Universidade de São Paulo

Instituto de Física

Estudo Analítico e Soluções Exatas da Equação de Spin

Mario Cesar Baldiotti

Orientador: Prof. Dr. Dmitri M. Gitman (IF/USP)

Dissertação apresentada ao IFUSP para a obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Dmitri M. Gitman (IF/USP)

Prof. Dr. Josif Frenkel (IF/USP)

Prof. Dr. Celso Luiz Lima (IF/USP)

Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar (IFT/UNESP)

Prof. Dr. Jéferson de Lima Tomazelli (FGE/UNESP)

São Paulo

2005

Resumo

O presente trabalho se destina a um estudo detalhado da chamada equação de spin, a qual pode ser utilizada para descrever o comportamento de sistemas de dois níveis. Para campos externos dados por funções reais, esta equação pode ser identificada com uma redução da equação de Pauli para o caso $0+1$ dimensional. Inicialmente, demonstraremos a relação entre esta equação de spin e várias outras equações relacionadas com diversos problemas em física. Com estas relações, podemos construir novas soluções da equação de spin a partir do conhecimento de soluções exatas destes outros problemas e, por outro lado, estender a aplicação das soluções obtidas. Em seguida, descrevemos a forma geral da solução desta equação, construímos o operador de evolução e resolvemos o problema inverso, i.e., a determinação do campo externo supondo o conhecimento de uma solução. Finalizando, para o importante caso de campos externos reais, desenvolvemos um método de construção de novas soluções a partir de uma solução previamente conhecida, utilizando a chamada transformação de Darboux. Em particular, demonstramos a existência de operadores de entrelaçamento de Darboux, que não violam a estrutura específica dos sistemas de dois níveis, e permitem construir novos campos externos também dados por funções reais. Como resultado destes desenvolvimentos, apresentamos uma série de novas soluções exatas para a equação de spin.

Abstract

The aim of the present work is to study in detail the so called spin equation, which can be used to describe the behavior of two-level systems. We recall that, for real external fields, this equation can be treated as a reduction of the Pauli equation to the 0+1 dimensional case. Initially, we present the relation between the spin equation and some other equations related to different physical problems. With these relations, we construct new solutions to the spin equation from the knowledge of the exact solutions of these other problems and, on the other hand, extend the applicability of the obtained solutions. After that, we describe the general solution of the spin equation, construct the evolution operator and solve the inverse problem, i.e., the construction of the external field from a given supposed solution. Finally, for the important case of real fields, we develop a method to construct new solutions from a previously known one, by the application of the so called Darboux transformation. In particular, we demonstrate the existence of Darboux intertwining operators which do not violate the specific structure of the two-level systems and allow the construction of external fields which are also given by real functions. As a result of all these developments, we present several new sets of exact solutions for the spin equation.

Dedico este trabalho aos meus pais,

José Daniel Baldiotti,

Rita de Cássia Baldiotti

e, especialmente, ao meu irmão

José Carlos Baldiotti.

O homem sonha monumentos
E só ruínas semeia,
Para pousada dos ventos;
Como os palácios de areia
Dos seus brincos infantis,
Mal divisa o que apetece,
Que tudo se desvanece...

Paulo Eiró, *O Sobrado.*

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Dr. Dmitri M. Gitman; ao Prof. Dr. V.G. Bagrov e a todos os professores do Instituto de Física da USP que contribuíram para a minha formação.

Aos membros da banca.

Ao João Luis Meloni Assirati, cuja contribuição em minha carreira foi nada menos que essencial.

Aos inúmeros amigos que fiz no IFUSP, dentre os quais gostaria de destacar, Rodrigo Fresneda, Carlos Molina Mendes, Thiago dos Santos Pereira, Jose Cleriston Campos de Souza, Fabio Paolini, Ronaldo Carlotto Batista, Vinicius de Souza Fernandes, Marcelo Oliveira da Costa Pires, Milton Alexandre da Silva Junior, Alencar Jose de Faria, Ivan Yasuda e Adriana Ramos de Miranda.

Aos meus amigos Carlos Pedro da Silva, Julio Cesar de Lima e Rogério Morelli.

Ao meu primo Hans Jefferson Radke.

À FAPESP pelo suporte financeiro.

À Beatriz Protti Christino, por existir.

Índice

1 Introdução **1**

1.1 A equação de spin 2

1.2 Campos dependentes do tempo 4

1.3 Aplicações recentes 6

1.3.1 Computadores quânticos 6

1.3.2 Fase geométrica 8

2 Desenvolvimentos formais da equação de spin **12**

2.1 A equação de spin conjugada 13

2.2 Redução do campo externo 14

2.3 Representação vetorial 16

3 Equações relacionadas **19**

3.0.1 Equação de Schrödinger 19

3.0.2 Equação de Euler 20

4 Sobre as soluções da equação de spin **23**

4.1 Solução geral da equação de spin 23

4.2 Soluções estacionárias 24

4.3 A matriz de transformação 25

4.4 O operador de evolução 27

5 O problema inverso para a equação de spin **29**

6 Equação de spin simétrica **31**

6.1 A solução geral e o problema inverso 32

6.2 Formas lagrangiana e hamiltoniana da equação de spin simétrica 33

7 Soluções exatas da equação de spin **35**

7.1 Lista das soluções exatas 37

8 Transformações de Darboux **44**

8.1 Construção do operador de entrelaçamento 45

8.2 Transformações de Darboux para a equação de spin 47

8.3 Exemplos do método de Darboux 50

8.3.1 Primeiro exemplo 50

8.3.2 Segundo exemplo 51

8.3.3 Terceiro exemplo 52

9 Conclusão **55**

A O problema de autovalores **57**

B O problema inverso de autovalores **59**

Capítulo 1

Introdução

No tratamento da interação de sistemas quânticos com campos eletromagnéticos intensos, é um fato conhecido [1] que uma descrição semiclássica, na qual o campo é tratado classicamente, fornece resultados equivalentes aos obtidos por uma quantização total do problema, desde que a flutuação no número de fótons possa ser negligenciada. Além disto, sistemas quânticos complexos, com um espectro de energia discreto, freqüentemente encontram-se em situações dinâmicas especiais, nas quais apenas dois estados estacionários possuem participação significativa. Nestes casos, podemos restringir o espaço de Hilbert que descreve tal sistema a um espaço bidimensional. Um ótimo exemplo deste procedimento é o tratamento da polarização da molécula de amônia [2]. Tais sistemas de dois níveis encontram uma vasta gama de aplicações em diversos problemas em física, por exemplo, na teoria semiclássica do laser [3]; na descrição de experimentos de absorção ressonante e indução nuclear [4], ou no comportamento de um feixe de moléculas através de uma cavidade imersa em um campo elétrico ou magnético [5]. Aplicações mais recentes deste sistema serão apresentadas, com um certo nível de detalhamento, no final deste capítulo.

Este trabalho se destina a uma análise detalhada dos sistemas de dois níveis através do estudo da chamada equação de spin, bem como da relação entre esta e outras equações encontradas em diferentes problemas em física. Será também apresentada uma série de novas soluções exatas para esta equação, além de um método que permite a obtenção de novas soluções.

1.1 A equação de spin

Para o caso mais geral, no qual o sistema está sujeito a interações dependentes do tempo, a descrição do sistema pode ser realizada através de um espinor $V(t)$ com duas componentes dependentes do tempo e a dinâmica será dada pela seguinte equação de Schrödinger em $0+1$ dimensão ($\hbar = c = 1$)

$$i\frac{dV}{dt} = [F_0\mathbf{I} + (\tilde{\sigma}\mathbf{F})]\,V\,,\ V = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}\,,$$
$$(\tilde{\sigma}\mathbf{F}) = F_1\sigma_1 + F_2\sigma_2 + F_3\sigma_3\,, \tag{1.1}$$

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade 2×2, $\tilde{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ são as matrizes de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\,,\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\,,\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\,, \tag{1.2}$$

$F_0(t)$ e $\mathbf{F}(t) = (F_1, F_2, F_3)$ quatro funções, em geral complexas, dependentes do tempo. Como veremos, o caso com funções $F_i(t)$ complexas descreve um possível amortecimento do sistema.

Se $V(t)$ é uma solução da equação (1.1) com $F_0 = 0$, uma solução $V'(t)$ para $F_0 \neq 0$ pode ser obtida fazendo

$$V'(t) = \exp\left[-i\int_0^t F_0(\tau)\,d\tau\right]V(t)\ ,$$

o que permite, sem perda de generalidade, fazer $F_0 = 0$ em (1.1). Com isto, o problema geral assume a forma

$$i\dot{V} = (\tilde{\sigma}\mathbf{F})\,V\,,\ V = \begin{pmatrix} v_1(t) \\ v_2(t) \end{pmatrix}\,,\ \dot{V} = dV/dt\,. \tag{1.3}$$

Neste trabalho, iremos nos referir a (1.3) como a *equação de spin* e a $\mathbf{F}(t)$ como o *campo externo*. Em alguns casos, o campo externo será apresentado na forma

$$\mathbf{F} = \mathbf{K} + i\mathbf{G}\,,\ \mathbf{K} = \mathrm{Re}\,\mathbf{F}\,,\ \mathbf{G} = \mathrm{Im}\,\mathbf{F}\,,$$
$$\mathbf{K} = (K_k)\ ,\ \mathbf{G} = (G_k)\ ,\ k = 1, 2, 3\,, \tag{1.4}$$

onde $\mathbf{K}(t)$ e $\mathbf{G}(t)$ são vetores reais.

Uma realização concreta do problema (1.3) seria uma partícula de momento angular total $J = 1/2$ inserida em um campo magnético (ou elétrico), dependente do tempo, de intensidade $\mathbf{B}(t)$ $(\mathbf{E}(t))$, neste caso identificamos

$$\mathbf{F} = -\mu\mathbf{B} \quad (\mathbf{F} = -\mu\mathbf{E})\ ,$$

onde μ é o momento magnético (elétrico) da partícula. Neste caso, a equação de spin pode ser identificada com a equação de Pauli [6] para uma partícula fixa no espaço. Além disto, como mencionado em [2]; "não importa qual seja o problema de dois níveis original, ele sempre poderá ser interpretado como o problema do elétron".

Mesmo no caso mais simples, quando $\mathbf{F}$ é uma constante, o problema acima possui uma infinidade de aplicações. Por exemplo, freqüentemente, em química, as propriedades óticas provenientes do acoplamento entre dois níveis de uma certa molécula por um campo elétrico estático E_0 são estudadas fazendo $\mathbf{F}_{opt} = (\mu E_0, 0, \Delta_E)$, onde $\Delta_E = (E_0 - E_1)/2$ é a diferença de energia entre o estado fundamental e o excitado. Outra aplicação intensamente explorada dos modelos de dois níveis estáticos é o estudo dos efeitos de tunelamento em um duplo poço de potencial [7]; neste caso é conveniente expressarmos o campo como $\mathbf{F}_{tun} = -1/2\,(\Delta_0, 0, \varepsilon_0)$, onde ε_0 é uma assimetria na energia do estado fundamental de cada poço e Δ_0 a energia de interação entre estes estados. Estes dois problemas estão relacionados pelo operador unitário $R = \exp(i\pi\sigma_2/4)$, pois fazendo $\varepsilon_0 = 2\mu E_0$ teremos $R(\tilde{\sigma}\mathbf{F}_{tun})\,R^{-1} = (\tilde{\sigma}\mathbf{F}_{opt})$.

Existem várias equações equivalentes, ou de certa forma relacionadas, com a equação de spin. Por exemplo, a conhecida equação de Euler que surge na teoria do giroscópio ou