SISTEMAS DE DOIS NÍVEIS

SISTEMAS COM ESPAÇOS DE DIMENSÃO 2 SÃO COMUNS E IMPORTANTES. ELES TODOS TÊM UMA ESTRUTURA MUITO PARECIDA COM O SISTEMA DE SPIN ½ QUE TEMOS VISTO ATÉ AQUI. NA VERDADE, DO PONTO DE VISTA MATEMÁTICO, HÁ UMA COMPLETA CORRESPONDÊNCIA ENTRE ESSES DOIS TIPOS DE SISTEMAS, COMO FICARÁ EVIDENTE.

DEFINIÇÃO DO PROBLEMA:

COMEÇAMOS POR UM SISTEMA COM ESPAÇO DE DIMENSÃO 2, ONDE HÁ UMA BASE $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ DE AUTO-ESTADOS DE UM HAMILTONIANO INICIAL $\underline{H_0}$ (GERALMENTE DITO NÃO PERTURBADO):

$$H_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_1\rangle \qquad \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$$
$$H_0|\varphi_2\rangle = E_2|\varphi_2\rangle \qquad \text{(ORTONORMALIDADE)}$$

O HAMILTONIANO TOTAL TEM UMA CONTRIBUIÇÃO ADICIONAL $\underline{W}$ (A PERTURBAÇÃO)

$$H = H_0 + W$$

OS AUTO-VALORES DO HAMILTONIANO TOTAL $\underline{H}$ SÃO:

$$H|\psi_+\rangle = E_+|\psi_+\rangle \qquad \langle\psi_s|\psi_{s'}\rangle = \delta_{s,s'}$$
$$H|\psi_-\rangle = E_-|\psi_-\rangle \qquad \boxed{s = \pm}$$

NA BASE $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$, TOMAREMOS $\underline{W}$ COMO COMPLETAMENTE GERAL:

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}$$

COMO $\underline{W}$ É HERMITIANO: $\begin{cases} W_{11}, W_{22} \in \mathbb{R} \\ W_{12} = W_{21}^* \end{cases}$

CLARO QUE SE $W \to 0$: $|\psi_s\rangle \longrightarrow |\varphi_i\rangle$

A MATRIZ DE H NA BASE $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ É:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{E}_1 & W_{12} \\ W_{21} & \tilde{E}_2 \end{pmatrix}$$

ONDE DEFINIMOS $\tilde{E}_1 = E_1 + W_{11}$ E $\tilde{E}_2 = E_2 + W_{22}$

A DIAGONALIZAÇÃO DESSE H É TRIVIAL MAS LONGA (VER COMPLEMENTO B_{IV}).
OS AUTO-VALORES SÃO:

$$E_{\pm} = E_m \pm \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}$$

ONDE: $E_m = \dfrac{\tilde{E}_1 + \tilde{E}_2}{2}$ É A MÉDIA DE $\tilde{E}_1, \tilde{E}_2$

E $\Delta = \dfrac{\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2}{2}$ É A METADE DA DIFERENÇA ENTRE $\tilde{E}_1, \tilde{E}_2$

OS AUTO-ESTADOS CORRESPONDENTES SÃO:

$$\left.\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|\varphi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle &= -\sin\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle + e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}|\varphi_2\rangle \end{aligned}\right\}$$

ESCOLHA DE FASE DIFERENTE DO LIVRO

COM: $\tan\theta = \dfrac{|W_{12}|}{\Delta}$, $\theta \in [0, \pi)$

$$e^{i\phi} = \frac{W_{21}}{|W_{21}|} \quad ; \quad \phi = \arg(W_{21}), \ \phi \in [0, 2\pi)$$

NOTEM A SEMELHANÇA COM AUTO-ESTADOS DE S_u!

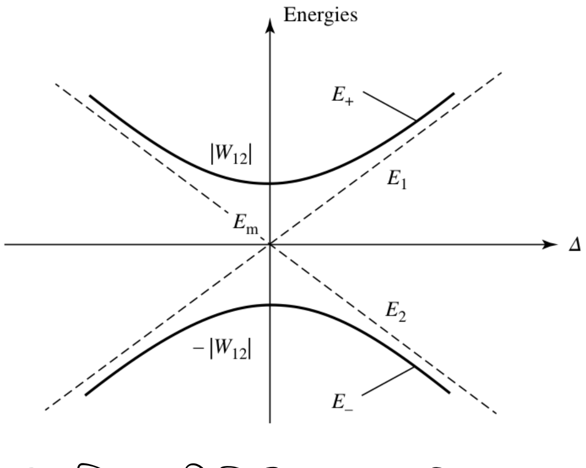
TODA A ESTRUTURA NÃO TRIVIAL ADVÉM DE $W_{12} \neq 0$. DE FATO, SE $W_{12} = 0$:

$$E_\pm = E_m \pm \Delta = \begin{cases} \tilde{E}_1 = E_1 + W_{11} \\ \tilde{E}_2 = E_2 + W_{22} \end{cases}$$

E: $\theta = 0 \Rightarrow |\psi_+\rangle = |\varphi_1\rangle, \; |\psi_-\rangle = |\varphi_2\rangle$

VÊ-SE QUE O EFEITO DE $\underline{W}$ É APENAS MUDAR OS AUTO-VALORES MAS NÃO OS AUTO-VETORES.

A DIFERENÇA DE ENERGIA $E_+ - E_-$ NÃO DEPENDE DE E_m. PORTANTO, É INTERESSANTE PLOTAR $E_\pm$ COMO FUNÇÃO DE Δ PARA $|W_{12}|$ FIXO:



"REPULSÃO DE NÍVEIS"

$\underline{E_+}$ E $\underline{E_-}$ DESCREVEM DUAS <u>HIPÉRBOLES</u>

NOTEM ALGUNS ASPECTOS:

1) QUANDO $|\Delta| << |W_{12}|$:

(ACOPLAMENTO FORTE)

$$E_\pm \cong E_m \pm |W_{12}|$$ (NO GRÁFICO, $E_m = 0$)

2) QUANDO $|\Delta| >> |W_{12}|$, PODEMOS EXPANDIR A RAIZ QUADRADA $\sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}$ PARA OBTER

(ACOPLAMENTO FRACO)

$$E_\pm = E_m \pm |\Delta| \pm \frac{|W_{12}|^2}{|\Delta|}$$

NESSE CASO, $E_\pm$ TENDEM A $\tilde{E}_1$ E $\tilde{E}_2$ ASSINTOTICAMENTE:

$\Delta > 0$: $E_+ \longrightarrow \tilde{E}_1$ e $E_- \longrightarrow \tilde{E}_2$

$\Delta < 0$: $E_+ \longrightarrow \tilde{E}_2$ e $E_- \longrightarrow \tilde{E}_1$

PARA OS AUTO-VETORES TEMOS:

ACOPLAMENTO FORTE $(|\Delta| << |W_{12}|)$: $\theta \simeq \frac{\pi}{2}$

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\varphi_1\rangle + e^{i\phi}|\varphi_2\rangle\right]$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[-|\varphi_1\rangle + e^{i\phi}|\varphi_2\rangle\right]$$

OS AUTO-ESTADOS SÃO BEM DIFERENTES DE $|\varphi_{1,2}\rangle$

ACOPLAMENTO FRACO $(|\Delta| >> |W_{12}|)$:

$$\theta \simeq \frac{|W_{12}|}{\Delta} << 1$$

$$|\psi_+\rangle \simeq |\varphi_1\rangle + \frac{W_{21}}{2\Delta}|\varphi_2\rangle$$

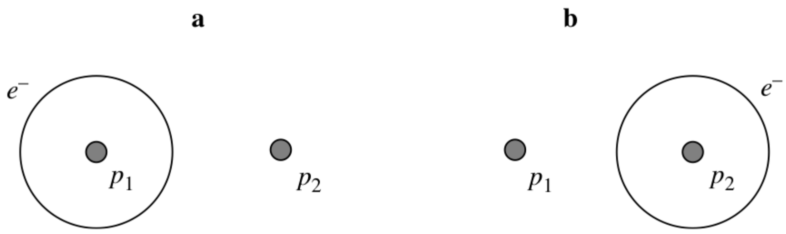
$$|\psi_-\rangle \simeq e^{i\phi}|\varphi_2\rangle - \frac{|W_{21}|}{2\Delta}|\varphi_1\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = e^{i\phi}\left[|\varphi_2\rangle - \frac{W_{12}}{2\Delta}|\varphi_1\rangle\right]$$

(A FASE GLOBAL NA ÚLTIMA EXPRESSÃO PODE SER OMITIDA)

OS AUTO-ESTADOS AGORA SÃO PEQUENAS PERTURBAÇÕES DOS AUTO-ESTADOS DE H_0

ALGUNS EXEMPLOS IMPORTANTES DESSE HAMILTONIANO TÊM $\tilde{E}_1 = \tilde{E}_2$ $(\Delta = 0)$ POR SIMETRIA. ESSE É O CASO DO ESTADO DO ELÉTRON NUM ÍON H_2^+



OS PRÓTONS p_1 E p_2 PODEM SER TOMADOS COMO FIXOS, JÁ QUE SÃO MUITO MAIS PESADOS QUE O ELÉTRON.

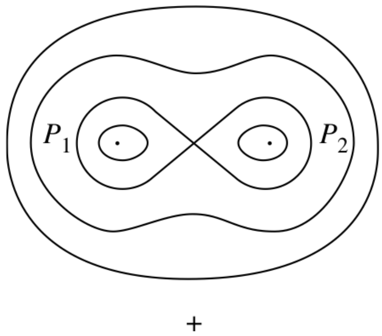
UM ESTADO APROXIMADO, $|\varphi_1\rangle$, CORRESPONDE À SITUAÇÃO DA FIGURA a ACIMA, ONDE O ELÉTRON TEM UMA FUNÇÃO DE ONDA PRÓXIMA a p_1. NO OUTRO ESTADO, $|\varphi_2\rangle$, O ELÉTRON ESTÁ PRÓXIMO A p_2. OS DOIS ESTADOS TÊM A MESMA ENERGIA, POR SIMETRIA $(\Delta = 0)$. NESSE CASO, O ESTADO DE MENOR ENERGIA É:

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[-|\varphi_1\rangle + e^{i\phi}|\varphi_2\rangle\right]; \quad E_- = E_0 - |W_{12}|$$

ONDE E_0 É A ENERGIA DE $|\varphi_{1,2}\rangle$.

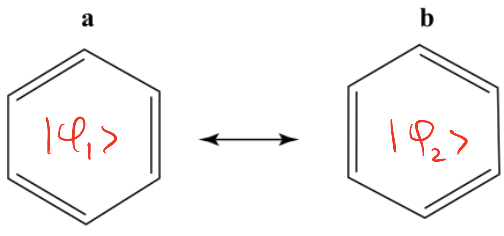
O ESTADO $|\psi_-\rangle$ TEM O ELÉTRON NA REGIÃO ENTRE OS PRÓTONS

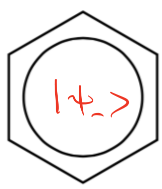
$|\psi_-\rangle$



ESSE É UM EXEMPLO DE LIGAÇÃO QUÍMICA COVALENTE. É A MECÂNICA QUÂNTICA QUE ESTÁ POR TRÁS DA ESTABILIDADE DA LIGAÇÃO QUÍMICA.

ALGO SEMELHANTE OCORRE NA MOLÉCULA DE BENZENO.



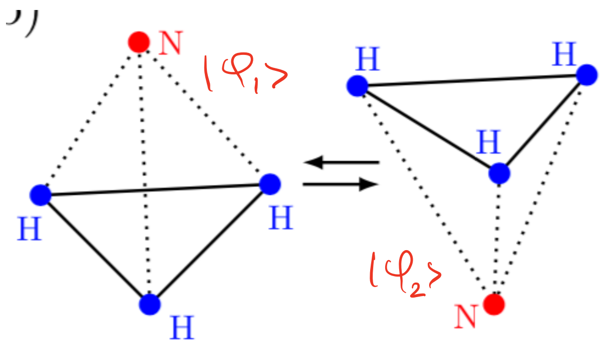


ESTADO FUNDAMENTAL

AS DUAS FIGURAS REPRESENTAM DUAS MANEIRAS DE DISTRIBUIR AS 3 LIGAÇÕES DUPLAS

POR SIMETRIA, ELAS TÊM A MESMA ENERGIA NÃO PERTURBADA $\tilde{E}_1 = \tilde{E}_2$. MAS A PERTURBAÇÃO W_{12} MISTURA QUANTICAMENTE OS ESTADOS $|\varphi_1\rangle$ E $|\varphi_2\rangle$ DANDO O ESTADO $|\psi_-\rangle$ COM ENERGIA MAIS BAIXA $E_- = E_0 - |W_{12}|$

FINALMENTE, UM EXEMPLO QUE ENVOLVE O MOVIMENTO DOS NÚCLEOS ATÔMICOS: A MOLÉCULA DE AMÔNIA, NH_3



AS DUAS POSIÇÕES DO ÁTOMO DE NITROGÊNIO SÃO EQUIVALENTES, MAS SE MISTURAM POR UMA PERTURBAÇÃO W_{12}, E O ESTADO FUNDAMENTAL $|\psi_-\rangle$ É UMA COMBINAÇÃO LINEAR DOS DOIS ESTADOS NÃO PERTURBADOS $|\varphi_1\rangle$ E $|\varphi_2\rangle$.

DINÂMICA

O QUE ACONTECE SE O SISTEMA É PREPARADO EM UM DOS ESTADOS NÃO PERTURBADOS, DIGAMOS $|\varphi_1\rangle$? PARA ISSO, ESCREVEMOS PRIMEIRO O ESTADO NA BASE DE AUTO-ESTADOS DE H, ONDE A EVOLUÇÃO TEMPORAL É MAIS SIMPLES:

$$|\psi(t)\rangle = C_+(0)\, e^{-iE_+t/\hbar}|\psi_+\rangle + C_-(0)\, e^{-iE_-t/\hbar}|\psi_-\rangle$$

NO INSTANTE INICIAL:

$$|\psi(0)\rangle = C_+(0)|\psi_+\rangle + C_-(0)|\psi_-\rangle = |\varphi_1\rangle$$

ONDE:

$$\left.\begin{aligned} C_+(0) &= \langle\psi_+|\varphi_1\rangle = \cos\frac{\theta}{2} \\ C_-(0) &= \langle\psi_-|\varphi_1\rangle = -\sin\frac{\theta}{2} \end{aligned}\right\} \text{VER FÓRMULAS ANTERIORES PARA } |\psi_\pm\rangle$$

LOGO:

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-iE_+t/\hbar}|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\, e^{-iE_-t/\hbar}|\psi_-\rangle$$

QUAL É A PROBABILIDADE DE SE ENCONTRAR O SISTEMA EM $|\varphi_2\rangle$? PARA ISSO, PRECISAMOS DE:

$$\langle\varphi_2|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-iE_+t/\hbar}\langle\varphi_2|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\, e^{-iE_-t/\hbar}\langle\varphi_2|\psi_-\rangle$$

DAS FÓRMULAS ANTERIORES:

$$\langle\varphi_2|\psi_+\rangle = e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$\langle\varphi_2|\psi_-\rangle = e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}$$

PORTANTO:

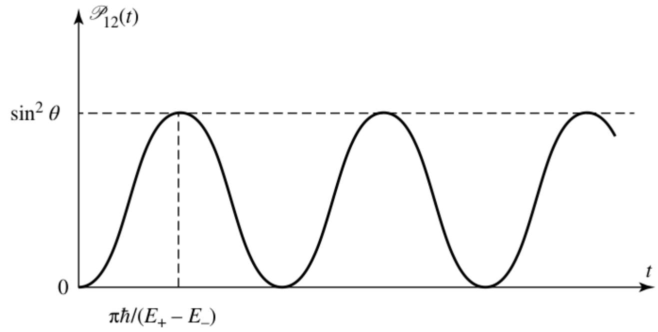
$$P_{1\to 2}(t) = \left|\frac{e^{i\phi}}{2}\sin\theta\left(e^{-iE_+t/\hbar} - e^{-iE_-t/\hbar}\right)\right|^2$$

$$|(\ )|^2 = 1 + 1 - 2\,\mathrm{Re}\left[e^{i(E_+-E_-)t/\hbar}\right]$$

$$= 2\left\{1 - \cos\left[(E_+-E_-)t/\hbar\right]\right\}$$

$$P_{1\to 2}(t) = \frac{\sin^2\theta}{2}\left\{1 - \cos\left[(E_+-E_-)t/\hbar\right]\right\}$$

$$P_{1\to 2}(t) = \sin^2\theta\,\sin^2\left[\frac{(E_+-E_-)t}{2\hbar}\right]$$ "FÓRMULA DE RABI"



VEMOS QUE O SISTEMA OSCILA ENTRE OS ESTADOS $|\varphi_1\rangle$ E $|\varphi_2\rangle$. NO CASO IMPORTANTE EM QUE $\tilde{E}_1 = \tilde{E}_2$: $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\frac{E_+ - E_-}{2} = |W_{12}|$

$$P_{1\to 2}(t) = \sin^2\left[\frac{|W_{12}|\,t}{\hbar}\right]$$

PERÍODO DE OSCILAÇÃO: $T = \frac{h}{|W_{12}|}$