

AULA 7

Problema de dois estados dependente do tempo,
Ressonâncias Nuclear Magnéticas, masers etc

Problemas exatos: uma variedade. Este tem
importância prática e é exato

$$H_0 = E_1 |1\rangle\langle 1| + E_2 |2\rangle\langle 2| \quad (E_2 > E_1)$$

$$V(t) = \hbar e^{i\omega t} |1\rangle\langle 2| + \hbar e^{-i\omega t} |2\rangle\langle 1|$$

onde $\hbar$ e ω são reais positivos

note $V_{11} = 0$ $V_{22} = 0$ e $V_{12} = V_{21}^* = \hbar e^{i\omega t}$

Separa-se $C_1(0) = 1$ $C_2(0) = 0$ (Problema 30 SAKURAI)

$$|C_2(t)|^2 = \frac{\hbar^2/\hbar^2}{\hbar^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \left[\sqrt{\frac{\hbar^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} \right]^{1/2} t$$

$$|C_1(t)|^2 = 1 - |C_2(t)|^2 \quad \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

$|c_2(t)|^2$ apresenta um comportamento oscilatório com frequências

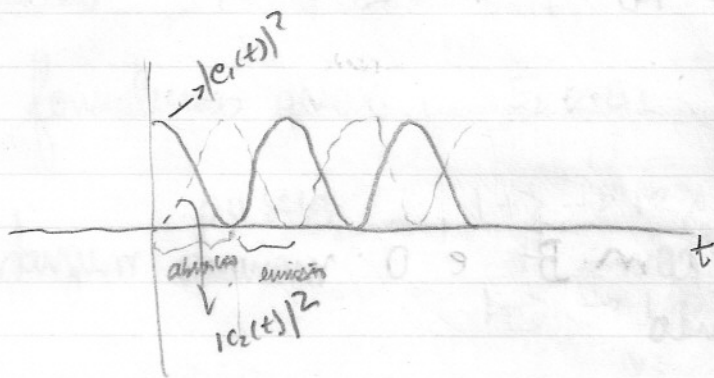
$$\Omega = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{4}\right) + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}$$

A Amplitude $|c_2|^2 \rightarrow \frac{\hbar^2/\hbar^2}{\hbar^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2}$ e' grande opdo

$\omega = \omega_{21}$ A amplitude vai para 1. O que isto quer dizer?

Faço um gráfico de $|c_1(t)|^2$ e $|c_2(t)|^2$ opdo
 $\omega = \omega_{21}$ ($\Omega = \frac{\hbar}{\hbar}$)

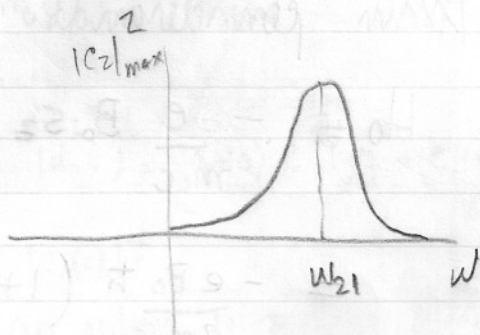
$$|c_2(t)|^2 = \sin^2 \frac{\hbar t}{\hbar} \quad \text{e} \quad |c_1(t)|^2 = \cos^2 \frac{\hbar t}{\hbar}$$



$$\frac{\hbar t}{\hbar} = \pi/2$$

$$t = \frac{\hbar \pi}{\hbar^2}$$

plote tb $|c_2(t)|^2_{\max}$ com função de ω



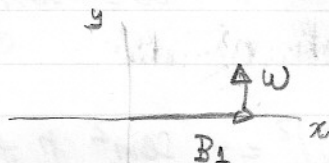
Ressonância magnética de spin

O problema de 2 estados tem muitas aplicações.
Entre elas:

Considerem um sistema de spin $1/2$ (1 elétron ligado)
sujeito a um campo magnético uniforme
independente do tempo na direção $\underline{z}$

e
a um campo magnético dependente no tempo
rodando no plano xy

$$\vec{B} = B_0 \hat{z} + B_1 (\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t)$$



$B_0 \hat{z}$ para nosso H_0

$$\text{e } B_1 \hat{r} = V$$

O que interage com $\vec{B}$ é o momento magnético
do elétron pontuando

$$\vec{\mu} = \frac{e}{m_e c} \vec{S}$$

Assim considerando o núcleo da ruleta

$$H_0 = - \frac{e}{m_e c} B_0 S_z = - \frac{e B_0}{m_e c} S_z |+\rangle\langle+| - \frac{e B_0}{m_e c} S_z |- \rangle\langle -|$$

$$= - \frac{e B_0 \hbar}{2 m_e c} (|+\rangle\langle+| - |- \rangle\langle -|)$$

$$e \quad V(t) = -\frac{e B_1}{m_e c} (S_x \cos \omega t + S_y \sin \omega t)$$

lembrando que $S_x = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \{ |+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +| \}$

e $S_y = \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \{ -|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +| \}$

$$\text{Assim } V(t) = -\frac{e B_1 \hbar}{2 m_e c} \left[\cos \omega t (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) + \sin \omega t (-|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) \right]$$

Olhando p/ Ho temos $E_+ = -\frac{e B_0 \hbar}{2 m_e c}$ e $E_- = +\frac{e B_0 \hbar}{2 m_e c}$

e como $e < 0$ $E_+ > E_-$

no formalismo qual $E_2 > E_1$

ou seja $|+\rangle \rightarrow |2\rangle$ nível superior

$|-\rangle \rightarrow |1\rangle$ nível inferior

$$\omega_{21} \equiv \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = -\frac{e B_0}{m_e c} = \frac{|e| B_0}{m_e c}$$

Este problema nós já resolvemos:

Se $|a\rangle = c_+(0)|+\rangle + c_-(0)|-\rangle$ $|a, t\rangle = c_+(t)e^{-\frac{iE_+ t}{\hbar}}|+\rangle + c_-(t)e^{-\frac{iE_- t}{\hbar}}|-\rangle$

note que $|c_+(t)|^2 = |c_+(0)|^2$ e $|c_-(t)|^2 = |c_-(0)|^2$

sempre que $\langle S_x, y \rangle$ rodam ao redor de z

Assim adicionamos H_2

$|c_+|^2$ e $|c_-|^2$ mudarão?

basta fazer a relação

$$\frac{-e\hbar B_1}{2m_e c} \rightarrow \mu \quad \omega \rightarrow \omega$$

lembrando que

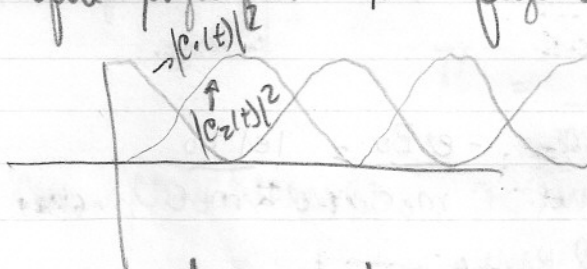
$$V(t) = \mu \left[\cos \omega t (|+\rangle\langle -| + |- \rangle\langle +|) + i \sin \omega t (-|+\rangle\langle -| + |- \rangle\langle +|) \right]$$

$$= \mu (\cos \omega t - i \sin \omega t) |+\rangle\langle -| + \mu (\cos \omega t + i \sin \omega t) |- \rangle\langle +|$$

$$= \mu e^{i\omega t} |- \rangle\langle +| + \mu e^{-i\omega t} |+\rangle\langle -|$$

lembrando $|+\rangle \rightarrow |2\rangle$
 $|- \rangle \rightarrow |1\rangle$

O que significa a figura?



que o sistema está pulando de p_1 para p_2 e vice versa

NA prática é difícil fazer campos que rodem.
 De fato isto não é problema pois um campo
 oscilante na direção x é frequentemente bom.
 Para ver isto note que

$$2B_1 \hat{x} \cos \omega t = B_1 (\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t) + B_1 (\hat{x} \cos \omega t - \hat{y} \sin \omega t)$$

rotação 1

rotação 2

um dado efeito
 obtido com frequência
 ω como campo rodando
 no sentido contrário ao
 relógio

pode ser obtido
 de um campo rodando
 no sentido do relógio se
 formosmos $-\omega$ no
 lugar de ω

Assum supondo $\omega \approx \omega_{21}$ e $\frac{B_1}{B_0} \ll 1$

e lembrando

$$\omega_{21} = \frac{-eB_0}{m_e c} \quad \text{e} \quad -\frac{e\hbar B_1}{2m_e c} = \hbar$$

$$\frac{B_1}{B_0} \ll 1 \rightarrow \frac{B_1}{B_0} = \frac{-2m_e c \hbar}{e\hbar} \frac{-e}{m_e c \omega_{21}} = \frac{2\hbar}{\hbar \omega_{21}} \ll 1$$

$$\therefore \boxed{\frac{\hbar}{\hbar} \ll \omega_{21}}$$

Assum

quando $\omega - \omega_{21}$ for próximo de zero
nas expressões de $|c_2|^2$ e $-\Omega$ p/ B' contra
o relógio

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\hbar^2/\hbar^2}{\hbar^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \Omega t$$

$$\Omega = \sqrt{\frac{\hbar^2}{\hbar^2} - \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}$$

os efeitos do campo rodando a favor o relógio

correspondem a situação $\omega - \omega_{21} \sim 2\omega_{21}$

o que torna Ω muito grande (oscilações rápidas) e

$|c_2(t)|_{\max}$ muito pequeno (com amplitudes pequenas)

ou seja na região de ressonância p/ o campo
rodando contra o relógio a contribuição do
campo rodando a favor do relógio é
desprezível.

MAR (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation)

Considere a molécula de Amônia (p/ CH4)

Teoria de perturbação dependente do tempo. Tratamento

através da Série de Dyson. $\downarrow$ Impulsão $\rightarrow$ problemas exatos
p/ raios

Primeiro, Dirac (1927)

$$C_n(t) = C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + C_n^{(2)} + \dots$$

$\downarrow$ $\downarrow$
ordem zero primeira etc
ordem

suponha inicialmente q' o estado i está populado

o que implica em
 $C_n^{(0)} = \delta_{ni}$ (independente de t)

A equação dos $C_n(t)$ é do tipo

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \\ \dot{C}_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & \dots \\ i\omega_{21}t & V_{22} & \\ V_{21}e & & \\ \vdots & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Como V começa em λ^1 , igualar termos de mesma ordem em λ
implica em ordem de $C_n^{(k)}$ inferior a ordem de $C_n^{(k+1)}$. Comece com $C_n^{(0)}$
e retire uma expressão para $C_n^{(1)}$ integre e obtenha $C_n^{(1)}$
faça de novo e obtenha $C_n^{(2)}$ etc

Método Alternativo (série de Dyson)

Em vez de trabalharmos com $C_n(t)$, propomos olhar para $U_I(t, t_0)$ no enfoque de interação.

Faremos uma expansão perturbativa para $U_I(t, t_0)$ e no fim relacionaremos os elementos de matriz de U_I com $C_n(t)$.

Ferramenta útil, principalmente em problemas mais avançados tais como teoria quântica relativística de campos e teoria de muitos corpos

Começamos por:

$$| \alpha, t_0; t \rangle_I = U_I(t, t_0) | \alpha, t_0; t_0 \rangle_I$$

↓
definição de $U_I(t, t_0)$

Como
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \alpha, t_0; t \rangle_I = V_I | \alpha, t_0; t \rangle_I$$

temos
$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) \right) | \alpha, t_0; t_0 \rangle_I = V_I U_I(t, t_0) | \alpha, t_0; t_0 \rangle_I$$

↓
independe
de t

$$\forall | \alpha, t_0; t_0 \rangle_I \quad \therefore \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I U_I(t, t_0)$$

7/ resolve o problema, resolvemos esta equação diferencial, obtemos $U_I(t, t_0)$ e 0
usamos em $U_I(t, t_0; t) = U_I(t, t_0) U_I(t, t_0; t_0)_I$

Com que condição de contorno? $U_I(t_0, t_0) = 1$

integrando dos dois lados temos

$$i\hbar \int_{t_0}^t \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

$$U_I(t, t_0) - U_I(t_0, t_0) = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

1

O problema está resolvido? Não. $U_I(t, t_0)$ aparece dos dois lados.

uma solução iterativa:

$$U_I(t, t_0) = \underset{U_I(t_0, t_0)}{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} V_I(t'') U_I(t'', t_0) dt'' \right] dt'$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') dt' + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') + \dots$$

$$\left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} V_I(t') V_I(t'') \dots V_I(t^{(n)}) \rightarrow \text{série de Dyson}$$

Probabilidade de transição

O desenvolvimento de $U_I(t, t_0)$ nos leva a

$$|i, t_0 = 0; t\rangle_I = U_I(t, 0) |i\rangle$$

$$= \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n | U_I(t, 0) | i \rangle}_{C_n(t)}$$

exploramos isto

Primeiro a conexão entre $U_I(t, t_0)$ e $U(t, t_0)$
tínhamos definido $|\alpha, t_0; t\rangle_I$ tal que

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle_I &= e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\alpha, t_0; t\rangle_S = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} U(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_S \\ &= e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} U(t, t_0) \underbrace{e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} |\alpha, t_0; t_0\rangle_I}_{\text{inversa de } |\alpha, t_0; t\rangle_I = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\alpha, t_0; t\rangle_S} \end{aligned}$$

$\therefore$ comparando com $|\alpha, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle$

temos
$$U_I(t, t_0) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} U(t, t_0) e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}}$$

Assim
$$C_n(t) = \langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(E_n t_0 - E_i t_0)} \langle n | U(t, t_0) | i \rangle$$

foi definida na disciplina de quântica I como amplitude de transição

Assim $\langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle$ não é uma amplitude de transição
mas vale

$$|\langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle|^2 = |\langle n | U(t, t_0) | i \rangle|^2$$

Se o elemento de matriz for com kets que não
são autoestados de H_0 , temos em geral =

$$|\langle b' | U_I(t, t_0) | a' \rangle| \neq |\langle b' | U(t, t_0) | a' \rangle|$$

$$A | a' \rangle = a' | a' \rangle \quad \text{e} \quad [A, H_0] \neq 0 \quad [B, H_0] \neq 0 \\ B | b' \rangle = b' | b' \rangle$$

Caso você precise mesmo do elemento envolvendo $| a' \rangle$ e $| b' \rangle$

dependa des em termos dos autoestados de H_0 e desenvolvendo
a expressão.

Retornando a $\overline{\langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle}$

Normalmente tomamos $| i, t_0, t_0 \rangle_S = | i \rangle$

se fizermos isto

$$| i, t_0, t_0 \rangle_I = e^{\frac{i H_0 t_0}{\hbar}} | i, t_0, t_0 \rangle_S = e^{\frac{i E_0 t_0}{\hbar}} | i \rangle$$

Se a ideia é trabalhar no enfoque de interação
é conveniente tomar

$$| i, t_0, t_0 \rangle_S = e^{-\frac{i E_0 t_0}{\hbar}} | i \rangle \quad \text{pois assim}$$

$$| i, t_0, t_0 \rangle_I = | i \rangle$$

futuro

$$|i, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0) |i\rangle$$

$$= \sum_n c_n |n\rangle$$

$$= \sum_n |n\rangle \langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle$$

$$\therefore c_n = \langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle$$

Lembrando da série de Dyson

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') dt' + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'')$$

$$+ \dots + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} V_I(t') \dots V_I(t^{(n)})$$

podemos obter por comparação com

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} \dots$$

$$c_n^{(0)} = \delta_{ni}$$

$$c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle n | V_I(t') | i \rangle dt' = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t') dt'$$

$\downarrow$
 $e^{i\frac{\hbar\omega_{ni}}{\hbar}t'} V(t') e^{-i\frac{\hbar\omega_{ni}}{\hbar}t'}$

$$c_n^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle n | V_I(t') V_I(t'') | i \rangle$$

$$= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' e^{iW_{nm}t'} V_{nm}(t') e^{iW_{mi}t''} V_{mi}(t'')$$

onde usamos $W_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$

A probabilidade de transição é então obtida por

$$P(i \rightarrow n) = |c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots|^2$$

$$p \neq n$$