



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

DINÂMICA EXATA DE UMA PARTÍCULA DE SPIN $\frac{1}{2}$ SOB INTERAÇÃO DE CAMPOS CLÁSSICOS DEPENDENTES HARMONICAMENTE DO TEMPO

Oziel Pazian Machado¹; Antônio Cesar Aguiar Pinto²

¹Oziel Pazian Machado (bolsista) estudante do curso de Engenharia Física da Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Unidade Universitária de Dourados; E-mail: ozielpazian@gmail.com

²Antonio Cesar Aguiar Pinto professor do curso de Engenharia Física da Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Unidade Universitária de Dourados; E-mail: acap@uems.br

RESUMO

Sendo sempre possível calcular a dinâmica exata de Sistemas fermiônicos com poucos graus de liberdade para quais quer conjuntos de condições iniciais, pois obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, o que garante a finitude da base do sistema. O objetivo deste trabalho foi calcular a dinâmica exata do modelo fermiônico de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ para o caso em que os campos externos possuem amplitude constante e a dependência temporal é da forma harmônica com frequência angular constante ω_0 . Inicialmente escrevemos a representação matricial da hamiltoniana na qual possui toda a informação do sistema; com a representação matricial da hamiltoniana nesta base, que é uma matriz quadrada 2×2 , podemos calcular seus autovalores (energias) e seus respectivos autoestados. Ao obter os autoestados instantâneos da hamiltoniana, podemos escrever a representação de um vetor de estado físico na base completa desses autoestados, que deve satisfazer a equação de Schrodinger. Após os cálculos, foi possível encontrar os coeficientes que representam a amplitude de probabilidade de, ao realizar uma medida de energia, encontrar o sistema com energia igual aos autovalores.

Palavras-Chave: Férmions. Autovalor e Autovetor.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

INTRODUÇÃO

Sistemas fermiônicos com poucos graus de liberdade são muito estudados na literatura pois a dinâmica dos modelos desses sistemas pode ser calculada exatamente para quaisquer conjuntos de condições iniciais. Sendo que sistemas fermiônicos de dois níveis vêm sendo largamente estudados como possíveis candidatos a q-bits. Seja o sistema de dois níveis que descreve o elétron atômico (férmion) representado pela hamiltoniana H_e . O elétron atômico interage com um campo elétrico externo clássico $\vec{E}(t)$ e seu spin interage com de um campo magnético externo dependente do tempo $\vec{B}(t)$. A hamiltoniana total para este modelo na representação de Schrodinger é:

$$H_T(t) = H_e + H_{int}(t), \quad (1) \quad \text{com,} \quad H_e = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(r), \quad (2)$$

$$\text{e} \quad H_{int}(t) \equiv -e(\vec{E}_{clas}(t)) \cdot \vec{r} + \mu \vec{B}(t) \cdot \vec{S}, \quad (3)$$

onde \vec{P} é o operador de momento associado ao elétron atômico, $V(r)$ é o potencial de interação entre o elétron e o resto do átomo esfericamente simétrico por hipótese, a constante μ é escrita em termos do fator de Landé g e do magneton de Bohr μ_B (Kittel 1996), isto é, $\mu = g\mu_B$ e \vec{S} é o operador de *spin* $\frac{1}{2}$. O termo da hamiltoniana de interação, $\mu \vec{B}(t) \cdot \vec{S}$, é a energia de interação entre o momento magnético intrínseco da partícula de *spin* $\frac{1}{2}$, no caso o elétron, e o campo magnético externo (Jackson 1999). Nesse projeto, trataremos a dependência no tempo para os vetores de campo externo que possuem amplitudes constantes e a dependência temporal desses campos é da forma harmônica com frequência angular constante ω_0 , isto é,

$$\vec{B}(t) = B_0 \cos(\omega_0 t + \delta) \hat{k} \quad \text{e} \quad \vec{E}(t) = E_0 \cos(\omega_0 t + \delta) \hat{k} \quad (4)$$

onde δ é uma fase inicial constante.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

MATERIAIS E MÉTODOS

Para obter a dinâmica exata desse modelo fermiônico de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ sob a interação de um campo magnético externo dependente do tempo $\vec{B}(t)$, inicialmente, escreveremos a representação matricial da hamiltoniana na base completa $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ da componente z o operador spin total de férmions s_z , onde:

$$s_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle \text{ e } s_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle \quad (5)$$

Com a representação matricial da hamiltoniana nesta base, que é uma matriz quadrada 2×2 , podemos calcular seus autovalores (energias) e seus respectivos autoestados.

Ao obter os autoestados instantâneos da hamiltoniana, podemos escrever a representação de um vetor de estado físico $|\psi(t)\rangle$ na base completa desses autoestados (**Berry 1984; Dittrich & Reuter 1994**):

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^2 c_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int dt \varepsilon_j(t)} |u_j; t\rangle \quad (6)$$

onde $|u_j; t\rangle$ é um autoestado da hamiltoniana com energia $\varepsilon_j(t)$. Os coeficientes $c_j(t)$ representam a amplitude de probabilidade de, ao realizar uma medida de energia, encontrar o sistema com energia $\varepsilon_j(t)$ e são determinados pela condição de que o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$, que descreve esse sistema quântico, satisfaz a equação de Schrodinger:

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (7)$$

Ao substituir (6) em (7) e após alguma álgebra, podemos encontrar as equações diferenciais para cada coeficiente.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após os estudos da formulação de operadores de criação e de destruição de partículas, foi possível aplicar a hamiltoniana em cada base finita, junto com as constantes e as demais



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

informações, de forma que foi possível escrever a sua representação matricial:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon + \frac{\mu\hbar B_z}{2} & -e(\vec{E} \cdot \vec{r}) \\ -e(\vec{E} \cdot \vec{r})^* & \varepsilon - \frac{\mu\hbar B_z}{2} \end{bmatrix} \quad (8)$$

Com a matriz 2 x 2 pronta, o cálculo dos autovalores (energias) a próprio punho com as equações da álgebra linear foi de difícil realização, de forma que optássemos para o software maple 12.

Os autovalores obtidos foram:

$$\lambda_1 = \varepsilon + \sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left(\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right)^2} \quad \lambda_2 = \varepsilon - \sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left(\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right)^2} \quad (9)$$

Com os autovalores acima descritos foi possível encontrar através do cálculo de próprio punho os autovetores (autoestados instantâneo), sendo esses:

$$\begin{aligned} |U_1; t\rangle &= \frac{\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z}{\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left[\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left(\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right)^2} - \mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right]^2}} |\uparrow\rangle + \\ &+ \frac{-\left[\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left(\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right)^2} - \mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right]}{\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left[\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left(\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right)^2} - \mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right]^2}} |\downarrow\rangle \\ |U_2; t\rangle &= \frac{\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z}{\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left[-\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left(\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right)^2} - \mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right]^2}} |\uparrow\rangle + \quad (10) \\ &+ \frac{-\left[-\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left(\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right)^2} - \mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right]}{\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left[-\sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + \left(\mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right)^2} - \mu \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot B_z\right]^2}} |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Tendo em mãos os autovetores (autoestados instantâneos), aplicando – se em (6) que representa o vetor de estado físico, foi possível obtê-lo para esse modelo.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = & C_1(t) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \int dt \cdot \left(\varepsilon + \sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + (\mu \cdot \frac{\hbar}{2} B_z)^2} \right)} \cdot |U_1; t\rangle + \\ & + C_2(t) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \int dt \cdot \left(\varepsilon - \sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + (\mu \cdot \frac{\hbar}{2} B_z)^2} \right)} \cdot |U_2; t\rangle \end{aligned} \quad (11)$$

O próximo passo foi aplicar o vetor de estado físico (11) que descreve esse sistema quântico, na equação de Shrodinger (7), a fim de satisfaze-la, temos:

$$\begin{aligned} 0 = & \frac{dC_1}{dt} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\varepsilon + \sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + (\mu \cdot \frac{\hbar}{2} B_z)^2} \right) \cdot t} \cdot |U_1; t\rangle + \\ & + \frac{dC_2}{dt} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\varepsilon - \sqrt{(e(\vec{E} \cdot \vec{r}))^2 + (\mu \cdot \frac{\hbar}{2} B_z)^2} \right) \cdot t} \cdot |U_2; t\rangle \end{aligned} \quad (12)$$

Projetando $\langle U_1; t|$ e $\langle U_2; t|$, na equação (12) obtemos assim as equações diferenciais acopladas para cada coeficiente $C_j(t), j = 1, 2$.

$$0 = \frac{dC_1(t)}{dt} \qquad 0 = \frac{dC_2(t)}{dt}$$

Sendo as diferenciais zero temos que os coeficientes $C_j(t), j = 1, 2$, são constantes, tal que:

$$C_1(t) = \text{constante} \qquad C_2(t) = \text{constante}$$

Obtivemos a representação matricial e calculamos os autovalores e autovetores, conseguimos descrever o sistema quântico através do vetor de estado físico.

Sendo assim foi possível resolver as equações diferenciais acopladas e determinarmos a expressão dos coeficientes $\mathbf{c}_j(t)$, através da equação de Schrodinger.

AGRADECIMENTOS

Ao orientador que sempre me apoiou e a FUNDECT-MS, pelo apoio financeiro.



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

REFERÊNCIAS

- Berry, M. V. 1984. Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. Proceedings Of Royal Society A, v. 392, n. 1802, p. 45-57. Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B. & Laloë, F. 1977. Quantum Mechanics. New York-EUA, Ed. John Wiley, v. I, 914p.
- Costa Jr., A. T. & Thomaz, M. T. 1997. Dynamics of the Electronic States of Organic Charge-Transfer Salts in in-Phase Mode. Modern Physics Letters B, v. 11, n. 20, p. 877-888.
- Dittrich, W. & Reuter, M. 1994. Classical and Quantum Dynamics- from Classical Paths to Path Integrals, Berlin-Alemanha, Ed. Springer-Verlag, 385p.
- Girardeau, M. D. 1980. Fock-Tani representation for composite particles in a soluble model. Journal of Mathematical Physics, v. 21, n. 9, p. 2365-2375.
- Liebsch, A.; Ishida, H. & Merino, J. 2009. Mott transition in two-dimensional frustrated compounds. Physical Review B, v. 79, n. 19, p. 195108-1-4.
- Merino, J.; Dumm, M.; Drichko, N.; Dressel, M. & McKenzie, R.H. 2008. Quasiparticles at the Verge of Localization near the Mott Metal-Insulator Transition in a Two-Dimensional Material. Physical Review Letters, v. 100, n. 8, p. 086404-1-4.
- Rice, M. J. 1979. Towards the experimental determination of the fundamental microscopic parameters of organic ion-radical compounds. Solid State Communications v. 31, n. 2, p. 93-98.
- Rice, M. J.; Yartsey, V. M. & Jacobsen, C. S. 1980. Investigation of the nature of the unpaired electron states in the organic semiconductor N-methyl-ethylmorpholinium-tetracyanoquinodimethane. Physical Review B, v. 21, n. 8, p. 3437-3446.