornece: $+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$.

Conexão entre física clássica e quântica

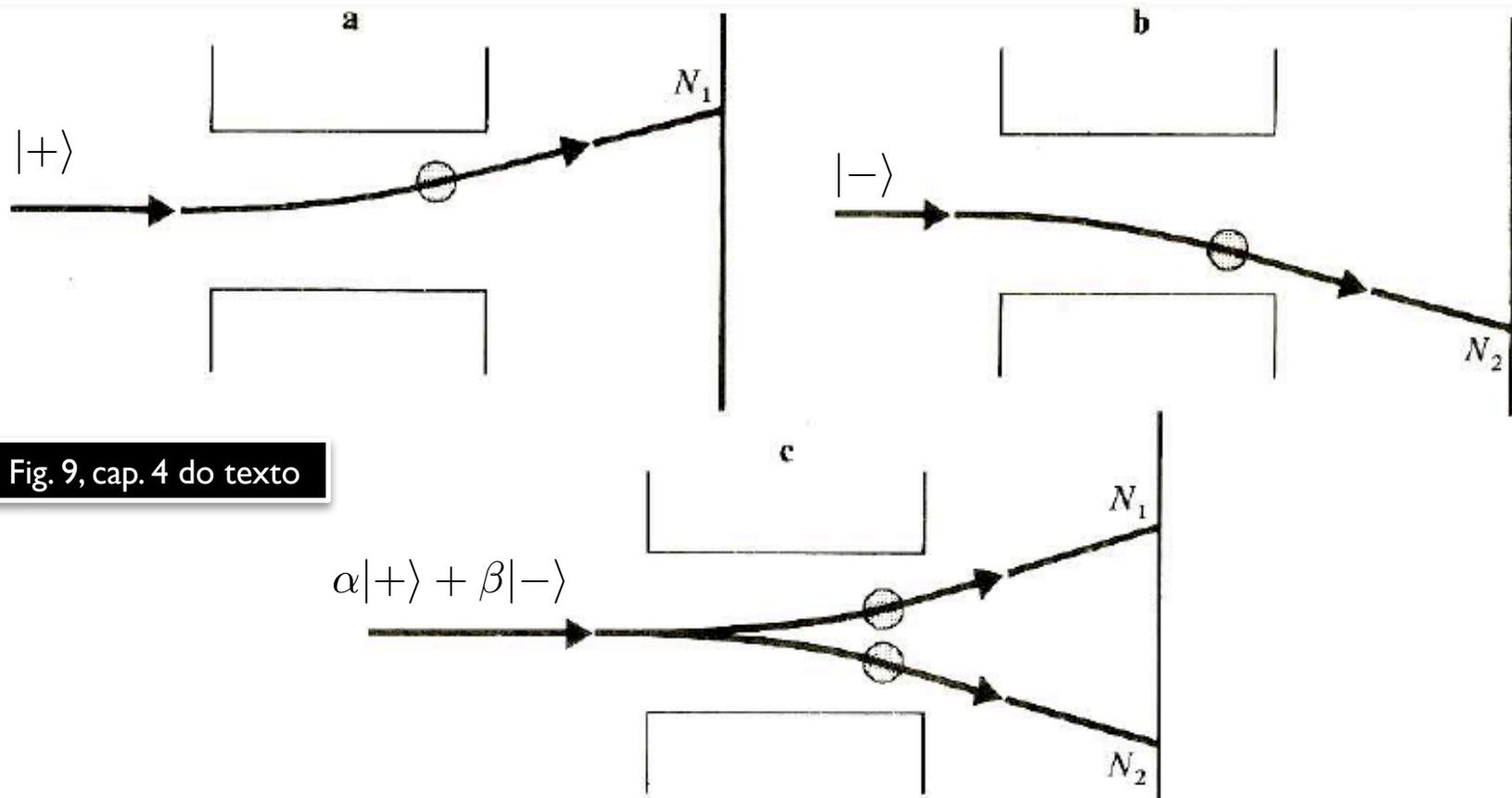


Fig. 9, cap. 4 do texto

- A equação de Schrödinger é linear: a solução de (c) é a combinação das soluções de (a) e (b). Se o pacote é pequeno e o seu centro se move segundo as leis clássicas, (a) e (b) mostram que \vec{r} e \vec{p} podem ser tratados classicamente.
- O mesmo ocorre na situação (c), exceto que o pacote está dividido (combinação de duas trajetórias clássicas). A partícula não segue nenhuma delas (segue as duas - até se meça onde ela se encontra).

Evolução temporal de uma partícula com spin $1/2$ em \vec{B} constante

- Como seria a Hamiltoniana clássica do sistema, considerando que um campo magnético homogêneo atue sobre uma partícula com momento magnético permanente? Levando em conta apenas as coordenadas internas, teríamos para $\vec{B} = B_0 \hat{z}$ atuando em um átomo como momento magnético constante $\vec{M} = \gamma \vec{J}$, uma energia potencial clássica dada por

$$U = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -\mathcal{M}B_0 = -\gamma B_0 \mathcal{J}_z$$

- As unidades de U (energia) são $\frac{[M][L]^2}{[T]^2}$ (tomei as de $\frac{1}{2}mv^2$) e as unidades de \mathcal{J}_z (momento angular) são $\frac{[L][M][L]}{[T]}$ (tomei as de $\vec{r} \times \vec{p}$). Isso permite concluir que as unidades de $-\gamma B_0 \equiv \omega_0$ são de velocidade angular $\frac{1}{[T]}$.

- A Hamiltoniana quântica fica $H = \omega_0 S_z$, onde trocamos $\mathcal{J}_z = \mathcal{S}_z$ por S_z .
- Um sistema governado por essa Hamiltoniana é conservativo, pois ela não depende do tempo, $H(t) = H$. Conforme vimos, a evolução temporal de qualquer estado deste sistema é facilmente obtida, se expandirmos este estado como combinação dos estados estacionários. Para obter os estados estacionários, basta resolver a equação de autovalor:

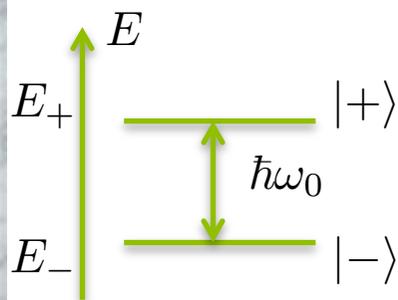
$$H|E, \tau\rangle = E|E, \tau\rangle$$

Evolução temporal de uma partícula com spin $1/2$ em \vec{B} constante

- Como a Hamiltoniana $H = \omega_0 S_z$, é proporcional à S_z , já temos a solução. Os autokets de H são os mesmos que os autokets de S_z e os autovalores precisam apenas ser multiplicados por ω_0 , ou seja

$$H|\pm\rangle = \omega_0 S_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar\omega_0}{2} |\pm\rangle$$

- Existem apenas duas energias e elas são não degeneradas. Para esse sistema existe apenas uma frequência de Bohr $\nu_{+-} = \frac{1}{h}(E_+ - E_-) = \frac{\hbar}{h}\omega_0 = \frac{\omega_0}{2\pi}$.



Comentários

- usei que $\gamma_{\text{prata}} < 0$ e $\therefore \omega_0 > 0 \Rightarrow E_- < E_+$.
- Se $\vec{B} = B_0 \vec{u}$, basta escrever $H = \omega_0 S_u$.

- Precessão de Larmor.

Suponha que o sistema com esta Hamiltoniana H esteja em $t = 0$ no estado

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\varphi/2} |-\rangle.$$

Lembre que qualquer ket do tipo $\alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ pode ser escrito neste formato. Como seria $|\psi(t)\rangle$?

Evolução temporal de uma partícula com spin $1/2$ em \vec{B} constante

- $|\psi(0)\rangle = |+\rangle_u$ corresponde ao ket associado ao autovalor $\hbar/2$ de um experimento de Stern-Gerlach com campo magnético direcionado para \vec{u} , definido por (θ, φ) em coordenadas esféricas. Para preparar o sistema neste estado, precisaríamos realizar esse experimento antes.

- Já aprendemos a calcular $|\psi(t)\rangle$. Basta inserir as fases apropriadas aos estados estacionários e obter $|\psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} e^{-i\frac{E_+}{\hbar}t} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\varphi/2} e^{-i\frac{E_-}{\hbar}t} |-\rangle$.

$$\text{Mas } E_{\pm} = \pm \frac{\hbar\omega_0}{2} \implies |\psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i(\varphi+\omega_0 t)/2} |-\rangle.$$

- Note que esse estado corresponde ao $|+\rangle_u$ de um experimento de Stern-Gerlach com campo magnético direcionado para \vec{u} , definido agora por $(\theta, \varphi + \omega_0 t)$.
- O estado parece estar precessionando ao redor de $B_0 \hat{z}$ com velocidade angular ω . Digo “parece” devido à um resultado estranho $|\psi(t+2\pi/\omega_0)\rangle = -|\psi(t)\rangle$. Para obter $|\psi(t)\rangle$ novamente é preciso esperar $\frac{4\pi}{\omega_0}$. Note $\mathcal{P}(+) = \cos^2 \theta/2$; $\mathcal{P}(-) = \sin^2 \theta/2$
- Um bom exercício é obter valores médios de \mathcal{S}_x , \mathcal{S}_y e \mathcal{S}_z . Note que $[S_z, H] = 0$, $[S_x, H] \neq 0$ e $[S_y, H] \neq 0$ e calcule $\langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle = (\hbar/2) \sin \theta \cos(\varphi + \omega_0 t)$; $\langle \psi(t) | S_y | \psi(t) \rangle = (\hbar/2) \sin \theta \sin(\varphi + \omega_0 t)$; $\langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle = (\hbar/2) \cos \theta$.

Os valores médios rodam ao redor de $B_0 \hat{z}$ com velocidade angular ω_0 .