

Potenciais dependentes do tempo: Enfoque de interação

Até aqui $H(t) = H$. Agora consideraremos $H = H_0 + V(t)$, onde $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ é conhecido. Vamos estudar a probabilidade do sistema se encontrar inicialmente em $|i\rangle$ e devido à $V(t) \neq 0$, com o passar do tempo, mudar para $|n\rangle$.

Como V depende do tempo: o operador evolução temporal não pode ser escrito, simplesmente, por $e^{-i\frac{H}{\hbar}t}$. Para melhor formular o problema, considere o sistema

$$\text{em um estado arbitrário, } \left\{ \begin{array}{l} \text{em } t = 0 \rightarrow |\alpha\rangle = \sum_n C_n(0)|n\rangle \\ \text{em } t \text{ com } V(t) = 0 \forall t \rightarrow |\alpha\rangle = \sum_n C_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle \\ \text{em } t \text{ com } V(t) \neq 0 \rightarrow |\alpha\rangle = \sum_n C_n(t)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle \end{array} \right.$$

Usei apenas a "completeza" do espaço

A evolução temporal de $C(t)$ é devido exclusivamente ao potencial V . Nestas condições, qual a probabilidade de encontrar o sistema em $|n\rangle$? $|C_n(t)|^2$

Enfoque de Interação

Uma estratégia para calcular isso

kets de Schrödinger $\left\{ \begin{array}{l} |\alpha, t_0; t_0\rangle_S = |\alpha\rangle \text{ tome } t_0 = 0, \text{ se quiser.} \\ \Downarrow \text{ (futuro)} \\ |\alpha, t_0; t\rangle_S = \mathcal{U}(t, t_0)|\alpha, t_0; t_0\rangle_S \text{ (vimos em FI001)} \end{array} \right.$

Potenciais dependentes do tempo: Enfoque de interação

Definiremos $\begin{cases} |\alpha, t_0; t\rangle_I \equiv e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} |\alpha, t_0; t\rangle_S & \text{Efeito de } H_0 \text{ sobre o ket é congelado} \\ A_I = e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} A_S e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} & \text{Evolui segundo } H_0 \end{cases}$ $V_S = V$

Note que em $t = 0$, $|\alpha, t_0; 0\rangle_I = |\alpha, t_0; 0\rangle_S$ e que $V_I = e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} \overbrace{V} e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t}$

Relação com enfoque de Heisenberg. Compare: $\begin{cases} |\alpha\rangle_H = e^{i\frac{H}{\hbar}t} |\alpha, t_0; t\rangle_S & \text{Efeito de } H \text{ sobre o ket é congelado} \\ A_H = e^{i\frac{H}{\hbar}t} A_S e^{-i\frac{H}{\hbar}t} & \end{cases}$

Equações fundamentais. Considere a derivada

Evolui segundo H

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} |\alpha, t_0; t\rangle_S) = \\ &= i\hbar \cdot i \frac{H_0}{\hbar} e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} |\alpha, t_0; t\rangle_S + e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_S = \\ &= -H_0 e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} |\alpha, t_0; t\rangle_S + e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} (H_0 + V) |\alpha, t_0; t\rangle_S = \\ &= e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} V |\alpha, t_0; t\rangle_S = \underbrace{e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} V e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t}}_{V_I} \underbrace{e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} |\alpha, t_0; t\rangle_S}_{|\alpha, t_0; t\rangle_I} \end{aligned}$$

\therefore $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_I = V_I |\alpha, t_0; t\rangle_I$ uma eq. de Schrödinger com H trocado por V_I

Potenciais dependentes do tempo: Enfoque de interação

Se A não depende do tempo, quanto vale $\frac{dA_I}{dt}$?

$$\begin{aligned} \frac{dA_I}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} A e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \right) = \\ &= i\frac{H_0}{\hbar} e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} A e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} + e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} A \left(-i\frac{H_0}{\hbar} \right) e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} = \\ &= \frac{i}{\hbar} H_0 A_I - \frac{i}{\hbar} A_I H_0 = \frac{1}{i\hbar} [A_I, H_0] \end{aligned}$$

RESUMO

	<i>Heisenberg</i>	<i>Interação</i>	<i>Schrödinger</i>
Estado	Não Muda	Evolui com: V_I	Evolui com: H
Observável	Evolui com: H	Evolui com: H_0	não muda

No enfoque de interação, continuamos a usar $|n\rangle$ como base, assim ($p/ t_0 = 0$),

temos: $|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_n C_n(t) |n\rangle$. Multiplique por $e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t}$ e obtenha

$$e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} |\alpha, t_0; t\rangle_I = |\alpha, t_0; t\rangle_S = \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} |n\rangle = \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} |n\rangle$$

O que é consistente com a equação definida no Slide 1

Potenciais dependentes do tempo: Enfoque de interação

O que falta? Precisamos de uma equação diferencial para $C_n(t)$

Temos $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_I = V_I |\alpha, t_0; t\rangle_I$. Multiplique por $\langle n|$ e insira $\mathbb{1} = \sum |m\rangle\langle m|$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\langle n|\alpha, t_0; t\rangle_I}_{C_n(t)} = \sum_m \langle n|V_I|m\rangle \underbrace{\langle m|\alpha, t_0; t\rangle_I}_{C_m(t)}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m \langle n|V_I|m\rangle C_m(t)$$

$$\langle n|e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} V e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t}|m\rangle = \langle n|V|m\rangle e^{i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t} = V_{nm} e^{i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t}$$

Assim, temos a equação para $C_n(t)$, dada por:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm}t} C_m(t) \text{ com } \omega_{nm} \equiv \frac{E_n - E_m}{\hbar} \text{ ou matricialmente}$$

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

Problemas de dois níveis dependente do tempo

Ressonância Nuclear Magnética, Masers, etc.

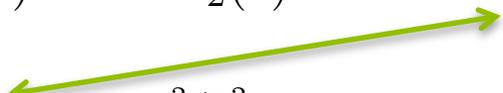
Problemas exatos: uma raridade. Este tem importância prática e é exato.

Para começar, definimos

$$\begin{cases} H_0 = E_1|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2| \text{ com } E_2 > E_1 \\ V(t) = \gamma e^{i\omega t}|1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t}|2\rangle\langle 1| \text{ com } \gamma, \omega > 0 \end{cases}$$

Note que $V_{11} = 0, V_{22} = 0$ e $V_{12} = V_{21}^* = \gamma e^{i\omega t}$. Resolva o problema 5.30 do

lousa 

livro e obtenha  **Fórmula de Rabi**

$$\begin{cases} \text{para } C_1(0) = 1 \text{ e } C_2(0) = 0 \\ |C_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2\{[\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4]^{1/2}t\} \\ |C_1(t)|^2 = 1 - |C_2(t)|^2 \end{cases}$$

voluntário?

$|C_2(t)|^2$, probabilidade de encontrar o estado de energia maior E_2 , apresenta

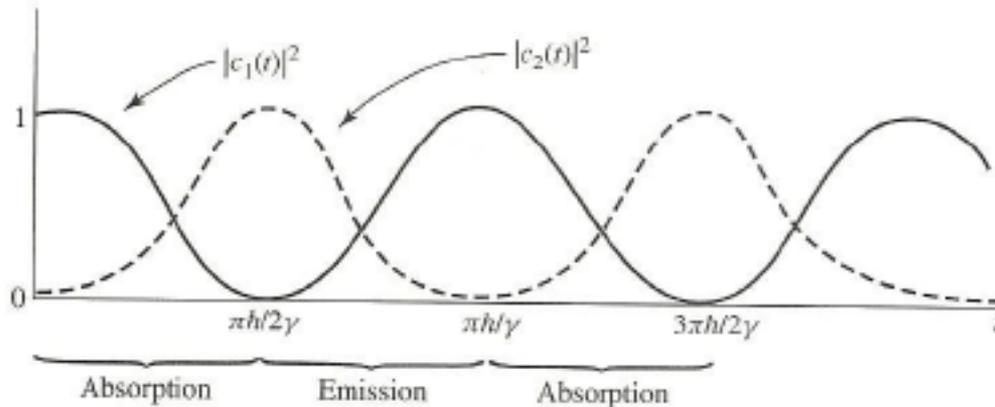
um comportamento oscilatório com frequência $\Omega = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}$.

A amplitude de oscilação é muito grande quando $\omega \approx \omega_{21} = \frac{(E_2 - E_1)}{\hbar}$

*Esta é conhecida como **condição de ressonância da frequência ω imposta ao sistema.***

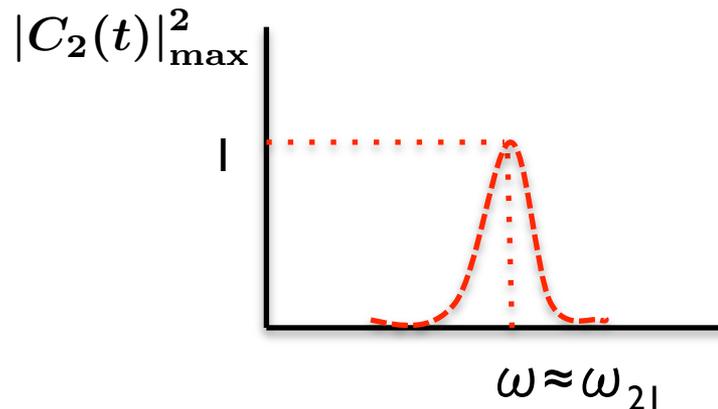
Problemas de dois níveis dependente do tempo

Na condição de ressonância, $\Omega = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} \approx \frac{\gamma}{\hbar}$, $|C_2(t)|^2$ e $|C_1(t)|^2$ se comportam conforme a figura



onde $\begin{cases} |C_1(t)|^2 = \cos^2(\frac{\gamma}{\hbar}t) \\ |C_2(t)|^2 = \sin^2(\frac{\gamma}{\hbar}t) \end{cases}$

Como seria o gráfico da função $|C_2(t)|_{\max}^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4}$ com respeito à ω ? Que tal:



Potenciais dependentes do tempo: Ressonância Magnética de Spin

Existem muitas aplicações que podem ser vistas e tratadas como problemas de dois níveis. Entre elas a chamada *Ressonância Magnética de Spin*. Considere um sistema de spin $\frac{1}{2}$ (por exemplo: um elétron ligado) sujeito à um campo magnético uniforme, independente do tempo, na direção $\hat{\mathbf{z}}$ e, ao mesmo tempo, à um campo magnético, dependente no tempo, rodando no plano xy .

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1 \text{ com } \begin{cases} \mathbf{B}_0 = B_0 \hat{\mathbf{z}} \\ \mathbf{B}_1 = B_1 \hat{\mathbf{r}}(t) = B_1 (\hat{\mathbf{x}} \cos \omega t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega t) \end{cases}$$

Note que \mathbf{B}_1 gira em xy com velocidade angular ω . Faremos $\begin{cases} H_0 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_0 \\ V(t) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_1 \end{cases}$

onde $\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S}$ é o momento magnético do elétron que está “sobrando”.

Assim, $\begin{cases} H_0 = -\frac{eB_0}{m_e c} S_z = -\frac{eB_0 \hbar}{2m_e c} (|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \\ V(t) = -\frac{eB_1}{m_e c} (S_x \cos \omega t + S_y \sin \omega t) \end{cases}$

onde $\begin{cases} S_x = (\frac{\hbar}{2}) \{|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|\} \\ S_y = (i\frac{\hbar}{2}) \{|-\rangle\langle+|\langle-| + |-\rangle\langle+|\} \end{cases}$

Isto permite re-escrever $V(t)$ na forma:

$$V(t) = -\frac{eB_1\hbar}{2m_e c} (\cos \omega t (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) + i \sin \omega t (-|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|))$$

Olhando para H_0 , temos:
$$\begin{cases} E_+ = -\frac{eB_0\hbar}{2m_e c} \\ E_- = +\frac{eB_0\hbar}{2m_e c} \end{cases}$$
 e como $e < 0 \rightarrow E_+ > E_-$

ou seja,
$$\begin{cases} |+\rangle \rightarrow |2\rangle \text{ nível superior} \\ |-\rangle \rightarrow |1\rangle \text{ nível inferior} \end{cases}$$
 e $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = -\frac{eB_0\hbar}{m_e c} = \frac{|e|B_0\hbar}{m_e c}$

Sem a presença de V (ou seja, fazendo $B_1 = 0$), um estado genérico $|\alpha\rangle = C_+(0)|+\rangle + C_-(0)|-\rangle$, sujeito à um campo constante \mathbf{B}_0 , evolui para: $|\alpha, t\rangle = C_+(0)e^{-i\frac{E_+}{\hbar}t}|+\rangle + C_-(0)e^{-i\frac{E_-}{\hbar}t}|-\rangle$ (lembre que $\langle S_x \rangle$ e $\langle S_y \rangle$ precessionam ao redor de $\hat{\mathbf{z}}$)

Ao adicionarmos H_1 (ligar B_1), o que acontece? Simples aplicação dos resultados do slide 5. Basta fazer a relação $-\frac{eB_1\hbar}{2m_e c} \rightarrow \gamma$ e re-escrever

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

$= \gamma e^{-i\omega t}|+\rangle\langle -| + \gamma e^{+i\omega t}|-\rangle\langle +|$ *comparação completa nos leva à concluir que o sistema oscila spin para cima, spin para baixo!*

Na prática é difícil fazer campos que rodam. De fato, isto não é problema, pois um campo oscilante na direção \hat{x} é suficientemente bom. Para ver isso, note que $2B_1\hat{x}\cos\omega t = B_1(\underbrace{\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t}_{\text{rotação } \odot}) + B_1(\underbrace{\hat{x}\cos\omega t - \hat{y}\sin\omega t}_{\text{rotação } \ominus})$

Note que se trocarmos $\omega \rightarrow -\omega$, a rotação anti-horária vira rotação horária e vice-versa. Ou seja, um dado efeito, obtido com frequência ω com o campo rodando no sentido anti-horário, pode não ser importante com o campo rodando no sentido horário, se tomássemos a mesma frequência ω . Isto tem particular importância na condição de ressonância $\omega = \omega_{21}$. Se o campo de rotação \odot é ressonante, o campo de rotação \ominus não é. E vice-versa. Assim, na condição de ressonância para o campo que roda no sentido anti-horário, o efeito seria de um campo oscilante na direção \hat{x} , pois o campo rodando no sentido horário poderia ser desprezado na equação acima. Para ver isso em

números, suponha $\omega \approx \omega_{21}$ e $\frac{B_1}{B_0} \ll 1$. Como $\omega_{21} = -\frac{eB_0}{m_e c}$ e $-\frac{eB_1\hbar}{2m_e c} = \gamma$,

$$\text{temos } \frac{B_1}{B_0} = \frac{-2m_e c \gamma}{e\hbar} \cdot \frac{-e}{m_e c \omega_{21}} = \frac{2\gamma}{\hbar \omega_{21}} \ll 1 \text{ e } \therefore \frac{\gamma}{\hbar} \ll \omega_{21}.$$

Assim, nas expressões do campo de rotação \odot

$$\left\{ \begin{array}{l} |C_2(t)|^2 = \frac{\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} \sin^2 \left\{ \left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\} \\ \Omega = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}. \end{array} \right. \quad \omega = \omega_{21} \text{ na ressonância}$$

a condição de ressonância é $\omega = \omega_{21}$. Se trocarmos ω por $-\omega$

obtemos as expressões do campo de rotação \odot

$$\left\{ \begin{array}{l} |C_2(t)|^2 = \frac{\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega + \omega_{21})^2}{4}} \sin^2 \left\{ \left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega + \omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\} \\ \Omega = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega + \omega_{21})^2}{4}}. \end{array} \right.$$

com $\omega = \omega_{21}$ elas ficam:

$$\left\{ \begin{array}{l} |C_2(t)|^2 = \frac{\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}{\omega_{21}^2} \sin^2 \omega_{21} t \text{ (pequeno)} \\ \Omega = \omega_{21} \text{ (oscila muito)}. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \omega = \omega_{21} \text{ fora da ressonância} \\ \text{pois, } \frac{\gamma}{\hbar} \ll \omega_{21} \end{array}$$

O que permite concluir que os efeitos de um campo com rotação no sentido anti-horário, nas condições de ressonância, é o mesmo de um campo que oscila na direção \hat{x} (pois, a contribuição do campo que roda no sentido horário é desprezível nas condições de ressonância do que vira no sentido anti-horário).

Potenciais dependentes do tempo: MASER

Fenômeno que pode ser visto com a ajuda da molécula de amônia sujeita à um campo elétrico oscilante. Vimos no cap.4 que esta molécula tem dois estados de configuração de seus núcleos (simétrico e antissimétrico com respeito a posição relativa dos hidrogênios, em um triângulo equilátero, e o átomo de nitrogênio).

Os dois autoestados do operador paridade são

$$\begin{cases} |A\rangle \text{ (antissimétrico)} \\ |S\rangle \text{ (simétrico)} \end{cases}$$

com uma diferença em energia de $E_A - E_S$ correspondente à uma frequência de 24.000MHz (comprimento de onda de 1cm). Ou seja, o estado antissimétrico está um pouco acima em energia que o estado simétrico.

A interação básica é entre o dipolo elétrico da molécula e o campo elétrico oscilante, isto é $V(t) = -\boldsymbol{\mu}_{el} \cdot \mathbf{E}$ com $\mathbf{E} = |\mathbf{E}_{\max}| \hat{\mathbf{z}} \cos \omega t$. O operador de dipolo

Ver Jackson, *Classical Electrodynamics*, pag. 136

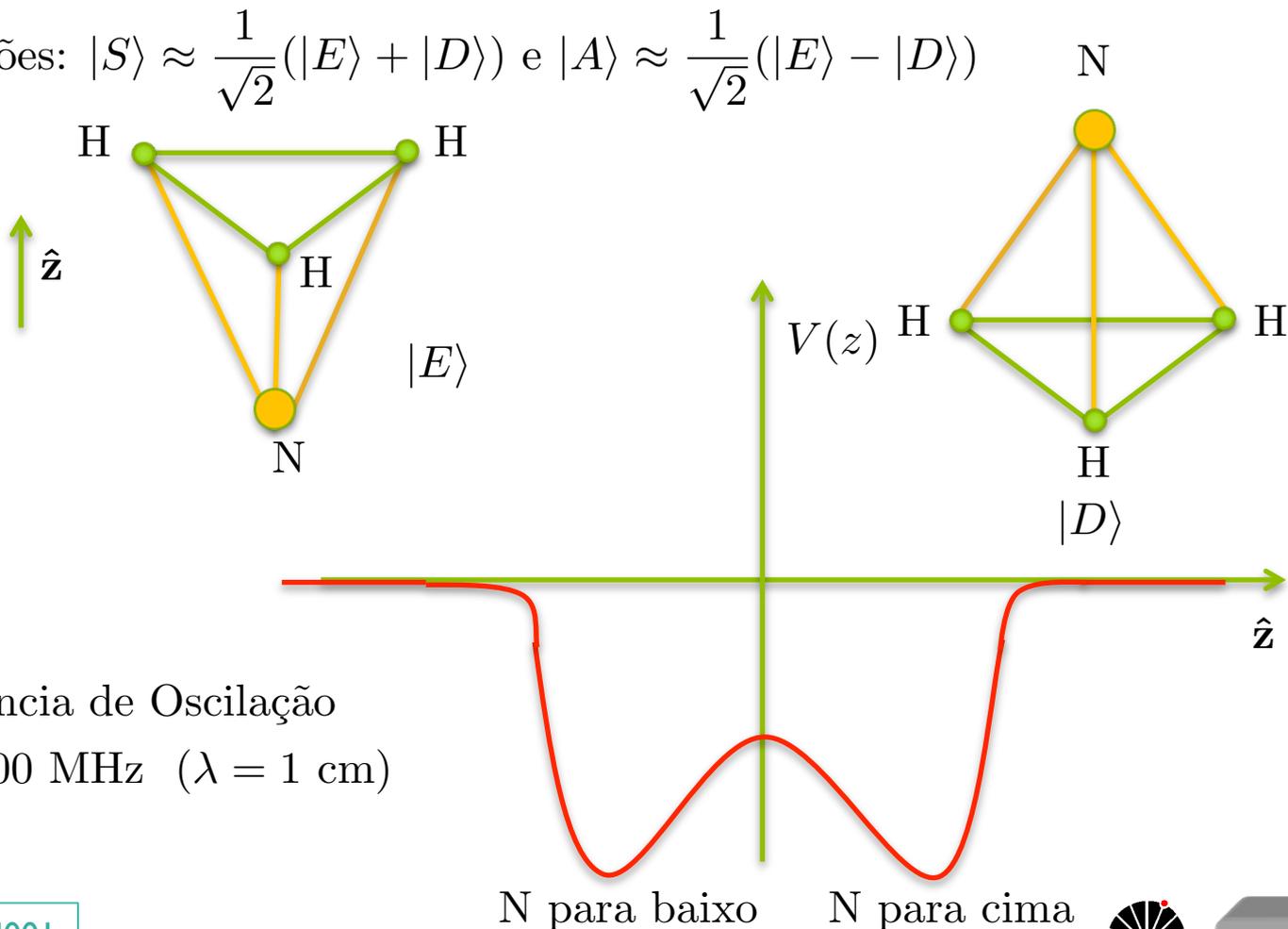
eléctrico é ímpar mediante paridade, assim

$$\begin{cases} \langle S | \boldsymbol{\mu}_{el} | S \rangle = 0 \\ \langle A | \boldsymbol{\mu}_{el} | A \rangle = 0 \\ \langle S | \boldsymbol{\mu}_{el} | A \rangle \neq 0 \\ \langle A | \boldsymbol{\mu}_{el} | S \rangle \neq 0 \end{cases}$$

Temos agora todos os ingredientes para entender o MASER.

Molécula de Amônia: um potencial de poço duplo simétrico

A natureza apresenta muitos poços duplos simétricos. A molécula de NH_3 é um bom exemplo. O sistema é mais estável quando N está para cima ou para baixo e menos estável quando está bem no meio do triângulo isósceles que caracteriza os 3 átomos de hidrogênio. O estado real é uma mistura das duas situações: $|S\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(|E\rangle + |D\rangle)$ e $|A\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(|E\rangle - |D\rangle)$



Frequência de Oscilação

$$\omega = 24000 \text{ MHz} \quad (\lambda = 1 \text{ cm})$$

Ver aula 26 de FI001

Potenciais dependentes do tempo: MASER

MASER (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation)

Dado um feixe de moléculas de amônia, contendo ambos os estados $|S\rangle$ e $|A\rangle$, primeiro elimina-se a componente $|S\rangle$, permitindo que o feixe passe por um campo elétrico fortemente não-homogêneo. Tal campo separa os estados $|S\rangle$ e $|A\rangle$ da mesma maneira que um campo magnético fortemente não-homogêneo separa os estados $|\pm\rangle$ no experimento de Stern-Gerlach.

Um feixe puro de átomos no estado $|A\rangle$ é, então, direcionado para uma cavidade com o campo elétrico oscilante descrito no slide anterior. A dimensão da cavidade é tal que o átomo passa nela pelo tempo de $\frac{\pi \hbar}{\gamma}$. Este é o tempo necessário para que os átomos mudem do estado $|A\rangle$ para o estado $|S\rangle$, com auxílio do campo elétrico, conforme vimos na figura do slide 6. Como os átomos estão no estado excitado, no processo, eles emitem onda eletromagnética, incrementando o campo já existente na cavidade. **voluntário para detalhes?**

No enfoque de interação, continuamos a usar $|n\rangle$ como base, assim ($p/ t_0 = 0$), temos: $|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_n C_n(t)|n\rangle$. Isso implica em: $C_n(t) = \langle n|\alpha, t_0; t\rangle_I$.

Note também que como $|\alpha, t_0; t\rangle_I = e^{i\frac{H_0}{\hbar}t}|\alpha, t_0; t\rangle_S$, temos que $e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t}|\alpha, t_0; t\rangle_I = e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t}e^{i\frac{H_0}{\hbar}t}|\alpha, t_0; t\rangle_S = |\alpha, t_0; t\rangle_S$

Suponha $V_{11}(t) \neq 0, V_{22}(t) \neq 0 \dots$ e $V_{ij} = 0, i \neq j$, o que teríamos em

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & \dots \\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \Rightarrow i\hbar \dot{C}_i(t) = V_{ii}(t)C_i(t)$$

ou seja, $C_i(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{ii}(t')dt'} C_i(0) \Rightarrow$ Apenas uma fase. Os termos da diagonal de V não causam transições e zerá-los simplifica o problema.