31: Sistemas de dois níveis

Embora os sistemas da natureza tenham, em geral, um grande número de níveis, há situações em que apenas dois deles são relevantes. Um exemplo importante é este: uma onda eletromagnética, monocromática, de frequência $\omega + \epsilon$ (com $\epsilon/\omega \ll 1$) incide sobre um átomo (de infinitos níveis de energia), que tem, entre eles, dois de energia s tais que $E_1 - E_2 = \hbar\omega$. A frequência da onda é muito próxima da diferença de níveis dividida por $\hbar$. Mostramos anteriormente que, neste caso, apenas os níveis E_1 e E_2 participam do processo, sendo, os outros, “espectadores”, que podem, para este fim específico, ser ignorados.

Nesta seção vamos estudar sistemas idealizados que têm somente dois níveis de energia. Supondo que esses níveis não sejam degenerados, conclui-se que todo conjunto completo e linearmente independente de vetores de estado deste sistema possui apenas dois elementos: o conjunto de todos os estados forma, com as operações usuais de adição e multiplicação por um número complexo, um espaço vetorial complexo de dimensão 2, e o hamiltoniano, bem como todos os operadores lineares, podem ser representados por matrizes complexas 2×2 .

A equação de Schrödinger é escrita

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = H\chi \tag{829}$$

e, supondo-se que o hamiltoniano não dependa explicitamente do tempo, pode-se-a integrar formalmente, obtendo

$$\chi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\chi(0) \ . \tag{830}$$

Por causa da simplicidade do sistema, é possível escrever explicitamente o operador $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)$. Os autoestados da energia , $|E_1\rangle$ e $|E_2\rangle$ satisfazem as equações

$$H|E_1\rangle = E_1|E_1\rangle \tag{831}$$

$$H|E_2\rangle = E_2|E_2\rangle \tag{832}$$

e todo estado χ pode ser expandido em termos deles[34]:

$$\chi(t) = |\chi(t)\rangle = \left(|E_1\rangle\langle E_1| + |E_2\rangle\langle E_2|\right)|\chi(t)\rangle \tag{833}$$

$$= \langle E_1|\chi(t)\rangle|E_1\rangle + \langle E_2|\chi(t)\rangle|E_2\rangle = C_1(t)|E_1\rangle + C_2(t)|E_2\rangle \tag{834}$$

Uma função $f(H)$ do hamiltoniano é definida assim:

$$f(H)|\chi(t)\rangle = C_1(t)f(H)|E_1\rangle + C_2(t)f(H)|E_2\rangle = C_1(t)f(E_1)|E_1\rangle + C_2(t)f(E_2)|E_2\rangle \tag{835}$$

Usando-se esta operação mostra-se facilmente que

$$\mathrm{f(H)=f(E_1)}\,\frac{E_2\hat{1}-\hat{H}}{E_2-E_1} + f(E_2)\,\frac{E_1\hat{1}-\hat{H}}{E_1-E_2} \tag{836}$$

que, usada para o operador de evolução temporal, dá:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} &= \frac{1}{E_2-E_1}\left(E_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - E_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right) \\ &+ \frac{\hat{H}}{E_2-E_1}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\right) \end{aligned} \tag{837}$$

De posse deste resultado, podemos formular a pergunta: suponhamos que o sistema se encontre, em $t=0$, em um estado $|\chi(0)\rangle$. Qual é a probabilidade de que, decorridos t segundos, ele permanecer no mesmo estado?

Se, em $t=0$, o estado é $\chi(0)$, teremos, no instante t,

$$\chi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\chi(0) \tag{838}$$

e, usando a expressão acima,

$$\chi(t) = \frac{\chi(0)}{E_2 - E_1}\left(E_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - E_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right) + \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}}{E_2 - E_1}\hat{H}\chi(0) \tag{839}$$

Seja

$$\chi(0) = C_1|E_1\rangle + C_2|E_2\rangle \tag{840}$$

então,

$$\begin{aligned} \chi(t) &= \frac{C_1|E_1\rangle + C_2|E_2\rangle}{E_2 - E_1}\left(E_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - E_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right) \\ &= \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}}{E_2 - E_1}\left(C_1 E_1|E_1\rangle + C_2 E_2|E_2\rangle\right) \end{aligned} \tag{841}$$

A probabilidade de o sistema, em t, estar no mesmo estado, é obtida assim: existe uma base do espaço dos estados formada por $|\chi(0)\rangle$ e outros estados, ortogonais a ele. Expandimos $|\chi(t)\rangle$ nesta base:

$$|\chi(t)\rangle = a(t)|\chi(0)\rangle + \ldots \tag{842}$$

A probabilidade pedida é $|a(t)|^2$. Ora,

$$\langle\chi(0)|\chi(t)\rangle = a(t)\langle\chi(0)|\chi(0)\rangle = a(t)\ . \tag{843}$$

Logo, a probabilidade é $|\langle\chi(0)|\chi(t)\rangle|^2$. Vamos calcular $\langle\chi(0)|\chi(t)\rangle$, a *amplitude de probabilidade*. Usando (839), temos

$$\langle\chi(0)|\chi(t)\rangle = \frac{1}{E_2-E_1}\left(E_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - E_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right) + \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}}{E_2-E_1}\langle\chi(0)|\hat{H}|\chi(0)\rangle \tag{844}$$

Como

$$\langle\chi(0)|\hat{H}|\chi(0)\rangle = \left(C_1^*\langle E_1| + C_2^*\langle E_2|\right)\hat{H}\left(C_1|E_1\rangle + C_2|E_2\rangle\right) = |C_1|^2E_1 + |C_2|^2E_2$$

Então,

$$\langle\chi(0)|\chi(t)\rangle = \frac{1}{E_2-E_1}\left(E_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - E_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right) + \left(|C_1|^2E_1 + |C_2|^2E_2\right)\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}}{E_2-E_1} \tag{845}$$

Suponhamos que $|C_1|^2 = 1$ e $|C_2|^2 = 0$. Então, após uma álgebra simples,

$$\langle\chi(0)|\chi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} \tag{846}$$

logo,

$$|\langle\chi(0)|\chi(t)\rangle|^2 = 1 \tag{847}$$

isto é, um sistema que está num estado estacionário permanece nele (daí se chamar estacionário!).

É fácil mostrar que os estados estacionários são os únicos que possuem esta propriedade. De fato, se

$$\chi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\chi(0) \tag{848}$$

$$\chi(0) = C_1|E_1\rangle + C_2|E_2\rangle \tag{849}$$

$$|\chi(t)\rangle = C_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|E_1\rangle + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}|E_2\rangle \tag{850}$$

$$\langle \chi(0)|\chi(t)\rangle = |C_1|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + |C_2|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} \quad (851)$$

$$|\langle \chi(0)|\chi(t)\rangle|^2 = |C_1|^4 + |C_2|^4 + 2|C_1|^2|C_2|^2 \cos\frac{1}{\hbar}(E_1 - E_2)t \quad (852)$$

Para que $|\langle \chi(0)|\chi(t)\rangle|^2 = 1$ para todo t, temos de ter ou $C_1 = 0$ ou $C_2 = 0$. Em qualquer dos casos o outro coeficiente é de módulo 1, pois $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$. Logo, $\chi(0) = |E_1\rangle$ ou $\chi(0) = |E_2\rangle$.

Tomemos agora uma base arbitrária do espaço dos estados, formada por $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$. O estado $|\chi(t)\rangle$ é expandido, nesta base, como

$$|\chi(t)\rangle = (|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2|)\,|\chi(t)\rangle = \langle\phi_1|\chi(t)\rangle|\phi_1\rangle + \langle\phi_2|\chi(t)\rangle|\phi_2\rangle \quad (853)$$

Introduzindo a notação

$$\chi_i(t) \equiv \langle\phi_i|\chi(t)\rangle \ ,$$

temos

$$|\chi(t)\rangle = \chi_1(t)|\phi_1\rangle + \chi_2(t)|\phi_2\rangle \quad (854)$$

A equação de Schrödinger é

$$i\hbar\frac{\partial|\chi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\chi(t)\rangle = \chi_1(t)\hat{H}|\phi_1\rangle + \chi_2(t)\hat{H}|\phi_2\rangle \quad (855)$$

e, tomando os produtos escalares com $|\phi_i\rangle$,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\phi_1|\chi(t)\rangle = \chi_1(t)\langle\phi_1|H|\phi_1\rangle + \chi_2(t)\langle\phi_1|H|\phi_2\rangle \quad (856)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\phi_2|\chi(t)\rangle = \chi_1(t)\langle\phi_2|H|\phi_1\rangle + \chi_2(t)\langle\phi_2|H|\phi_2\rangle \quad (857)$$

Denotando $\langle\phi_i|H|\phi_j\rangle$ por H_{ij}, temos

$$i\hbar\frac{\partial\chi_1}{\partial t} = H_{11}\chi_1 + H_{12}\chi_2 \tag{858}$$

$$i\hbar\frac{\partial\chi_2}{\partial t} = H_{21}\chi_1 + H_{22}\chi_2 \tag{859}$$

Para estados estacionários, $H_{12} = H_{21} = 0$. Logo, os elementos de matriz H_{21} e H_{12} promovem as transições entre estados.

De fato, seja $|\phi_1\rangle$ um dos estados da base.

$$|\phi_1(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\phi_1\rangle \tag{860}$$

$$= \frac{|\phi_1\rangle}{E_2 - E_1}\left(E_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - E_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right) + \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}}{E_2 - E_1}\hat{H}|\phi_1\rangle \tag{861}$$

Qual é a probabilidade de que, em algum t, o sistema se encontre em $|\phi_2\rangle$? A amplitude é dada por

$$\langle\phi_2|\phi_1(t)\rangle = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}}{E_2 - E_1}\langle\phi_2|\hat{H}|\phi_1\rangle \tag{862}$$

Não há transição se $H_{21} = 0$.

As equações (863) são as Eqs.(8.43) do Volume III das ``Feynman Lectures on Physics'', que as utiliza para um grande número de aplicações interessantes. Vamos fazer o mesmo.