Mecánica Cuántica II

Guía 1: Espín

13 de agosto de 2024

Problema 1: *Repaso momentos angulares.* Al discutir el problema de autovalores del momento angular orbital se analizó el caso general de un trío $\hat{\boldsymbol{J}} = (\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$ de operadores que satisfacen las relaciones de conmutación $[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = i\hbar \hat{J}_3$ (y permutaciones cíclicas de los índices). Se encontró que los autovalores de $\hat{J}^2$ son de la forma $\hbar^2 j(j+1)$, donde j es un múltiplo de $1/2$ y que este autovalor tiene multiplicidad $2j+1$. Se construyó un sistema ortonormal de esta dimensión $\{|j,m\rangle : \ m = -j, -j+1, \cdots, j-1, j\}$ de autovectores de $\hat{J}_3$ con $\hat{J}_3 |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle$ y $\hat{J}^2 |j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j,m\rangle$. Usando los operadores $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$ y la relación

$$\hat{J}_\pm |j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\ |j, m\pm 1\rangle \ ,$$

a) verifique que $\langle j,m| \hat{J}_1 |j,m\rangle = \langle j,m| \hat{J}_2 |j,m\rangle = 0$ y que

$$\langle j,m| \hat{J}_1^2 |j,m\rangle = \langle j,m| \hat{J}_2^2 |j,m\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - m^2\right] \ ;$$

b) encuentre la representación matricial de los operadores $\hat{\boldsymbol{J}}^{[j]} = (\hat{J}_1^{[j]}, \hat{J}_2^{[j]}, \hat{J}_3^{[j]})$ de magnitud j para $j = 1/2,\ 1,\ 3/2$ en la base ortonormal $\{|j,m\rangle : -j \leq m \leq j\}$.

Problema 2: *Matrices de Pauli.* Para el caso $j = 1/2$, se utilizan las llamadas matrices de Pauli $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ definidas por la ecuación $\hat{\boldsymbol{J}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ y $\hat{\sigma}_0 = \hat{I}$. Muestre las siguientes propiedades de las matrices, sus autovectores y autovalores.

a) Verifique que si el vector real $\boldsymbol{u}$, de módulo unitario, tiene coordenadas esféricas (θ, φ) entonces los vectores

$$|+, \boldsymbol{u}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)\, e^{-i\varphi/2} \\ \operatorname{sen}(\theta/2)\, e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \quad , \quad |-, \boldsymbol{u}\rangle = \begin{pmatrix} -\operatorname{sen}(\theta/2)\, e^{-i\varphi/2} \\ \cos(\theta/2)\, e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$$

son autovectores del operador $\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ a los autovalores 1 y -1 respectivamente.

b) Demuestre que todo operador $\hat{A}$ de $\mathbb{C}^2$ en $\mathbb{C}^2$ puede escribirse unívocamente como

$$\hat{A} = \alpha\, \hat{I} + \boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

con $\alpha \in \mathbb{C}$ y $\boldsymbol{a} \in \mathbb{C}^3$, donde $\hat{I}$ denota el operador identidad.

c) Para $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ hermitiano, encuentre autovalores y autovectores de $\hat{A}$ en términos de los parámetros α y $\boldsymbol{a}$ correspondientes.

d) Demuestre que

$$(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\,\hat{I} + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} \ ,$$

donde $\boldsymbol{a}$ y $\boldsymbol{b}$ son vectores tridimensionales arbitrarios cuyas componentes pueden ser, por ejemplo, operadores siempre y cuando estos conmuten con cada componente de $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$.

e) Demuestre que si la función f de una variable compleja es entera (holomorfa, es decir, analítica en todo el plano complejo) entonces para todo $\alpha \in \mathbb{C}$ y todo $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^3$ unitario, se tiene:

$$f(\alpha\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \ = \ \frac{f(\alpha) + f(-\alpha)}{2}\, I + \frac{f(\alpha) - f(-\alpha)}{2}\, (\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \ .$$

f) Si $\hat{U}(\boldsymbol{u},\theta) = \exp(-i\theta\, \boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2) = \exp(-i\theta\, \boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}/\hbar)$ es el operador unitario que implementa la rotación *activa* (sobre el estado) R_θ alrededor del eje $\boldsymbol{u}$ ($|\boldsymbol{u}| = 1$) por un ángulo θ, verifique que

$$\hat{U}(\boldsymbol{u},\theta) = \cos(\theta/2)\hat{I} - i\,\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\ \operatorname{sen}(\theta/2)$$

y

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger(\boldsymbol{u},\theta)\, \hat{\boldsymbol{\sigma}}\, \hat{U}(\boldsymbol{u},\theta) &= (\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\,\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}\times(\boldsymbol{u}\times\hat{\boldsymbol{\sigma}})\cos\theta + (\boldsymbol{u}\times\hat{\boldsymbol{\sigma}})\operatorname{sen}\theta \ . \\ &= \cos\theta\,\hat{\boldsymbol{\sigma}} + (1-\cos\theta)\,\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) + \sin\theta\,\boldsymbol{u}\times\hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{aligned}$$

¿Qué sucede para $\theta = 2\pi$?

Problema 3: **a)** Escriba los autovalores de los operadores $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ y $\hat{S}_{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$, con $\boldsymbol{n}$ un vector unitario.

b) Escriba el operador de espín $\hat{S}_z$ de un electrón utilizando los autovectores correspondientes al operador $\hat{S}_x$.

c) Encuentre la probabilidad de medir $\hbar/2$ y $-\hbar/2$ a lo largo del eje x si el electrón originalmente se halla en el autoestado $|+\rangle_z$ de $\hat{S}_z$. Encuentre el valor de expectación de $\hat{S}_x$.

d) Después de realizar la medición anterior (proyección según el eje x), ¿cuáles son los posibles estados en los que queda el sistema?

e) Si luego de la medición **(c)** (cuyo resultado desconocemos) se determina $\hat{S}_z$, ¿cuáles son los posibles resultados y con qué probabilidades?

f) Repita los incisos anteriores para el caso en que el electrón se encuentra inicialmente en el estado $\alpha\,|-\rangle_z + \beta\,|+\rangle_z$ (Recuerde que los estados deben estar normalizados).

Problema 4: *Resonancia magnética.* Considere un espín $\hat{\boldsymbol{S}}$, de magnitud $s=1/2$, con momento magnético asociado $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma\hat{\boldsymbol{S}}$ en un campo magnético $\boldsymbol{B}$ dependiente del tiempo:

$$\boldsymbol{B} = \big(B\cos(\omega t), -B\,\mathrm{sen}(\omega t), B_o\big)\ .$$

Se busca resolver la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi_t = -\hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\boldsymbol{B}\,\psi_t\ \ ,\quad \hat{S}_z\,\psi_0 = \frac{\hbar}{2}\,\psi_0\ .$$

La estructura del campo magnético sugiere que, en un sistema de referencia que rota a una frecuencia $-\omega$, el hamiltoniano debería ser independiente del tiempo.

a) Introduzca la rotación mencionada:

$$\phi_t = e^{-i\omega t\hat{S}_z/\hbar}\,\psi_t\ ,$$

obtenga la ecuación de movimiento para ϕ_t y resuélvala.

b) Invirtiendo la rotación verifique que

$$\psi_t = \begin{pmatrix} \left[\cos(\omega_r t/2) + i\,\dfrac{\omega_o-\omega}{\omega_r}\,\mathrm{sen}(\omega_r t/2)\right] e^{i\omega t/2} \\[2ex] \dfrac{i\gamma B}{\omega_r}\,\mathrm{sen}(\omega_r t/2)e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

en la base de autovectores de $\hat{S}_z$, donde ω_r y ω_o son ciertas frecuencias angulares.

c) Muestre que

$$\langle\psi_t|\,\hat{\mu}_z\,|\psi_t\rangle = \frac{\gamma\hbar}{2}\,\left[\frac{(\omega_o-\omega)^2}{(\omega_o-\omega)^2+\gamma^2B^2} + \frac{\gamma^2B^2\cos(\omega_r t)}{(\omega_o-\omega)^2+\gamma^2B^2}\right]$$

d) Compare y analice el comportamiento dinámico de espín de este estado con los descriptos en el problema 2 **(a)** en el caso $\omega_o = \omega$.

e) Como en el laboratorio de RMN, considere el caso en resonancia, con $B_o = 7$ T (¿es este valor de campo grande respecto de los encontrados en la naturaleza?), $\gamma = 42{,}567$ MHz/T para un protón de un átomo de hidrógeno. Si $B = 3{,}7\times10^{-2}$ T calcule el valor del intervalo de tiempo $\Delta t_{\mathrm{pulso}}$ mínimo que debe estar el campo encendido para que el momento dipolar magnético se encuentre en el plano x-y.

Problema 5: *Polarización de un sistema de dos niveles.* Llamamos a un sistema *de dos niveles* si el espacio de estados tiene dimensión 2, como es el caso de un espín 1/2. Como vimos en el problema 2, todo operador sobre $\mathbb{C}^2$ es combinación lineal de $\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_2$, $\hat{\sigma}_3$ y $\hat{\sigma}_0 \equiv \hat{I}$, en particular el operador densidad

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_0 + \boldsymbol{P}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)\ .$$

a) Muestre que $\boldsymbol{P}$ es la polarización media $\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}\rangle$.

b) Muestre que en el caso de un ensamble puro $|\boldsymbol{P}|=1$.

c) Calcule el vector polarización $\boldsymbol{P}$ y P_z para los siguientes ensambles:

- N partículas polarizadas en la dirección $+x$.
- $N/2$ partículas polarizadas en la dirección $+z$ y $N/2$ partículas polarizadas en la dirección $-z$.

Compare ambos resultados. Discuta.

Problema 6: Considere un haz monoenergético de neutrones que incide perpendicularmente sobre un bloque de material ferromagnético. El haz se propaga en la dirección x positiva e incide perpendicularmente en la superficie del mencionado material (plano yz), el cual ocupa todo el semiespacio $x > 0$. Suponga que cada neutrón incidente tiene una energía E y una masa m. El neutrón tiene espín $s = 1/2$ y momento magnético $\boldsymbol{\mu} = -\gamma\boldsymbol{S}$, con $\gamma > 0$.

A la energía potencial de los neutrones contribuyen dos términos:

- Un primer término correspondiente a la interacción del neutrón con los nucleones de la substancia, que representamos fenomenológicamente por un potencial $V(x)$, definido por $V(x) = 0$ para $x \leqslant 0$, $V(x) = V_0 > 0$ para $x > 0$.
- Un segundo término correspondiente a la interacción del momento magnético de cada neutrón con el campo magnético $\boldsymbol{B}$ del material ($\boldsymbol{B} = 0$ para $x \leqslant 0$ y $\boldsymbol{B} = B_0\boldsymbol{e}_z$ para $x > 0$).

Considere que los valores de V_0 y B_0 son tales que $0 < \hbar\gamma B_0/2 < V_0$

a) Determine los estados estacionarios que corresponden a una partícula incidente con espín paralelo o antiparalelo al eje z. Explicite los casos siguientes:

a$_1$) $E > V_0 + \hbar\gamma B_0/2$ y

a$_2$) $V_0 - \hbar\gamma B_0/2 < E < V_0 + \hbar\gamma B_0/2$.

b) Considere ahora que el espín de los neutrones incidentes apunta en la dirección x, es decir el estado de espín es $|\chi\rangle = (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$. ¿Cuál es la dirección del espín de las partículas que atraviesan el material en el caso (a$_2$)? ¿En qué proporción atraviesan el material, respecto al haz incidente? Ejemplifique para el caso $E = V_0$ y $\hbar\gamma B_0/2 = V_0$.