Mecânica Quântica

Spin $1/2$ e a formulação da M. Q.
Parte II

A C Tort[1]

[1]Departmento de Física Teórica
Instituto Física – Universidade Federal do Rio de Janeiro

10 de Maio de 2012

Mais dois postulados, agora são quatro....

Postulado 1. O estado de um sistema quântico é matematicamente representado por um ket de estado normalizado $|\psi\rangle$.

Postulado 2 Um observável físico, e.g.: spin, momento linear, momento angular, é representado por um objeto matemático dito *operador hermitiano* que pode ser escrito na forma de uma matriz (hermitiana) que atua sobre os *kets* de estado.

Postulado 3 O único resultado possível de uma medida de um observável físico é um dos autovalores do operador associado com o observável em questão.

Posulado 4 A probabilidade de obtermos o autovalor a_n em uma medida do observável A se o sistema estiver no estado $|\psi\rangle$ é dada por $|\langle a_n|\psi\rangle|^2$

Equações de autovalores

$$\underbrace{A}_{\textit{operador}} \overbrace{|a_n\rangle}^{\textit{autoket}} = \underbrace{a_n}_{\textit{autovalor}} \overbrace{|a_n\rangle}^{\textit{autoket}}$$

Os autovalores devem ser reais, pois são o único resultado possível de uma medida.

Uma classe de operadores que têm um *espectro* de autovalores reais é a classe dos operadores ditos *hermitianos*.

(Mais sobre isto daqui um pouco...)

Um exemplo: spin $1/2$

Formalmente:

$$S_z \left|+\right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left|+\right\rangle$$

e,

$$S_z \left|-\right\rangle = -\frac{\hbar}{2} \left|-\right\rangle$$

ou ainda:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \left|\pm\right\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} \left|\pm\right\rangle$$

A representação matricial de S_z na base formada por seus próprios autovetores:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

e,

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Segue que:

$$a = \frac{\hbar}{2}, \quad b = 0, \quad c = 0, \quad d = -\frac{\hbar}{2}$$

Portanto,

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ou ainda:

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

onde

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

é uma das matrizes de Pauli.

As matrizes S_y e S_x na base dos autokets de S_z: $|\pm\rangle$

Ponto de partida:

$$S_y|\pm\rangle_y = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle_y$$

Do experimento S-G vimos que

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle \pm i\,|-\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

Escrevendo como antes:

$$S_y = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

temos:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \pm i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \pm 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

ou ainda:

$$\frac{a}{\sqrt{2}} + i\frac{b}{\sqrt{2}} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}}$$

$$\frac{c}{\sqrt{2}} + i\frac{d}{\sqrt{2}} = i\frac{\hbar}{2\sqrt{2}}$$

$$\frac{a}{\sqrt{2}} - i\frac{b}{\sqrt{2}} = -\frac{\hbar}{2\sqrt{2}}$$

$$\frac{c}{\sqrt{2}} - i\frac{d}{\sqrt{2}} = i\frac{\hbar}{2\sqrt{2}}$$

Segue que

$$a = 0, \quad b = -i\frac{\hbar}{2}, \quad c = i\frac{\hbar}{2}, \quad d = 0.$$

A matriz que representa S_y na base dos autokets de S_z se escreve:

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Da mesma forma obtemos:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Notação matricial alternativa

Façamos a associação: $|+\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ e $|-\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ Então:

$$(S_z)_{11} = \langle +| \, S_z \, |+\rangle = \langle 1| \, S_z \, |1\rangle$$

ou

$$(S_z)_{11} = \frac{\hbar}{2}(1 \;\; 0)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(1 \; 0)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}$$

Da mesma forma

$$(S_z)_{12} = \langle +| \, S_z \, |-\rangle = \langle 1| \, S_z \, |2\rangle = 0$$

$$(S_z)_{21} = \langle -| \, S_z \, |+\rangle = \langle 2| \, S_z \, |1\rangle = 0$$

$$(S_z)_{22} = \langle -| \, S_z \, |-\rangle = \langle 2| \, S_z \, |2\rangle = -\frac{\hbar}{2}$$

Vc pode verificar que:

$$(S_y)_{11} = \langle + | \, S_y \, | + \rangle = \langle 1 | \, S_y \, | 1 \rangle = 0$$

$$(S_y)_{12} = \langle + | \, S_y \, | - \rangle = \langle 1 | \, S_y \, | 2 \rangle = -i \, \frac{\hbar}{2}$$

$$(S_y)_{21} = \langle - | \, S_y \, | + \rangle = \langle 2 | \, S_y \, | 1 \rangle = i \, \frac{\hbar}{2}$$

$$(S_y)_{22} = \langle - | \, S_y \, | \_ \rangle = \langle 2 | \, S_y \, | 2 \rangle = 0$$

e também:

$$
\begin{aligned}
(S_x)_{11} &= \langle + | \, S_x \, | + \rangle = \langle 1 | \, S_x \, | 1 \rangle = 0 \\
(S_x)_{12} &= \langle + | \, S_x \, | - \rangle = \langle 1 | \, S_x \, | 2 \rangle = 1 \\
(S_x)_{21} &= \langle - | \, S_x \, | + \rangle = \langle 2 | \, S_x \, | 1 \rangle = 1 \\
(S_y)_{22} &= \langle - | \, S_y \, | \_ \rangle = \langle 2 | \, S_y \, | 2 \rangle = 0
\end{aligned}
$$

Observe que somente S_z é uma matriz diagonal!

S_z, S_y e S_z são matrizes hermitianas!

$$(S_x)_{ij} = (S_x)^*_{ji}\,, \quad (S_y)_{ij} = (S_y)^*_{ji}\,, \quad (S_z)_{ij} = (S_z)^*_{ji}\,.$$

ou ainda:

$$S_x = S_x^\dagger, \quad S_y = S_y^\dagger \quad S_z = S_z^\dagger.$$

O símbolo $\dagger$ significa que devemos transpor a matriz, e depois tomar o conjugado complexo dos elementos da matriz transposta.

Exemplo:

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

A matriz transposta é:

$$S_y^T = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

e a transposta conjugada:

$$S_y^\dagger = \left[S_y^T\right]^* = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = S_y$$

O mesmo vale para S_x e S_z. Os operadores associados com as componentes cartesianas do spin são hermitianos e são representados por matrizes hermitianas!!!

Os autovalores de S_x, S_y e S_z são reais!

Suponha que:

$$S_x |\varphi\rangle = \lambda |\varphi\rangle$$

mas, podemos escrever também:

$$(S_x |\varphi\rangle)^\dagger = (\lambda |\varphi\rangle)^\dagger$$

ou ainda:

$$\langle\varphi| S_x^\dagger = \lambda^* \langle\varphi|$$

Tomando o produto escalar com $|\varphi\rangle$ e lembrando que $S_x^\dagger = S_x$,

$$\langle\varphi| S_x |\varphi\rangle = \lambda^* \langle\varphi|\varphi\rangle = \lambda^*$$

Fazendo o mesmo com a primeira equação:

$$\langle\varphi| S_x |\varphi\rangle = \lambda \langle\varphi|\varphi\rangle = \lambda$$

Subtraindo:

$$\lambda - \lambda^* = 0$$

isto é: os autovalores de S_x são reais!! O mesmo vale para S_y e S_z.

<u>Exemplo de operador não-hermitiano</u>:

$$S_+ = S_x + iS_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_+^\dagger = S_x^\dagger - iS_y^\dagger = S_x - iS_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Portanto, $S_+^\dagger \neq S_+$... logo, não é hermitiano!

Diagonalização: determinando os autovalores e os autovetores de um operador hermitiano

Suponha que S_y seja conhecido:

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

mas seus autovalores e autovetores não, e queremos determiná-los!

Temos que resolver a equação de autovalores:

$$S_y \left|\varphi\right\rangle = \lambda \left|\varphi\right\rangle$$

Começamos escrevendo $|\varphi\rangle$ em uma base conhecida, a dos autovetores de S_z:

$$|\varphi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle$$

ou

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Os números c_1 e c_2 são complexos.

Por conveniência vamos escrever $\lambda \to \lambda' \frac{\hbar}{2}$.

Segue que:

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda' \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Efetuando obtemos o sistema linear homogêneo:

$$\lambda' c_1 + i\, c_2 = 0$$

$$i\, c_1 - \lambda' c_2 = 0$$

A solução será não-trivial se:

$$\Delta = \begin{vmatrix} \lambda' & i \\ i & -\lambda' \end{vmatrix} = -\lambda'^2 + 1 = 0$$

Segue que $\lambda' = \pm 1$, e logo:

$$\lambda_1 = \frac{\hbar}{2}, \qquad \lambda_2 = -\frac{\hbar}{2}$$

Se $\lambda' = 1$, segue que:

$$c_1 + i\, c_2 = 0$$

$$i\, c_1 - c_2 = 0$$

logo, $c_1 = -i\, c_2$. Da condição de normalização:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

temos

$$2|c_1|^2 = 2, \quad c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\,i\alpha}, \quad c_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} e^{\,i\alpha}$$

Fazendo $\alpha = 0$,

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|1\rangle + i\ |2\rangle \right]$$

Se $\lambda' = -1$, segue que:

$$-c_1 + i\, c_2 = 0$$

$$i\, c_1 + c_2 = 0$$

logo, $c_1 = i\, c_2$. Usando a condição de normalização obtemos:

$$2|c_1|^2 = 1, \quad c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\beta}, \quad c_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\beta}$$

Fazendo $\beta = 0$,

$$|-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|1\rangle - i\ |2\rangle \right]$$

Projeção do spin sobre um eixo arbitrário

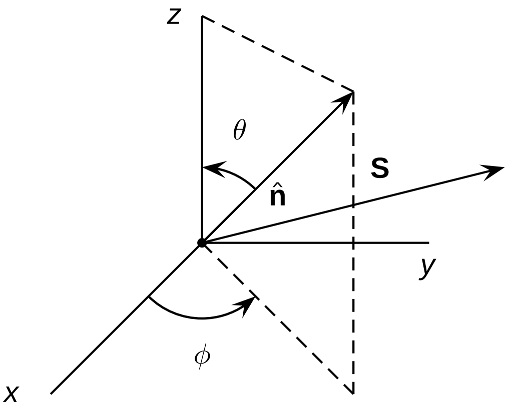


Figura: $\hat{\mathbf{n}} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$.

Projeção do spin sobre o eixo de quantização definido por $\hat{\mathbf{n}}$:

$$\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}} = S_x \sin\theta \cos\varphi + S_y \sin\varphi \sin\varphi + S_z \cos\theta$$

ou (exercício!!):

$$S_n \equiv \mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Equação de autovalores:

$$S_n\,|\chi\rangle = \lambda\,\frac{\hbar}{2}\,|\chi\rangle$$

Expandir $|\chi\rangle$ na base formada pelos autoestados de S_z. (Por quê? Porque é a mais simples e é matematicamente válido!!)

$$|\chi\rangle = c_1\,|+\rangle + c_2\,|-\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Segue que:

$$\begin{pmatrix} \cos\theta - \lambda & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

Determinar os autovalores de S_n é diagonalizar a matriz S_n:

$$\Delta = \begin{vmatrix} \cos\theta - \lambda & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Efetuando o determinante:

$$\lambda = \pm 1$$

Ou seja, os autovalores de S_n (resultados possíveis de uma medida de S_n) são $\pm\hbar/2$!

Para determinar os autovetores voltamos ao sistema de equações lineares e subtituímos primeiro $\lambda = 1$:

$$(\cos\,\theta - \lambda)\; c_1 + \sin\,\theta\, e^{-i\varphi}\, c_2 = 0$$

$$\sin\,\theta\, e^{i\varphi}\, c_1 - (\cos\,\theta + \lambda)\; c_2 = 0$$

Segue que:

$$c_2 = \frac{\sin\,\theta\, e^{i\varphi}}{1 + \cos\,\theta}\, c_1$$

Fazendo uso da condição:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

obtemos depois de um pouco de álgebra (exercício):

$$c_1 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\alpha}$$

$$c_2 = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi} e^{i\alpha}$$

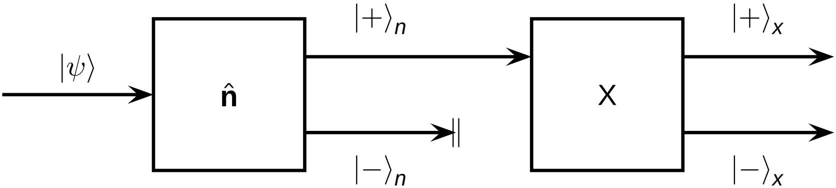
Seguindo a convenção, fazemos $\alpha = 0$ e obtemos finalmente:

$$|+\rangle_n = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi}$$

Procedendo de forma similar com o autovalor $\lambda = -1$, (exercício!!) obtemos:

$$|-\rangle_n = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |-\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi}$$

Exemplo $\theta = \frac{2}{3}$ e $\phi = \frac{\pi}{4}$:



Para o segundo S-G, o ket de estado imediatamente antes da medida se escreve:

$$|+\rangle_n = \cos\left(\frac{\pi}{3}\right)|+\rangle + \sin\left(\frac{\pi}{3}\right)e^{i\pi/4}|-\rangle$$

As probabilidades são:

$$P_{+x} = |{}_x\langle + \mid + \rangle_n|^2, \quad P_{-x} = |{}_x\langle - \mid + \rangle_n|^2$$

ou, por exemplo,

$$P_{+x} = {}_x\langle + \mid + \rangle_n \, {}_x\langle + \mid + \rangle_n^* = {}_x\langle + \mid + \rangle_n \, {}_n\langle + \mid + \rangle_x$$

$$|+\rangle_n = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) \\ \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{3}\right) e^{i\pi/4} \end{pmatrix}$$

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle + |-\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$${}_x\langle +| = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(1\ 1)$$

$$
{}_x\langle + \mid + \rangle_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos\left(\frac{\pi}{3}\right) + \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{3}\right) e^{i\pi/4} \right)
$$

e

$$
{}_n\langle + \mid + \rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos\left(\frac{\pi}{3}\right) + \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{3}\right) e^{-i\pi/4} \right)
$$

Segue que:

$$
P_{+x} = {}_x\langle + \mid + \rangle_n \, {}_n\langle + \mid + \rangle_x = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\sqrt{6}}{4}\right) \simeq 0.806
$$

ou

$$
P_{-x} = 1 - P_{+x} = 1 - {}_x\langle + \mid + \rangle_n \, {}_n\langle + \mid + \rangle_x \simeq 1 - 0.806 = 0.194
$$

FIM DA AULA 6