

TESE DE
MESTRADO

**Construção de Soluções Exatas e
Aproximadas para o Efeito
Stern-Gerlach**

JUAN J. DÍAZ BULNES

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS-CBPF

RIO DE JANEIRO, SETEMBRO DO 2000

A mi padre

As Gerlach recalled :

And one day Stern came and said : “With the magnetic experiment one can do something else. Do you know what directional (space-) quantization is?”

I said, “No, I don’t know anything about it.” Then he told me about it and asked : “Shall we do it? Well, then let’s go, we shall do it!”

Gerlach, AHQP Interview, 15 July 1963

Agradecimentos

Ao meu professor e orientador Dr. Ivan S. Oliveira;

Aos integrantes do grupo LABMAG/DMF do CBPF;

A meus professores : J.A. Helayël, A.O. Caride, A.P. Guimarães,

E. Mota e A. Smith;

A meus amigos e colegas : L. Peche, R. Pujada, V. Montero, V. de Jesus,

R. Casana, G. Cuba, G. Gomero, D. Proleon, L. Carrion, G.F. Janampa,

B. Alves, M. Orsaria, F. Vizcarra, G. Flores, E. Borges, F. Toscano e M. Abanto;

Ao pessoal do DMF, da Biblioteca e do CFC;

Ao CNPq pela bolsa concedida;

Ao Prof. H.G. Valqui, da UNI, Lima.

Resumo

Nesta tese apresentamos soluções para o efeito Stern-Gerlach sobre um feixe de partículas neutras, cada uma delas de massa m e spin $1/2$, viajando no interior de um campo magnético inhomogêneo do tipo $\mathbf{B}(y, z) = -\alpha y\mathbf{j} + (B_0 + \alpha z)\mathbf{k}$. Inclui-se também a generalização dos resultados achados (autoenergias) para um feixe de partículas neutras de spin arbitrário S .

No capítulo 1 fazemos uma revisão de algumas soluções obtidas para o efeito Stern-Gerlach: soluções aproximadas para as equações acopladas de Schrödinger-Pauli.

No capítulo 2 conseguimos construir soluções exatas para o sistema (desacoplado) de equações de Schrödinger-Pauli sobre o plano de simetria $Y = 0$, o qual contém o feixe incidente e os feixes desviados. As funções de onda correspondentes são escritas em termos das funções de Airy do tipo Ai . A evolução temporal da densidade de probabilidade, $|\Psi_+|^2$ e $|\Psi_-|^2$, e as energias próprias são calculadas. As energias próprias incluem uma pequena contribuição do gradiente de campo, proporcional a $(\alpha\hbar)^{2/3}$, que produz pequenos deslocamentos positivos nos níveis magnéticos.

No capítulo 3 fazendo $B_0 = 0$ achamos soluções exatas no plano $Z = 0$ para o sistema de equações acopladas respectivas. Estas soluções mostram que as partículas, num certo estado de spin, podem movimentar-se para a direita ou para a esquerda, com respeito à direção escolhida,

No capítulo 4 construímos soluções aproximadas para o sistema de equações de Schrödinger-

Pauli. Estas soluções também mostram que o efeito de separação espacial não é total, ou seja, que para cada estado de spin temos uma densidade de probabilidades formada por duas componentes que viajam em direções contrárias. Dito em outras palavras, estas soluções mostram que pode-se achar partículas de “spin up” na região onde só se esperaria achar as de “spin down” e vice-versa, o que de fato acontece num experimento real de Stern-Gerlach [1].

No capítulo 5 apresentamos uma generalização para átomos de spin $3/2$ (e depois para qualquer spin) que permite ver que os níveis de energia deslocam-se de quantidades distintas.

No capítulo 6 apresentamos um análise das ordens de grandeza das quantidades obtidas. Finalmente apresentamos nossas discussões e conclusões.

Abstract

We obtain exact solutions for the Schrödinger-Pauli matrix equation for a neutral particle of spin $1/2$ in a magnetic field with a field gradient. The analytical wavefunctions are written on the symmetry plane $Y = 0$, which contains the incident and splitted beams, in terms of the Airy functions. The time-evolution of the probability densities, $|\Psi_+|^2$ and $|\Psi_-|^2$, and the eigenenergies are calculated. The eigenenergies include a small contribution from the field gradient, α , proportional to $(\alpha\hbar)^{2/3}$. This amounts to equal energy displacements on both magnetic levels. A survey of current solutions for the Stern-Gerlach effect is presented in Chapter 1.

In Chapter 2 one obtains exact solutions on the symmetry plane $Y = 0$. In Chapter 3 one obtains exact solutions on the plane $Z = 0$ with $B_o = 0$. In Chapter 4 approximate solutions are obtained. They show that some degree of mixture for spin-up and spin-down wavefunctions is expected, what seems to be the case in a real experiment.

Chapter 5 is a generalization for arbitrary spin. Conclusions follow on Chapter 7, after a brief analysis of the order of magnitude of the quantities involved in the problem.

Conteúdo

Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Abstract	v
Índice	vi
Introdução	1
1 O Efeito Stern-Gerlach	2
1.1 O experimento Stern-Gerlach	2
1.2 O aparelho Stern-Gerlach	3
1.3 Construção do hamiltoniano de Stern-Gerlach	5
1.4 Soluções para o efeito Stern-Gerlach: Uma Revisão	12
1.4.1 Solução para o campo local	12
1.4.2 Aproximação de gradiente pequeno	15
1.4.3 Aproximação para átomos compostos	18
1.4.4 Solução via análise de Fourier	21
1.5 O Efeito Stern-Gerlach na pesquisa atual	24
2 Soluções Exatas sobre o plano $Y = 0$	26
2.1 O caso de Spin $1/2$	26
2.2 Construção das soluções	30

2.3	Auto Energias	44
3	Solução Exata com $B_o = 0$ no plano $Z = 0$	48
3.1	Introdução	48
3.2	Desacoplando o sistema de equações	49
4	Soluções Aproximadas para o Efeito Stern-Gerlach	55
4.1	Introdução	55
4.2	Transformação de funções para as equações acopladas	56
4.3	Construção de soluções aproximadas	59
5	Átomos com spin arbitrário	67
5.1	O Spin $3/2$	67
5.2	Soluções quânticas no caso de spin $3/2$	67
5.3	O caso de spin arbitrário	70
6	Ordens de Grandeza	71
6.1	Separação energética	71
6.2	Separação espacial	73
7	Discussões e Conclusões	76
7.1	Discussões	76
7.2	Conclusões	80
	Bibliografia	xx

Introdução

O experimento Stern-Gerlach é conhecido porque mostrou um efeito quântico “novo”. Nesta experiência um feixe de certo tipo de átomos neutros que entram num campo magnético não homogêneo é desdobrado dentro dele em outros dois, os quais afastam-se mais ou menos simetricamente em relação à direção de incidência. Isto pode ser explicado supondo que tais átomos possuem uma certa propriedade, chamada de spin, que ao interagir com o campo magnético produz tal separação. Este efeito, que foi estudado por seus realizadores com argumentos clássicos [2], só pode ser entendido por considerações quânticas. A equação de Schrödinger-Pauli, formulada anos depois da realização deste experimento, governa a sua dinâmica. Em alguns textos de mecânica quântica, e em geral nas publicações, apresentam-se soluções para esta equação fazendo uso de aproximações distintas -como a de gradiente pequeno ou alto- as quais geram, por sua vez, algumas simplificações importantes e onde, portanto, o gradiente de campo não aparece explicitamente com valor arbitrário. Todo isto significa que não temos soluções analíticas exatas para o sistema de equações acopladas sobre o espaço todo nem sobre nenhum sub-espaço. As diversas soluções das equações correspondem ao que se poderia chamar efeito Stern-Gerlach idealizado (separação total). De fato, num experimento real a situação é mais complexa [1]. Isto não surpreende pois ao resolver aproximadamente equações com conteúdo físico se perde um pouco de informação. Nossas soluções mostram “novidades” que as outras não conseguem mostrar.

Capítulo 1

O Efeito Stern-Gerlach

1.1 O experimento Stern-Gerlach

Em 1921, para verificar que os átomos possuem um dipolo magnético, os físicos O. Stern e W. Gerlach fizeram atravessar um feixe de átomos de prata através de uma região na qual haviam produzido um campo magnético que variava fortemente com a posição (forte gradiente), esperando que, ao incidir sobre a tela, o feixe só incrementasse um pouco sua seção transversal (em relação ao obtido no caso quando ingressam num campo uniforme). Pela disposição do experimento, e por se acharem os átomos no seu estado fundamental, $m = 0$, esperava-se que sobre o anteparo se formasse somente um ponto, como se não estivesse presente o campo magnético. Mas, para sua surpresa, na tela podia-se ver duas zonas de impacto (como mostra a Figura 1) simetricamente dispostas com relação ao ponto onde se esperaria haver batido o feixe de átomos (segundo a física clássica). A surpresa foi ainda maior pois, como já se indicou, os átomos haviam sido preparados num estado s , no qual o momento dipolar orbital é nulo (com o que o m também é nulo).

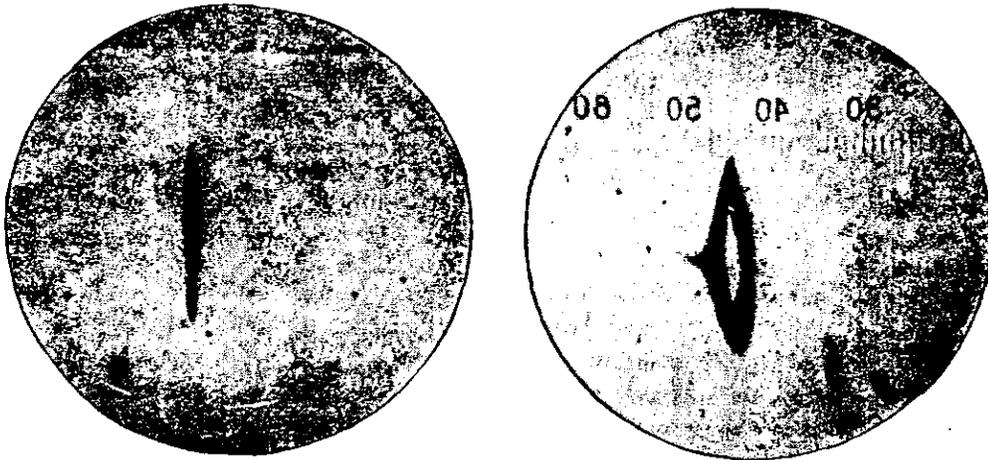


Fig 1. Manchas obtidas num experimento real de Stern-Gerlach [3]

Na ausência de campo magnético, só uma única linha é formada sobre o anteparo. Quando aplicado um campo inhomogêneo surgem duas linhas distintas, no lugar de uma única mancha, como seria esperado pela física clássica.

Na primeira observação bem sucedida (novembro 1921) Stern e Gerlach relataram que os experimentos com campos magnéticos produziram uma mancha que estendia-se na direção do gradiente, tendo um comprimento de 0.1mm e uma largura de 0.25 a 0.30mm (pag. 441, [4]).

1.2 O aparelho Stern-Gerlach

Na figura 2 mostra-se o esquema geral do dispositivo original Stern-Gerlach. Um pequeno forno elétrico, a uma temperatura de $\approx 1300^\circ\text{C}$ [4], contém uma pequena quantidade de prata (cuja temperatura de fusão é $\approx 961^\circ\text{C}$, [4]). A esta temperatura produz-se no interior do forno uma pressão de vapor suficientemente grande para permitir que muitos átomos

escapem por um pequeno orifício feito numa das paredes. Um feixe estreito de átomos, que se movimenta com velocidades térmicas ($\approx 500 \text{ m/s}$ [5]; $\approx 600 \text{ m/s}$ [6]), é colimado por pequenas fendas ($\approx 0.1 \text{ mm}$, [4]), e ingressa em uma região entre dois magnetos que produzem um campo magnético inhomogêneo (com gradiente de $\approx 10^3 \text{ T/m}$ [5, 7]; $\approx 10^2 \text{ T/m}$ [4]) para finalmente alcançar um anteparo de vidro (resfriado com gelo de dióxido de carbono, acetona ou ar líquido) sobre o qual se condensa. O campo magnético gerado também tem uma componente homogênea ($\approx 1 \text{ T}$ [5, 6]). Todo o aparelho fica no interior de um recipiente onde se mantém um alto vácuo ($\approx 10^{-5} \text{ torr}$ [4]).

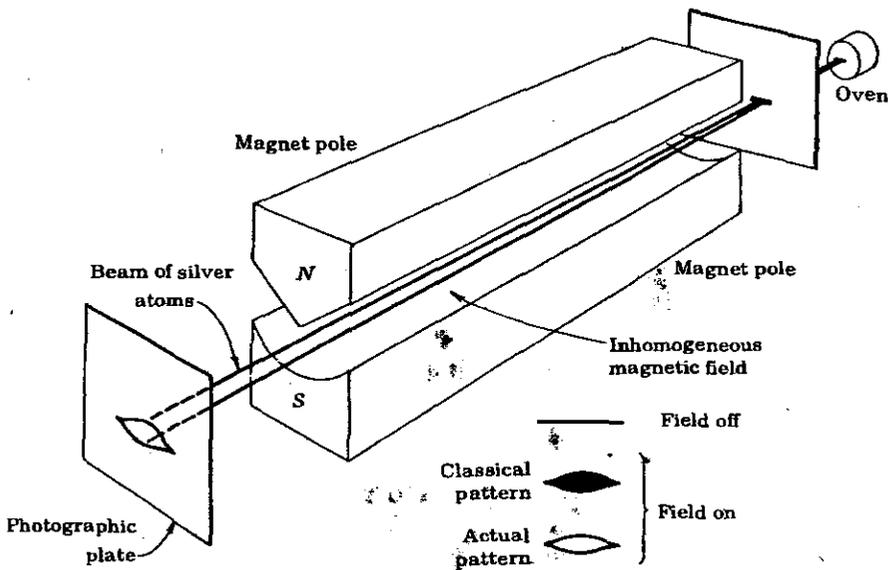


Fig 2. O aparelho Stern-Gerlach

O campo magnético no interior da região do magneto é muito complicado e no caso mais geral tem a seguinte forma [8] :

$$\mathbf{B}(y, z) = B_1(y, z)\mathbf{j} + (B_0 + B_2(y, z))\mathbf{k} \quad (1.1)$$

onde $B_1(y, z)$ e $B_2(y, z)$ satisfazem as relações :

$$\frac{\partial B_1}{\partial y} = -\frac{\partial B_2}{\partial z}$$

$$\frac{\partial B_2}{\partial y} = \frac{\partial B_1}{\partial z}$$

e onde $|B_0| \gg |B_1| \approx |B_2|$. O campo mais simples tem a seguinte forma :

$$\mathbf{B}(y, z) = -\alpha y \mathbf{j} + (B_0 + \alpha z) \mathbf{k} \quad (1.2)$$

o qual é o empregado de maneira geral no estudo teórico deste efeito. Neste trabalho, nós faremos uso desta mesma expressão.

1.3 Construção do hamiltoniano de Stern-Gerlach

Aqui seguiremos a referência [9] para átomos de spin $S = 1/2$. Primeiro será conveniente lembrar que quando um feixe de luz “branca” atravessa um prisma, ele é descomposto em feixes com distintas cores. Isto pode ser interpretado como se os feixes de distintas cores estivessem superpostos, de maneira que tal superposição constitui o feixe “branco”, e que o prisma foi o mecanismo que permitiu separar tais feixes de cores. De modo semelhante podemos supor que a função de onda de um conjunto de partículas (átomos) que incidem sobre um aparelho de Stern-Gerlach é uma “superposição” de funções de onda (cada uma correspondente a uma das “cores” do spin). Esta “superposição” poderia ser detectada apenas na presença de um campo magnético não homogêneo (que faria o papel do prisma).

Com o objetivo de obter uma equação de Schrödinger que proporcione duas soluções diferentes (cada uma correspondendo a uma “cor” do spin), como um primeiro passo vamos escrever duas vezes a mesma equação estacionária de Schrödinger:

$$\hat{\mathcal{H}}f_1 = Ef_1 \quad , \quad \hat{\mathcal{H}}f_2 = Ef_2 \quad (1.3)$$

onde $\hat{\mathcal{H}}$ é o operador hamiltoniano :

$$\hat{\mathcal{H}} = (1/2m)\mathbf{P}^2 + V \quad (1.4)$$

sendo \mathbf{P} o operador (vetorial) de momento linear e V o operador (escalar, multiplicativo) de potencial.

Por outro lado, sabe-se que se um elétron ingressa num campo magnético \mathbf{B} , o momento linear passa a ser $\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}$, onde $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$, e o hamiltoniano toma a forma :

$$\hat{\mathcal{H}}_B = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A})^2 + V \quad (1.5)$$

A seguir escrevem-se as duas equações escalares (1.3) como uma única equação (matricial)

$$H^\circ f = Ef \quad (1.6)$$

onde H° é uma matriz diagonal trivial, f é uma função vetorial e E é um número real:

$$H^\circ = \begin{pmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{pmatrix} = HI, \quad f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

sendo I a matriz unitária. Notar que também se poderia escrever:

$$H^\circ = (1/2m)\hat{\mathbf{P}}^2\mathbf{I} + VI \quad (1.8)$$

É claro que (1.6) é uma forma trivial de reescrever as duas equações (1.3).

Agora, tendo em conta que \mathbf{P} é um operador (vetorial) de três componentes $\mathbf{P} = (\hbar/i)\nabla$, vamos contruir um operador $\hat{\mathcal{P}}$ multiplicando cada uma de suas componentes por um coeficiente matricial,

$$\hat{P} = U_1 P_1 + U_2 P_2 + U_3 P_3 \quad (1.9)$$

onde os U_k são certas matrizes dois por dois. Notar que não é importante a ordem dos produtos $U_k P_k$. As matrizes devem ser construídas de maneira que :

$$\hat{P}^2 = \hat{P}^2 I \quad (1.10)$$

ou seja,

$$H^o = (1/2m)\hat{P}^2 + V I \quad (1.11)$$

Elevando ao quadrado a expressão (1.9) e tendo em conta que as componentes de \hat{P} comutam entre si, obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{P}^2 = & U_1^2 P_1^2 + U_2^2 P_2^2 + U_3^2 P_3^2 + (U_1 U_2 + U_2 U_1) P_1 P_2 + \\ & +(U_2 U_3 + U_3 U_2) P_2 P_3 + (U_3 U_1 + U_1 U_3) P_3 P_1 \end{aligned} \quad (1.12)$$

Agora, com o objetivo de satisfazer a condição (1.10) requer-se que as matrizes U_k satisfaçam as condições :

$$U_1^2 = U_2^2 = U_3^2 = I \quad (1.13)$$

$$U_k U_j + U_j U_k = 0, \quad \text{para } k \neq j \quad (1.14)$$

Até aqui a equação (1.6), com o hamiltoniano (1.11) só é uma forma trivial de se escrever a mesma equação de Schrödinger para um elétron na ausência de um campo magnético. Agora ligamos um campo magnético B , o que, segundo (1.5) e (1.11) nos leva a considerar o hamiltoniano (matricial)

$$\hat{\mathcal{H}}_B^o = \frac{1}{2m}(\hat{\mathcal{P}} + e\hat{\mathcal{A}})^2 + VI \quad (1.15)$$

Este hamiltoniano já não é diagonal, pois as componentes de \mathbf{P} não comutam com as componentes de \mathbf{A} , e as componentes do operador $\mathbf{P} + e\mathbf{A}$ não comutam entre si.

A equação correspondente :

$$\hat{\mathcal{H}}_B^o f = E_B^o f \quad (1.16)$$

onde E_B^o é um número real, representa as duas equações (escalares) acopladas.

Agora tendo em conta tanto as relações (1.13) e (1.14) como

$$P_i P_j - P_j P_i = 0, \quad A_i A_j - A_j A_i = 0$$

e também

$$P_i A_j - A_j P_i = \left(\frac{\hbar}{i}\right) \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i}\right)$$

pode-se desenvolver o operador $(\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2$ da seguinte maneira :

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{P}} + e\hat{\mathcal{A}})^2 &= (\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2 + e(P_1 A_2 + A_1 P_2 - P_2 A_1 - A_2 P_1)U_1 U_2 \\ &\quad + e(P_2 A_3 + A_2 P_3 - P_3 A_2 - A_3 P_2)U_2 U_3 + e(P_3 A_1 + A_3 P_1 - P_1 A_3 - A_1 P_3)U_3 U_1 + \\ &= (\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2 + \frac{\hbar e}{i} \left(\frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2}\right)U_1 U_2 + \frac{\hbar e}{i} \left(\frac{\partial A_3}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_3}\right)U_2 U_3 + \frac{\hbar e}{i} \left(\frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1}\right)U_3 U_1 \\ &= (\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2 + \left(\frac{\hbar e}{i}\right)(B_3 U_1 U_2 + B_1 U_2 U_3 + B_2 U_3 U_1) \end{aligned} \quad (1.17)$$

ou seja,

$$(\hat{\mathcal{P}} + e\hat{\mathbf{A}})^2 = (\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2 + 2eS_B \quad (1.18)$$

onde

$$S_B = \left(\frac{\hbar e}{i}\right)(B_3U_1U_2 + B_1U_2U_3 + B_2U_3U_1) \quad (1.19)$$

o que nos permite escrever :

$$\hat{\mathcal{H}}_B^o = \hat{\mathcal{H}}_B I + \frac{e}{m} S_B \quad (1.20)$$

onde, como se desejava, no novo hamiltoniano surge um termo adicional, dependente do campo magnético.

Agora vamos ver a forma que deve ter S_B . De (1.13) e (1.14) obtemos que $U_k = -U_1U_kU_1$, de onde resulta que o traço de cada uma de tais matrizes deve ser nulo.

$$Tr(U_k) = 0 \quad , k = 1, 2, 3$$

ou seja, estas matrizes devem ter a forma

$$\begin{pmatrix} q & r \\ s & -q \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

Como as matrizes procuradas devem representar um observável físico, elas devem ser autoadjuntas, ou seja, o número q deve ser real e, além disto, temos que $s = r^*$. Por outro lado, devido a (1.13), os elementos de matriz devem satisfazer a $q^2 + rs = 1$. A forma mais geral de uma matriz que satisfaz estas demandas é :

$$\begin{pmatrix} \cos\beta & e^{i\mu}\text{sen}\beta \\ e^{-i\mu}\text{sen}\beta & -\cos\beta \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

onde μ e β são números reais arbitrários. Agora, já que para um sistema de três matrizes autoadjuntas sempre pode-se achar uma transformação unitária que diagonalize uma delas, então para U_3 pode-se tomar o valor $\beta = 0$, obtendo

$$U_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

Se, agora, de acordo com (1.14) requeremos que as matrizes da forma (1.22) devam anticomutar com a matriz (1.23) obtemos $\cos\beta = 0$, isto é $\beta = \pi/2$. Então, as outras matrizes tomam a forma

$$U_1 = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\mu_1} \\ e^{-i\mu_1} & 0 \end{pmatrix} \quad U_2 = \begin{pmatrix} 0 & -e^{i\mu_2} \\ e^{-i\mu_2} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

Mas, por outro lado, estas matrizes devem anticomutar entre si, $U_1U_2 + U_2U_1 = 0$. Desta condição resulta que necessariamente $\cos(\mu_1 - \mu_2) = 0$, ou seja $\mu_1 - \mu_2 = \pi/2$. Agora, vamos escrever $\mu_1 = \mu$. Então obtemos $e^{i\mu_2} = ie^{i\mu}$, com o qual pode-se escrever :

$$U_1 = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\mu} \\ e^{-i\mu} & 0 \end{pmatrix} \quad U_2 = i \begin{pmatrix} 0 & -e^{i\mu} \\ e^{-i\mu} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

onde μ é um número real arbitrário. Para o caso particular $\mu = 0$, obtém-se as conhecidas matrizes de Pauli.

Usando (1.23) e (1.24) pode-se verificar que, ao multiplicar tais matrizes, se obtém as relações :

$$U_j U_k = i U_m \quad (1.26)$$

para $j, k, m = 1, 2, 3$ ciclicamente, o qual, com (1.19) permite-nos escrever

$$S_B = \frac{\hbar}{2}(U_1 B_1 + U_2 B_2 + U_3 B_3) = \frac{\hbar}{2} \mathbf{U} \cdot \mathbf{B} \quad (1.27)$$

Se agora definimos as matrizes :

$$S_k = \frac{\hbar}{2} U_k, \quad \mathbf{S} = (S_1, S_2, S_3) \quad (1.28)$$

pode-se verificar que as relações são satisfeitas :

$$S_i S_k = \frac{i\hbar}{2} S_m, \quad \text{para } j, k, m = 1, 2, 3 \text{ cíclicamente,}$$

$$S_j S_k + S_k S_j = 0, \quad \text{para } j \neq k \quad (1.29)$$

das quais pode-se obter a relação

$$\mathbf{S} \times \mathbf{S} = i\hbar \mathbf{S} \quad (1.30)$$

que é a mesma equação satisfeita pelos operadores de momento angular.

Usando (1.23), (1.25), (1.27) e (1.28) obtemos :

$$S_B = \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_3 & -e^{i\mu} B_- \\ e^{-i\mu} B_+ & -B_3 \end{pmatrix}$$

onde $B_- = B_1 - iB_2$, $B_+ = B_1 + iB_2 = B_-^*$, o que mostra que o hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_B^o$, ao contrário de H^o , não é trivialmente diagonal.

Também pode-se verificar que :

$$\vec{a}_+ = \begin{pmatrix} B + B_3 \\ e^{-i\mu} B_+ \end{pmatrix} \quad \vec{a}_- = \begin{pmatrix} e^{-i\mu} B_+ \\ -B - B_3 \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

onde B é o módulo de \mathbf{B} , são os vetores próprios do operador S_B .

$$S_B \vec{a}_+ = (B\hbar/2) \vec{a}_+ \quad S_B \vec{a}_- = (-B\hbar/2) \vec{a}_- \quad (1.32)$$

os vetores \vec{a}_+ e \vec{a}_- são ortogonais mas não unitários.

1.4 Soluções para o efeito Stern-Gerlach: Uma Revisão

Aqui apresentamos algumas soluções para as equações de Schrödinger-Pauli para o efeito Stern-Gerlach feitas com aproximações distintas. Estas servirão como ilustração do que já foi feito neste campo. Para maiores detalhes, consultar a bibliografia fornecida.

1.4.1 Solução para o campo local

Continuando com a referência [9] a primeira coisa que vamos tentar é obter dois vetores \vec{a}_+ e \vec{a}_- que sejam unitários, a partir daqueles dados em (1.31). Para isto vamos escrever o campo \mathbf{B} em coordenadas esféricas expressa em algum sistema de referência (arbitrário):

$$B_1 = B \sin\phi \cos\beta, \quad B_2 = B \sin\phi \sin\beta, \quad B_3 = B \cos\phi$$

o que permite escrever :

$$B_+ = Be^{i\beta} \text{sen}\phi = 2B \cos \frac{\phi}{2} e^{i\beta} \text{sen} \frac{\phi}{2}$$

$$B + B_3 = 2B \cos \frac{\phi}{2} \cos \frac{\phi}{2}$$

além de construir os vetores próprios ortonormais :

$$\vec{A}_+(\phi, \beta) = \begin{pmatrix} e^{i(\mu-\beta)} \cos(\phi/2) \\ \text{sen}(\phi/2) \end{pmatrix}, \quad \vec{A}_-(\phi, \beta) = \begin{pmatrix} e^{i(\mu-\beta)} \text{sen}(\phi/2) \\ -\cos(\phi/2) \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

e re-escrever o operador S_B

$$S_B = \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\phi, \beta) = \frac{B\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\phi & e^{i(\mu-\beta)} \text{sen}\phi \\ e^{-i(\mu-\beta)} \text{sen}\phi & -\cos\phi \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

Definindo a constante numérica

$$b = \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)B$$

e tendo presente as expressões (1.20) e (1.34) podemos escrever (1.16) na forma :

$$\begin{pmatrix} H_B + b \cos\phi & b e^{i(\mu-\beta)} \text{sen}\phi \\ b e^{-i(\mu-\beta)} \text{sen}\phi & H_B - b \cos\phi \end{pmatrix} f = E_B^o f \quad (1.35)$$

ou,

$$[H_B + b \cos\phi] f_1 + [b e^{i(\mu-\beta)} \text{sen}\phi] f_2 = E_B^o f_1 \quad (1.36)$$

$$[be^{-i(\mu-\beta)}\text{sen}\phi]f_1 + [H_B - b\cos\phi]f_2 = E_B^o f_2 \quad (1.37)$$

onde eventualmente devemos considerar dois valores para E_B^o .

Sejam, por outro lado, g_1 e g_2 duas autofunções do operador H_B .

$$H_B g_1 = E_B g_1, \quad H_B g_2 = E_B g_2 \quad (1.38)$$

correspondentes a um mesmo autovalor (não se exige que as funções sejam linearmente independentes). Agora mostraremos que tais funções são soluções das equações (1.36) e (1.37). Com efeito, aplicando (1.38) a (1.36) e (1.37) pode-se escrever

$$[E_B + b\cos\phi]g_1 + [be^{i(\mu-\beta)}\text{sen}\phi]g_2 = E_B^o g_1 \quad (1.39)$$

$$[be^{-i(\mu-\beta)}\text{sen}\phi]g_1 + [E_B - b\cos\phi]g_2 = E_B^o g_2 \quad (1.40)$$

cujas soluções não triviais exigem que os coeficientes das funções consideradas satisfaçam a equação :

$$[E_B + b\cos\phi][E_B - b\cos\phi] - b^2 \text{sen}^2 \phi = 0 \quad (1.41)$$

a mesma que proporciona dois valores para a energia E_B^o

$$E_{B1}^o = E_B + b, \quad E_{B2}^o = E_B - b$$

ou

$$E_{B1}^o = E_B + \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)B, \quad E_{B2}^o = E_B - \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)B$$

que são os valores da energia que se obtém no experimento de Stern-Gerlach. Além disto, obtemos que as autofunções correspondentes são :

$$f_+ = \begin{pmatrix} e^{i(\mu-\beta)} \cos(\phi/2) g_1 \\ \text{sen}(\phi/2) g_1 \end{pmatrix} = A_+(\phi, \beta) g_1$$

$$f_- = A_-(\phi, \beta) g_1$$

onde g_1 é uma das funções (1.38).

1.4.2 Aproximação de gradiente pequeno

Aqui seguimos a referência [10]. Vamos considerar um feixe de átomos (de Ag por exemplo) os quais são descritos como partículas livres, exceto pelo seu momento magnético que interage com o campo magnético externo B inhomogêneo.

O campo magnético considerado é : $B = (0, -\alpha y, B_o + \alpha z)$, sendo $\alpha = \partial B_z / \partial z$, o gradiente do campo, suposto positivo e de valor constante. Logo a equação (matricial) de Schrödinger-Pauli será

$$i\hbar \frac{\partial \psi_+}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_+ - \mu(B_o + \alpha z) \psi_+ - i\mu\alpha y \psi_- \quad (1.42)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_-}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_- + \mu(B_o + \alpha z) \psi_- + i\mu\alpha y \psi_+ \quad (1.43)$$

Ao penetrar no campo magnético no instante $t = 0$, um átomo do feixe é descrito pela função de onda :

$$|\Psi_o\rangle = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} e^{ikx} \quad (1.44)$$

onde $|c_+|^2$ e $|c_-|^2$ são as probabilidades de que tenha “spin *up*” ou “spin *down*” na direção z , respectivamente.

No caso de $\alpha = 0$ (campo magnético uniforme) a solução da equação é :

$$|\Psi(t)\rangle_{\alpha=0} = \begin{pmatrix} c_+ e^{i(kx - w_+ t)} \\ c_- e^{i(kx - w_- t)} \end{pmatrix} \quad (1.45)$$

onde $w_{\pm} = (\hbar k^2/2m) \pm (-\mu B_o/\hbar)$. A seguir vamos considerar o caso $\alpha \neq 0$ na equação de Pauli. Concretamente vamos considerar no sistema de equações que α é *pequeno*, ou seja termos em α^2, \dots são desprezíveis em comparação com termos em α (a inhomogeneidade é uma *perturbação pequena* do campo uniforme intenso B_o). Quando $\alpha \neq 0$, a principal diferença com respeito a (1.45) é que c_+ e c_- não são mais constantes, mas passam a depender do tempo. Então, são procuradas soluções da forma :

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_+(t) e^{i(kx - w_+ t)} \\ c_-(t) e^{i(kx - w_- t)} \end{pmatrix} \quad (1.46)$$

Substituindo em (1.42) e (1.43) temos :

$$i\hbar \dot{c}_+ = -\mu\alpha z c_+ - i\mu\alpha y c_- e^{(w_+ - w_-)t} \quad (1.47)$$

$$i\hbar \dot{c}_- = \mu\alpha z c_- + i\mu\alpha y c_+ e^{-(w_+ - w_-)t} \quad (1.48)$$

Agora, considera-se uma equação do tipo :

$$\dot{c}_+ = b e^{i\Omega_o t} \quad \longrightarrow \quad c = \frac{b}{i\Omega_o} e^{i\Omega_o t} + const. \quad (1.49)$$

onde o denominador Ω_o é grande, o que implica numa contribuição pequena. Logo:

$$\frac{b}{\Omega_o} \approx \frac{\mu\alpha y}{\hbar\Omega_o} = \frac{\mu y(\partial B_z/\partial z)}{2\mu B_o} \approx \frac{\Delta B_z}{B_o} \ll 1 \quad (1.50)$$

Logo, as eqs. (1.47) e (1.48) ficam :

$$i\hbar\dot{c}_+ \approx -i\mu\alpha z c_+ \quad (1.51)$$

$$i\hbar\dot{c}_- \approx i\mu\alpha z c_- \quad (1.52)$$

cujas soluções são :

$$c_+(t) = c_+(0)e^{i\mu\alpha z t/\hbar} \quad (1.53)$$

$$c_-(t) = c_-(0)e^{-i\mu\alpha z t/\hbar} \quad (1.54)$$

Substituindo nas eq.(1.46) obtém-se uma solução (aproximada) para $|\Psi(t)\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_+(t)e^{i[kz+(\alpha\mu t z/\hbar)-i\omega_+ t]} \\ c_-(t)e^{i[kz-(\alpha\mu t z/\hbar)-i\omega_- t]} \end{pmatrix} \quad (1.55)$$

Ao substituir nas equações (1.42) e (1.43) temos :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_+ - i\mu\alpha y\psi_- - \mu(B_o + \alpha z)\psi_+ &= i\hbar\frac{\partial\psi_+}{\partial t} + \\ &+ \left(\frac{\alpha^2\mu^2 t^2}{2m}\right) c_+(0)e^{+} - i\mu\alpha y c_-(0)e^{-} \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_- + i\mu\alpha y\psi_+ + \mu(B_o + \alpha z)\psi_- = i\hbar\frac{\partial\psi_-}{\partial t} +$$

$$+ \left(\frac{\alpha^2 \mu^2 t^2}{2m} \right) c_-(0)e_- + i\mu\alpha y c_+(0)e_+ \quad (1.57)$$

de onde pode-se ver que, efetivamente, temos uma solução (aproximada) quando α é muito pequeno.

1.4.3 Aproximação para átomos compostos

Aqui seguimos a referência [11]. Vamos considerar que os átomos emitidos por uma fonte sejam formados por um elétron (de coordenadas \mathbf{r}_1 , massa m_1 e carga $e_1 = -e$) interagindo com um núcleo estável (de coordenadas \mathbf{r}_2 , massa $m_2 \gg m_1$ e carga $e_2 = +e$).

Deixando de lado os termos relativísticos e o acoplamento spin-órbita temos que o hamiltoniano para o átomo no interior dos magnetos de Stern-Gerlach será dado por :

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{1}{2m_i} \left[\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right]^2 - \left(\frac{e_i \hbar}{2m_i c} \right) \mathbf{B}(\mathbf{r}_i) \cdot \sigma_i \right) + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (1.58)$$

Colocando \mathbf{p}_1 e \mathbf{p}_2 em termos de \mathbf{P} e \mathbf{p} sendo $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}}$ e $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$, e sendo $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ a coordenada relativa e $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ a coordenada do centro de massa, teremos :

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \sum_{i=1}^2 \left[\frac{e_i}{m_i c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{p}_i + \left(\frac{e_i \hbar}{2m_i c} \right) \mathbf{B}(\mathbf{r}_i) \cdot \sigma_i \right] + V(r) \quad (1.59)$$

Tendo em conta que o campo magnético aponta ao longo da direção Z na vizinhança do plano de simetria, YZ , e que o valor de gradiente, $\partial B/\partial z$, pode ser considerado como uma constante, pode se considerar que :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2}B(\mathbf{r}_i)\mathbf{k} \times \mathbf{r}_i$$

$$B(\mathbf{r}_i) \approx B(\mathbf{R}) + \left(\frac{dB}{dz_i}\right)_{z_i=Z}(z_i - Z) \approx B(\mathbf{R})$$

Logo temos que o termo entre parênteses na expressão (1.59) pode ser re-escrito como :

$$-\frac{eB(\mathbf{R})}{2c}\mathbf{k} \cdot \left[\frac{\mathbf{R} \times \mathbf{p}}{m} + \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{P}}{M} + \frac{m_2 - m_1}{m_1 m_2}(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) - \left(\frac{\hbar}{m_1}\right)\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{m_2}\right)\sigma_2 \right] \quad (1.60)$$

Então, o hamiltoniano para o átomo que interage com o campo na região entre os magnetos será aproximadamente dado por :

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu_B B(\mathbf{R})(l_z + \sigma_z) + V(r) \quad (1.61)$$

onde $l_z = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z$.

A solução geral da equação de evolução na região entre os magnetos pode ser escrita como:

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \sum_{n,l,m_l,\sigma} \theta_{n,l,m_l,\sigma}(\mathbf{R}, t) F_{n,l,m_l}(\mathbf{r}) f_\sigma \quad (1.62)$$

onde $F_{n,l,m_l}(r, \theta, \psi) = R_{n,l}(r)Y_{m,l}^l(\theta, \psi)$ são autofunções ortonormais do hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_1 = \mathbf{p}^2/2m + V(r)$ e $f_\sigma(\sigma = \pm 1)$ os espinores de Pauli.

$F_{n,l,m_l} f_\sigma$ são também autofunções do operador $\mu_B B(\mathbf{R})(l_z + \sigma_z)$ ao qual corresponde o autovalor $\mu_o B(\mathbf{R})(m_l + \sigma)$ e sendo que $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t)$ satisfaz a equação :

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) \quad (1.63)$$

obtém-se que $\theta_{n,l,m_l,\sigma}$ fica governada pela equação :

$$\left[\frac{\mathbf{P}}{2m} + E_{n,l} + \mu_B B(\mathbf{R})(m_l + \sigma) \right] \theta_{n,l,m_l,\sigma} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \theta_{n,l,m_l,\sigma} \quad (1.64)$$

onde $E_{n,l}$ são autovalores de $\hat{\mathcal{H}}_1$. Daquí se obtém :

$$\theta_{n,l,m_l,\sigma}(\mathbf{R}, t) = b_{n,l,m_l,\sigma} e^{-(i/\hbar)E_{n,l}t} \phi_{m_l+\sigma}(\mathbf{R}, t) \quad (1.65)$$

com :

$$\left[\hat{\mathcal{H}}_1 + \mu_B B(\mathbf{R})(m_l + \sigma) \right] \phi_{m_l+\sigma}(\mathbf{R}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_{m_l+\sigma}(\mathbf{R}, t) \quad (1.66)$$

logo, no lugar de (1.62) escrevemos :

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \sum_{n,l,m_l,\sigma} (b_{n,l,m_l,\sigma}) e^{-(itE_{n,l}/\hbar)} \phi_{m_l+\sigma}(\mathbf{R}, t) F_{n,l,m_l}(\mathbf{r}) f_\sigma \quad (1.67)$$

Agora, para simplificar a notação da expressão vamos escrever :

$$g_{m_l,\sigma}(\mathbf{r}, t) = \sum_{n,l} (b_{n,l,m_l,\sigma}) e^{-(itE_{n,l}/\hbar)} F_{n,l,m_l}(\mathbf{r}) \quad (1.68)$$

com isto re-escrevemos $\psi(\mathbf{R})$:

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \sum_{m_l,\sigma} \phi_{m_l+\sigma}(\mathbf{R}, t) g_{m_l,\sigma}(\mathbf{r}, t) f_\sigma \quad (1.69)$$

Definindo $\lambda = m_l + \sigma$, $\sigma = \pm 1$

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) &= \sum_{k=-l-1}^{l+1} \phi_k(\mathbf{R}, t) [g_{k-1,1}(\mathbf{r}, t) f_1 + g_{k+1,-1}(\mathbf{r}, t) f_{-1}] \\
&= \sum_{k=-l-1}^{l+1} \phi_k(\mathbf{R}, t) G_k(\mathbf{r}, t)
\end{aligned} \tag{1.70}$$

Pode-se mostrar que $G_k(\mathbf{r}, t)$ satisfaz a equação de autovalores do operador $-\mu_o(l_z + \sigma_z)$, o operador da componente do momento magnético atômico ao longo de OZ . Os autovalores correspondentes são $-\mu_o k$ ($k = -n, -n + 1, \dots, n$).

Na referência [12] inclui-se a interação spin-órbita no hamiltoniano.

1.4.4 Solução via análise de Fourier

Aqui seguimos a referência [13]. Supõem-se as seguintes hipóteses simplificadoras :

1. O termo de energia cinética no operador Hamiltoniano pode ser desprezado durante todo o tempo de interação.
2. Somente vamos levar em conta o campo magnético na direção Z e vamos considerar que \mathbf{B} pode ser expandido em série de Taylor em torno de $Z = 0$, onde termos de ordem z^2 e superiores podem ser desconsiderados. Ou seja :

$$B_y = B_z = 0, \quad B_x = B_o + z\alpha$$

onde B_o é a componente homogênea do campo e α é o gradiente do campo.

3. Será descrito explicitamente só o movimento na direção Z .

Antes de passar através da fenda, e antes de ingressar no campo, a função de onda inicial representa um estado onde a posição e o spin são independentes. Expandindo em termos de um conjunto completo de autofunções de spin do operador de spin na direção z , obtemos

:

$$\psi_0(z) = \psi(z, 0) = f(z)(c_+u_+ + c_-u_-) \quad (1.71)$$

onde $f(z)$ é um pacote real e normalizado, e c_+ e c_- são coeficientes constantes complexos que definem a direção da polarização do feixe e as probabilidades ($|c_+|^2, |c_-|^2$). Estes coeficientes satisfazem a $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$, o que fornece :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^+ \psi_0 dz = 1 \quad (1.72)$$

A velocidade inicial ao longo da direção z é $v_0 = 0$. Para encontrarmos o efeito do campo temos que resolver :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mu(B_0 + \alpha z)\sigma_z \psi \quad (1.73)$$

Escrevendo $\psi = \psi_+u_+ + \psi_-u_-$, temos que (1.73) é equivalente às duas equações :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_+}{\partial t} = \mu(B_0 + \alpha z)\psi_+ \quad (1.74)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_-}{\partial t} = -\mu(B_0 + \alpha z)\psi_- \quad (1.75)$$

É claro que cada uma das componentes do espinor evolui independentemente. A solução é :

$$\psi_{\pm} = f(z)c_{\pm}e^{\mp i\mu(B_0 + \alpha z)T/\hbar} \quad (1.76)$$

onde foi usada a condição inicial (1.71) sendo T o tempo de interação. A solução na saída do magneto é

$$\Psi(z, T) = f(z) [c_+ e^{-i(\eta+z\Delta)} u_+ + c_- e^{i(\eta+z\Delta)} u_-] \quad (1.77)$$

onde $\eta = (\mu B_o T / \hbar)$ e $\Delta = (\mu \alpha T / \hbar)$.

A evolução para cada componente do espinor será dada pela equação de Pauli livre :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \quad (1.78)$$

Para resolver a equação (1.78) sujeita à condição (1.77) é conveniente fazer um análise de Fourier do pacote inicial :

$$f(z) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikz} dz \quad (1.79)$$

onde $g(k)$ é um pacote real normalizado no espaço de momentos, centrado ao redor de $k = 0$. Agora a solução de (1.79) será :

$$\Psi(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} [\Psi_{+k}(z) e^{-iE_k^{(+)}t/\hbar} u_+ + \Psi_{-k}(z) e^{-iE_k^{(-)}t/\hbar} u_-] dk \quad (1.80)$$

onde as $\Psi_{\pm k}(z)$ formam um conjunto completo de autofunções de energia para cada componente do espinor

$$\frac{d^2 \Psi_{\pm k}}{dz^2} + \frac{2mE_k^{(\pm)}}{\hbar^2} \Psi_{\pm k} = 0 \quad (1.81)$$

Mas, de (1.80), (1.77) e (1.79)

$$\begin{aligned}\Psi(z, 0) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikz} dk (c_+ e^{-i(\eta+z\Delta)} u_+ + c_- e^{i(\eta+z\Delta)} u_-) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} [\Psi_{+k}(z) u_+ + \Psi_{-k}(z) u_-] dk\end{aligned}\quad (1.82)$$

o que implica em

$$\Psi_{\pm k}(z) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} g(k) e^{ikz} c_{\pm} e^{\mp i(\eta+z\Delta)}$$

substituindo esta expressão em (1.79) se tem

$$E_k^{(\pm)} = \frac{\hbar^2(k \mp \Delta)^2}{2m}\quad (1.83)$$

Portanto, achamos que ao tempo t depois que a partícula deixa o magneto, a k -ésima componente de Fourier do pacote inicial ganha um fator $\exp(-i\hbar[k \mp \Delta]^2 t/2m)$ e a solução geral dependente do tempo será

$$\begin{aligned}\Psi(z, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) [c_+ e^{i[-\eta+(k-\Delta)z-(\hbar^2/2m)(k-\Delta)^2 t]} u_+ + \\ &+ c_- e^{i[\eta+(k+\Delta)z-(\hbar^2/2m)(k+\Delta)^2 t]} u_-] dk\end{aligned}\quad (1.84)$$

de onde fica claro que a função de onda desdobra-se em dois pacotes associados com as funções de base de spin "up" e spin "down", as quais afastam-se na direção Z .

1.5 O Efeito Stern-Gerlach na pesquisa atual

Existem muitos trabalhos recentes que lidam com o efeito Stern-Gerlach. Em um dos mais recentes, especula-se a idéia de separarem-se partículas carregadas por spin em um

aparelho de Stern-Gerlach. Os trabalhos de Batelaan [14] e Martens [15] abordam este assunto. Trata-se de um problema fundamental, pois, em princípio, num dispositivo de Stern-Gerlach usual, a força de Lorentz que atua sobre o feixe anulava completamente a possibilidade de separação do feixe inicial por spin. Brillouin sugeriu a idéia de usar gradientes de campos magnéticos atuantes ao longo da direção de movimento do feixe, mas Bohr e Pauli sugeriram “a impossibilidade de observar o spin do elétron afastado de seu momento orbital, por meio de experimentos baseados no conceito de trajetória de partículas clássicas”. Ainda hoje é amplamente aceito que seja impossível construir um dispositivo que polarize um feixe de elétrons usando campos eletromagnéticos macroscópicos. O trabalho (numérico) de Batelaan mostra uma separação entre partículas carregadas (elétrons) que se acham em estados de spin opostos após atravessar uma região onde atua o campo gerado por um par de fios condutores paralelos. Ainda que a separação alcançada seja praticamente indetectável, o resultado é muito importante.

Recentemente, um grande número de trabalhos têm sido publicados a este respeito. Além de Batelaan [14], Hannout *et al.* [16] reportam seu estudo teórico relacionado à teoria das medições em mecânica quântica fazendo uso do efeito Stern-Gerlach.

Métodos interferométricos (de polarização) Stern-Gerlach têm se mostrado ferramentas muito úteis para pesquisar distribuições de momento, coerência e propriedades quânticas de feixes de partículas com spin não nulo, tais como nêutrons e átomos [17]. Em alguns outros trabalhos [18] o papel do gradiente de campo não é discutido explicitamente.

Também podemos mencionar os recentes estudos teóricos do efeito Stern-Gerlach na formulação quântica do espaço de fases [1, 19] por meio dos quais procuram-se por novos aspectos deste efeito.

Capítulo 2

Soluções Exatas sobre o plano $Y = 0$

2.1 O caso de Spin 1/2

Nós consideramos um feixe de átomos eletricamente neutros, os que suporemos, só com propósitos de simplificação, como partículas sem estrutura interna, de spin $S = 1/2$ e massa m . Tais partículas ingressam num aparelho Stern-Gerlach ao longo do eixo x .

Em nosso trabalho vamos aproximar o campo magnético no aparelho por :

$$\mathbf{B}(y, z) = -\alpha y\mathbf{j} + (B_0 + \alpha z)\mathbf{k} \quad (2.1)$$

onde B_0 representa a componente homogênea do campo, e α (positivo) o gradiente de campo ao longo da direção z , o qual vamos supor de valor constante. Este campo satisfaz à equação $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, e também pode ser derivado de um potencial vetor $\mathbf{A} = -y(\alpha z + B_0/2)\mathbf{i} + (B_0 x/2)\mathbf{j}$.

A partir da expressão dada na Eq.(2.1), podemos escrever o hamiltoniano de tal átomo dentro do campo como :

$$\hat{\mathcal{H}} = I \frac{\hat{p}^2}{2m} + \mu_B \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}(y, z) \quad (2.2)$$

e portanto a equação matricial de Schrödinger-Pauli será :

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = -I\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + \mu_B(-\alpha y\sigma_2 + (B_0 + \alpha z)\sigma_3)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (2.3)$$

onde I é a matriz identidade 2×2 e σ_1, σ_2 e σ_3 as matrizes de Pauli. Ψ é um espinor de duas componentes, ψ_+ e ψ_- , sendo cada uma delas dependente das variáveis y, z, t :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

A seguir usaremos as componentes do espinor, Ψ_+ e Ψ_- , definidas por :

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Antes de prosseguir, é instrutivo que consideremos um cálculo simples do valor esperado da posição de uma partícula sobre o eixo z no instante de tempo t usando (2.2). Este será dado por :

$$\langle \hat{Z} \rangle_{1,2}(t) = \int \Psi_{1,2}^\dagger(t) \hat{Z} \Psi_{1,2}(t) d^3r \quad (2.6)$$

Já que o hamiltoniano na eq. (6.1) é independente de t , formalmente pode-se escrever :

$$\Psi_{1,2}(t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} \Psi_{1,2}(0) \quad (2.7)$$

ao substituirmos esta função na Eq.(2.6) temos :

$$\langle \hat{Z} \rangle_{1,2}(t) = \int \Psi_{1,2}^\dagger(0) \{ e^{(i/\hbar)\hat{\mathcal{H}}t} \hat{Z} e^{-(i/\hbar)\hat{\mathcal{H}}t} \} \Psi_{1,2}(0) dx dy dz \quad (2.8)$$

Usando para a expressão entre chaves a identidade de Baker-Hausdorff [20] :

$$e^{\hat{O}} \hat{A} e^{-\hat{O}} = \hat{A} + [\hat{O}, \hat{A}] + \frac{1}{2!} [\hat{O}, [\hat{O}, \hat{A}]] + \frac{1}{3!} [\hat{O}, [\hat{O}, [\hat{O}, \hat{A}]]] + \dots \quad (2.9)$$

com :

$$\hat{A} = \hat{Z} \quad \text{and} \quad \hat{O} = \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{\hat{P}_y^2}{2m} - 2\mu_B \alpha \hat{Y} \hat{S}_y + \frac{\hat{P}_z^2}{2m} + 2\mu_B B_0 \hat{S}_z + 2\mu_B \alpha \hat{Z} \hat{S}_z \right) t$$

obtemos como resultado no integrando da expressão (2.8) uma série de operadores os quais não podem ser simplificados para o hamiltoniano considerado. Concretamente temos aqui:

$$[\hat{O}, \hat{A}] = \frac{\hat{P}_z^2}{m} t$$

$$[\hat{O}, [\hat{O}, \hat{A}]] = -\frac{2\mu_B \alpha t^2}{m} \hat{S}_z$$

$$[\hat{O}, [\hat{O}, [\hat{O}, \hat{A}]]] = -\frac{(2\mu_B \alpha)^2 t^3}{m \hbar} \hat{Y} \hat{S}_x$$

$$[\hat{O}, [\hat{O}, [\hat{O}, [\hat{O}, \hat{A}]]]] = \frac{(2\mu_B \alpha)^3 t^4}{m \hbar^2} \hat{Y}^2 \hat{S}_z + \frac{(2\mu_B)^3 \alpha^2 B_0 t^4}{m \hbar^2} \hat{Y} \hat{S}_z +$$

$$+ \frac{(2\mu_B \alpha)^3 t^4}{m \hbar^2} \hat{Z} \hat{Y} \hat{S}_y - \frac{(2\mu_B \alpha)^2 t^4}{m^2 \hbar} \hat{P}_y \hat{S}_x, \text{ etc.}$$

Mas considerando na Eq.(2.7) no lugar do hamiltoniano geral \hat{H} o "reduzido", \hat{H}_r , o qual atua sobre as funções de onda definidas sobre o plano $Y = 0$:

$$\hat{H}_r = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{\hat{P}_z^2}{2m} + 2\mu_B B_0 \hat{S}_z + 2\mu_B \alpha \hat{Z} \hat{S}_z$$

o problema é grandemente simplificado, pois todos os comutadores de ordem maior do que 2 se anulam. Vamos designar estas funções como :

$$\Phi_1(x, z, t) \equiv \Psi_1(x, 0, z, t) \text{ and } \Phi_2(x, z, t) \equiv \Psi_2(x, 0, z, t)$$

Logo sobre o plano $Y = 0$ temos :

$$\begin{aligned} \langle \hat{Z} \rangle_{1,2}(t) &= \int \Phi_{1,2}^\dagger(0) e^{(i/\hbar)[(\hat{\mathcal{P}}_z^2/2m) + (\hat{\mathcal{P}}_z^2/2m) + 2\mu_B B_0 \hat{S}_z + 2\mu_B \alpha \hat{Z} \hat{S}_z]} \times \\ &\times \hat{Z} e^{(-i/\hbar)[(\hat{\mathcal{P}}_z^2/2m) + (\hat{\mathcal{P}}_z^2/2m) + 2\mu_B B_0 \hat{S}_z + 2\mu_B \alpha \hat{Z} \hat{S}_z]} \Phi_{1,2}(0) dx dz \end{aligned} \quad (2.10)$$

Considerando que :

$$[e^{-(i/\hbar)(2\mu_B \alpha \hat{Z} \hat{S}_z)}, \hat{Z}] = \hat{0} \quad e \quad [e^{(i/\hbar)[(\hat{\mathcal{P}}_z^2/2m)}], \hat{Z}] = \hat{0} \quad (2.11)$$

a expressão acima se reduz a :

$$\langle \hat{Z} \rangle_{1,2}(t) = \int \Phi_{1,2}^\dagger(0) e^{(i/\hbar)[2\mu_B \alpha \hat{Z} \hat{S}_z + (\hat{\mathcal{P}}_z^2/2m)]} \hat{Z} e^{-(i/\hbar)[2\mu_B \alpha \hat{Z} \hat{S}_z + (\hat{\mathcal{P}}_z^2/2m)]} \Phi_{1,2}(0) dx dz \quad (2.12)$$

Aplicando aqui a identidade de Baker-Hausdorf obtemos :

$$\langle \hat{Z} \rangle_{1,2}(t) = \int \Phi_{1,2}^\dagger(0) \left\{ \hat{Z} + \frac{\hat{p}_z}{m} - \frac{\mu_B \alpha}{m} \hat{S}_z t^2 \right\} \Phi_{1,2}(0) dx dz \quad (2.13)$$

onde :

$$\int \Phi_{1,2}^\dagger(0) \hat{S}_z \Phi_{1,2}(0) dx dz = \left(\int \Phi_{1,2}^\dagger(0) \Phi_{1,2}(0) dx dz \right) \langle 1, 2 | \hat{S}_z | 1, 2 \rangle \quad (2.14)$$

Finalmente obtemos :

$$\langle \hat{Z} \rangle_{1,2}(t) = \langle \hat{Z} \rangle_{1,2}(0) + \langle \hat{v}_z \rangle_{1,2}(0)t - \frac{\mu_B \alpha t^2}{m} \langle \hat{S}_z \rangle_{1,2}(0) \quad (2.15)$$

Este resultado mostra que o valor médio de \hat{Z} comporta-se classicamente, o que está de acordo com o teorema de Ehrenfest [20].

Assim, se o feixe foi previamente polarizado ao longo do eixo z , ao ingressar ao aparelho de Stern-Gerlach ficará sujeito a uma força igual a $+\alpha\mu_B$ para partículas de “spin-down” ($\langle \hat{S}_z \rangle(0) = -1/2$), e $-\alpha\mu_B$ para partículas de “spin-up” ($\langle \hat{S}_z \rangle(0) = +1/2$). Conseqüentemente, o feixe é desdobrado pelo gradiente do campo, e as partículas são afastadas pelo sentido de seu spin sobre o eixo z . Na próxima seção a eq.(2.3) será solucionada sobre o plano $Y = 0$, e as funções de onda exatas serão obtidas. Na seção 2.3 as funções de onda estacionárias serão determinadas com suas correspondentes autoenergias.

2.2 Construção das soluções

A evolução temporal das funções de onda que atravessam o aparelho de Stern-Gerlach pode ser obtida analiticamente sobre o plano de simetria $Y = 0$, onde as duas equações em (2.3) ficam desacopladas :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial z^2} \right) + \mu_B(B_0 + \alpha z)\phi_1 = i\hbar \frac{\partial \phi_1}{\partial t} \quad (2.16)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_2}{\partial z^2} \right) - \mu_B(B_0 + \alpha z)\phi_2 = i\hbar \frac{\partial \phi_2}{\partial t} \quad (2.17)$$

Com base nos resultados da seção precedente, pode-se esperar que as soluções das equações acima contenham funções dependentes das variáveis z e t , que representem a separação do feixe ao longo do eixo z .

Por outro lado, Berry [21] mostrou que as soluções da equação de Schrödinger para uma partícula livre, de massa m , podem ser escritas como produtos de funções de Airy, do tipo Ai , por funções exponenciais complexas. Extensões deste trabalho apresentam-se em [22, 23, 24]. Tais soluções possuem módulos quadrados que evoluem sem deformação, de maneira acelerada. Ou seja, a equação :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2.18)$$

tem por solução :

$$\phi(x, t) = Ai \left[\frac{B}{\hbar^{2/3}} \left(x - \frac{B^3 t^2}{4m^2} \right) \right] e^{(iB^3 t / 2m\hbar) [x - (B^3 t^2 / 6m^2)]} \quad (2.19)$$

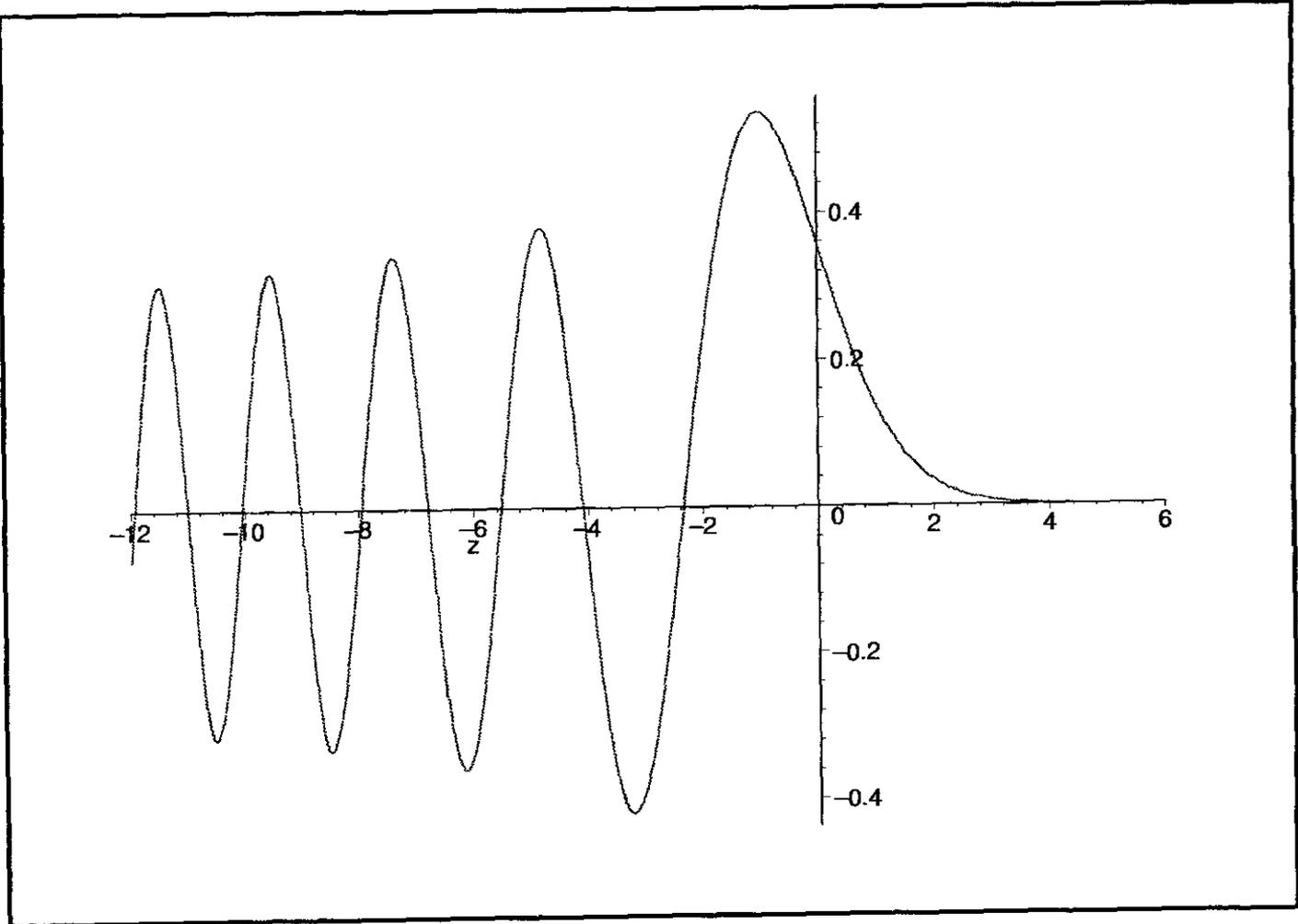
onde B é uma constante arbitrária (tomada como positiva). O comportamento destas soluções lembra aqueles dos feixes que se afastam, ao longo da direção do gradiente, no experimento Stern-Gerlach.

Aqui é conveniente lembrar a equação de Airy :

$$\frac{d^2 Ai}{dz^2}(z) - z Ai(z) = 0 \quad (2.20)$$

cuja solução (denotada como Ai) é mostrada na Figura 3.

Fig 3. Gráfico da função de Airy do tipo Ai.



O fato de que as equações (2.16) e (2.17) contêm a coordenada z sugere que o mesmo tipo de funções de Airy possa representar as soluções do problema que estamos tratando. Portanto, proporemos como possíveis soluções de (2.16) e (2.17) as seguintes funções multiparamétricas ϕ_1 e ϕ_2 :

$$\phi_1(x, z, t) = F[a(z + bt^2)]e^{ictz}e^{(i/\hbar)(p_x x - \hbar\omega_+ t)} \quad (2.21)$$

$$\phi_2(x, z, t) = G[a'(-z + b't^2)]e^{-ic'tz}e^{(i/\hbar)(p_x x - \hbar\omega_- t)} \quad (2.22)$$

sendo F e G funções a serem determinadas. a, a', b, b', c, c', w_+ e w_- são parâmetros cujos valores devem ser adequadamente escolhidos, e p_x é autovalor de \hat{P}_x , o qual a sua vez é conservado. Fazendo a substituição de (2.21) e (2.22) em (2.16) e (2.17), respectivamente, achamos que as funções F e G somente satisfazem a equação de Airy quando os parâmetros possuem os seguintes valores :

$$a = \left[\frac{2m(\mu_B \alpha - 2mb)}{\hbar^2} \right]^{1/3}, \quad a' = \left[\frac{2m(\mu_B \alpha - 2mb')}{\hbar^2} \right]^{1/3} \quad (2.23)$$

$$\hbar\omega_+ = \frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_0, \quad \hbar\omega_- = \frac{p_x^2}{2m} - \mu_B B_0 \quad (2.24)$$

$$c = -\frac{2mb}{\hbar}, \quad c' = -\frac{2mb'}{\hbar} \quad (2.25)$$

$$b = b' = \frac{\mu_B \alpha}{4m} \quad (2.26)$$

Fica claro que, com este conjunto de parâmetros, a e a' são positivos e, lembrando que

consideramos α como positivo, b e b' também serão positivos, uma condição necessária para que $|\phi_1(z, t)|^2$ e $|\phi_2(z, t)|^2$ representem densidades de probabilidades que se afastam com o tempo. Explicitamente, as soluções não normalizadas de (2.16) e (2.17) são :

$$\begin{aligned} \phi_1(x, z, t) = Ai \left[\left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(z + \left(\frac{\mu_B \alpha}{4m} \right) t^2 \right) \right] e^{i(-\alpha \mu_B / 2\hbar) z t} \times \\ \times e^{(i/\hbar)[p_x x - ((p_x^2/2m) + \mu_B B_0)t]} \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \phi_2(x, z, t) = Ai \left[\left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(-z + \left(\frac{\mu_B \alpha}{4m} \right) t^2 \right) \right] e^{i(\alpha \mu_B / 2\hbar) z t} \times \\ \times e^{(i/\hbar)[p_x x - ((p_x^2/2m) - \mu_B B_0)t]} \end{aligned} \quad (2.28)$$

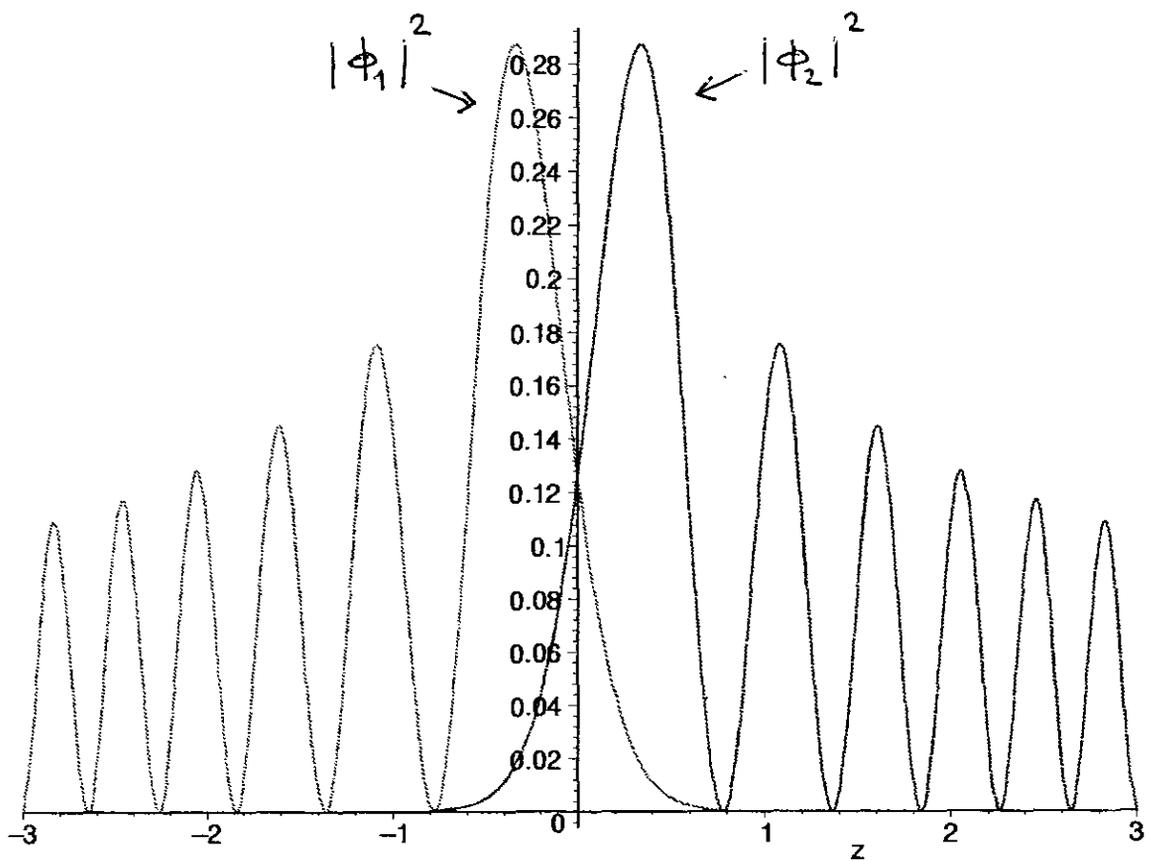
A evolução temporal da densidade de probabilidades é proporcional ao módulo quadrado de ϕ_1 e ϕ_2 :

$$|\phi_1(z, t)|^2 = \left(Ai \left[\left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(z + \left(\frac{\mu_B \alpha}{4m} \right) t^2 \right) \right] \right)^2 \quad (2.29)$$

$$|\phi_2(z, t)|^2 = \left(Ai \left[\left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(-z + \left(\frac{\mu_B \alpha}{4m} \right) t^2 \right) \right] \right)^2 \quad (2.30)$$

Estas funções são mostradas na Figura 4.

Fig 4. Gráficos de $|\phi_1(z,t)|^2$ e $|\phi_2(z,t)|^2$.



Entretanto, estas funções, soluções matemáticas das equações (2.16) e (2.17), não representam ainda soluções fisicamente corretas para nossa partícula, pois a função de Airy não é de quadrado integrável, e portanto não pode representar uma densidade de probabilidades de uma partícula.

Contudo, pode-se construir soluções de quadrado integrável a partir das funções de Airy. Uma de tais funções é a dada por [25] :

$$\phi_1(x, z, t) = \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dz' e^{-(z-z')^2/2\sigma^2} F[a(z' + bt^2)] e^{ictz'} e^{(i/\hbar)(p_z x - \hbar\omega + t)} \quad (2.31)$$

Mas, ao substituirmos esta função na sua equação respectiva, não é possível achar valores para os parâmetros ali embutidos que permitam que a função F seja do tipo Ai .

Para contornar esta situação vamos tentar construir funções de quadrado integrável de outro jeito. Uma primeira coisa que vamos considerar é a seguinte propriedade da função de Airy [26]:

$$e^{-(i/3)q^3} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixq} dx Ai(x)$$

de onde, ao fazermos $q = 0$ temos :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx Ai(x) = 1$$

Mas como a função Ai oscila ao longo do eixo z fica claro que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx Ai^2(x) > 1 \quad (2.33)$$

Portanto, a função Ai diretamente não é apropriada.

Para conseguir tirar estas oscilações, simplesmente multiplicaremos as soluções (2.27) e (2.28) pela função de Heaviside, Θ , a qual “trunca” as oscilações no primeiro zero, η_0 (esta

escolha vai ser justificada no capítulo de discussões), de Ai . Segundo, introduziremos um deslocamento $\xi_o = -1.0188$ (primeiro máximo de Ai , [27]) para conseguir que as duas funções coincidam no instante $t = 0$, pois inicialmente as duas distribuições deslocam-se espacialmente juntas e somente após a entrada no aparelho de Stern-Gerlach elas se separam.

Com isto temos as seguintes funções dependentes do tempo :

$$\begin{aligned} \phi_1(x, z, t) = Ai [a(z + (\xi_o/a) + bt^2)] \times \Theta [z - (\eta_o/a) + (\xi_o/a) + bt^2] \times \\ \times e^{i(czt)} e^{(i/\hbar)[p_z x - \hbar w + t]} \end{aligned} \quad (2.34)$$

e também :

$$\begin{aligned} \phi_2(x, z, t) = Ai [a'(-z + (\xi_o/a) + b't^2)] \times \Theta [-z - (\eta_o/a) + (\xi_o/a) + bt^2] \times \\ \times e^{-i(c'zt)} e^{(i/\hbar)[p_z x - \hbar w - t]} \end{aligned} \quad (2.35)$$

É importante enfatizar que ao substituirmos as funções (2.34) e (2.35) nas equações (2.16) e (2.17), aparecem termos que contém a função delta de Dirac e sua derivada. Para que as equações continuem sendo satisfeitas, fazemos uso dos resultados :

$$\delta(p - p_0) = 0 \quad e \quad \delta'(p - p_0) = 0, \quad \text{para } p \neq p_0$$

onde o último provém da propriedade [31]:

$$(p - p_0)\delta'(p - p_0) = -\delta(p - p_0)$$

Com isto, conseguimos anular aqueles termos. Para isto é suficiente tirar dos domínios de ϕ_1 e ϕ_2 os pontos (análogos ao p_0) de maneira que (2.34) e (2.35) virem soluções. Logo,

as funções (2.34) e (2.35) são também soluções do *mesmo* conjunto de equações (2.16) e (2.17), com o *mesmo* conjunto de parâmetros (2.23), (2.25) e (2.26). No entanto, $\hbar\omega_+$ e $\hbar\omega_-$, são agora dados agora por :

$$\hbar\omega_+ = \frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_0 - \frac{\xi_o}{2} \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{m} \right)^{1/3} \quad (2.36)$$

$$\hbar\omega_- = \frac{p_x^2}{2m} - \mu_B B_0 - \frac{\xi_o}{2} \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{m} \right)^{1/3} \quad (2.37)$$

Os domínios de ϕ_1 e ϕ_2 são, respectivamente, $\Re^3 - \{(x, z, t)/z = (\eta_o/a) - (\xi_o/a) - bt^2\}$ e $\Re^3 - \{(x, z, t)/z = -(\eta_o/a) + (\xi_o/a) + bt^2\}$ sendo \Re o conjunto dos números reais.

As densidades de probabilidade de spin-up e spin-down serão portanto dadas por :

$$\begin{aligned} |\phi_1(z, t)|^2 &= \{Ai \left[\left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3} z + \xi_o + \frac{1}{4} \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2}{m \hbar} \right)^{2/3} t^2 \right] \times \\ &\Theta \left[z - \eta_o \left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{-1/3} + \xi_o \left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{-1/3} + \left(\frac{\mu_B \alpha}{4m} \right) t^2 \right] \}^2 \end{aligned} \quad (2.38)$$

e também :

$$\begin{aligned} |\phi_2(z, t)|^2 &= \{Ai \left[-\left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3} z + \xi_o + \frac{1}{4} \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2}{m \hbar} \right)^{2/3} t^2 \right] \times \\ &\Theta \left[-z - \eta_o \left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{-1/3} + \xi_o \left(\frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{-1/3} + \left(\frac{\mu_B \alpha}{4m} \right) t^2 \right] \}^2 \end{aligned} \quad (2.39)$$

Note que nossas soluções, ϕ_1 e ϕ_2 , **independem** do valor da componente homogênea do campo magnético B_o , mas somente do gradiente α . Este resultado concorda com o fato experimental e supera o que é normalmente considerado em trabalhos teóricos, que usam

$B_o \gg \alpha|z|$ como discutido no capítulo 1 e na referência [19].

A seguir vamos mostrar o comportamento destas funções para diferentes instantes de tempo. Mas, como estas incluem as constantes \hbar , μ_B , m que possuem valores muito pequenos é preciso fazer, de uma maneira conveniente, um re-escalamento das unidades. Logo, as funções serão expressas nestas novas unidades e representadas graficamente utilizando o programa de computação algébrica Maple.

Consideramos o valor médio do operador $X^2 + Z^2$:

$$\Delta^2 = \int \Psi^\dagger(x, z, t)(X^2 + Z^2)\Psi(x, z, t)dx dz$$

Tomaremos a Δ como nossa “nova” unidade de comprimento tal como é feito em [2]. As outras grandezas físicas têm as seguintes unidades:

x, z em unidades de “ Δ ”

t em unidades de “ $(m\Delta^2)/\hbar$ ”

α em unidades de “ $\hbar^2/(m\mu_B^2\Delta^2)$ ”

Aqui a massa, m , não vai ser re-escalada. Como consequência, temos que :

$\partial\Psi/\partial t$ em unidades de “ $\hbar/(m\Delta^2)$ ”

$\partial^2\Psi/\partial x^2$ em unidades de “ $1/\Delta^2$ ”

e vamos tomar a equação (2.3) escrevendo-a explicitamente :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mu_B \begin{pmatrix} B_o + \alpha z & i\alpha y \\ -i\alpha y & -(B_o + \alpha z) \end{pmatrix} \right] \Psi \quad (2.40)$$

Por outro lado, já vimos, em (2.38) e (2.39), que a componente homogênea do campo não faz parte das soluções. Logo, pode-se fazer $B_o = 0$ em (2.40) o que simplifica a expressão.

Com isto consegue-se :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mu_B \alpha \begin{pmatrix} z & iy \\ -iy & -z \end{pmatrix} \right] \Psi \quad (2.41)$$

Re-escalando obtemos :

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} z & iy \\ -iy & -z \end{pmatrix} \right] \Psi \quad (2.42)$$

o que é equivalente a fazer diretamente, na eq.(2.41), $\hbar = 1$, $\mu_B = 1$, $m = 1$ e α com valor arbitrário (como desejávamos!). Isto nos permite olhar diretamente o efeito dos distintos valores do gradiente, coisa que não pode-se fazer com nenhuma das soluções conhecidas. Em particular, e como se esperava, produz-se uma separação dos feixes só com um valor intenso do gradiente.

As Figuras 5a, 5b, 5c mostram $|\phi_1(z, t)|^2$ e $|\phi_2(z, t)|^2$ para diferentes instantes de tempo com o seguinte conjunto de parâmetros : $\hbar = 1$, $m = 1$, $\mu_B = 1$ and $\alpha = 800$. Como se pode ver, as densidades de probabilidades de “spin-up” separam-se conforme a partícula viaja dentro do campo. Por outro lado, para um gradiente pequeno, $\alpha = 10$, mantido os mesmos valores para os outros parâmetros e os mesmos instantes de tempo, não consegue-se o afastamento das funções de onda.

Fig 5a. $|\phi_1(z, t)|^2$ e $|\phi_2(z, t)|^2$ com $\hbar = 1, m = 1, \mu_B = 1, \alpha = 800$ e $t = 0.0001$

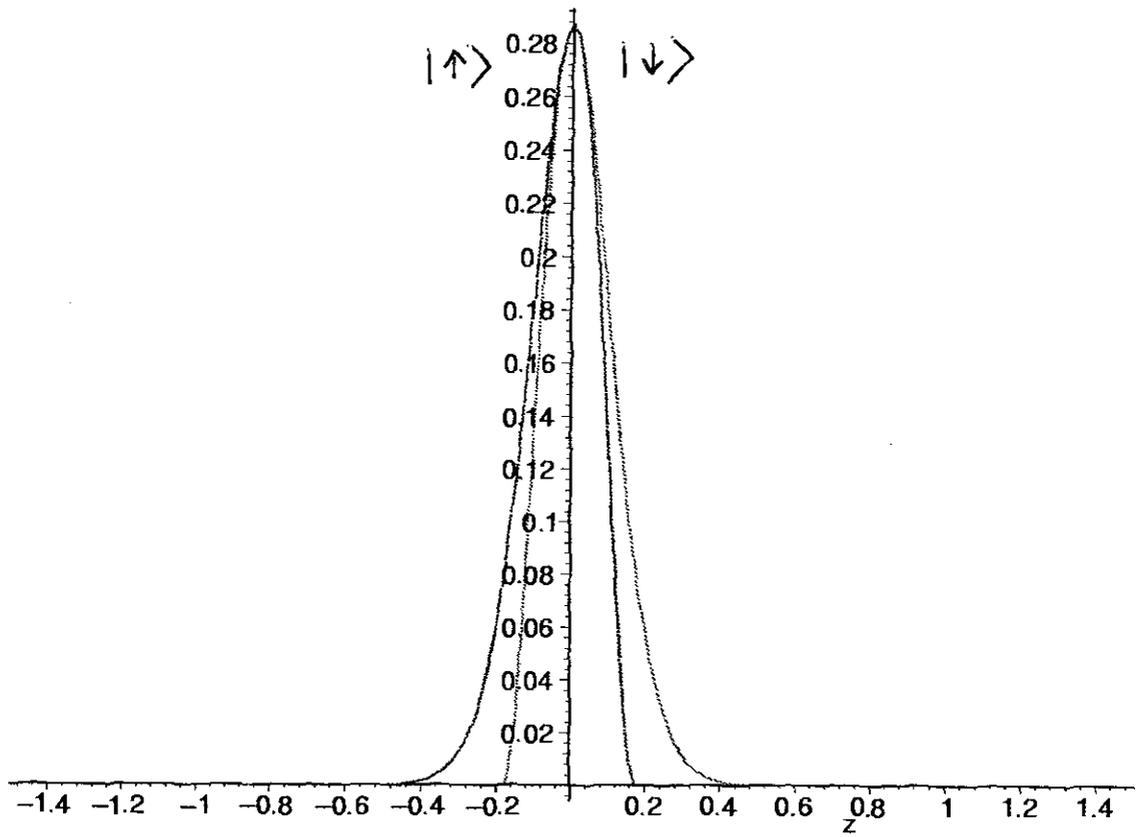


Fig 5b. $|\phi_1(z,t)|^2$ e $|\phi_2(z,t)|^2$ com $\hbar = 1, m = 1, \mu_B = 1, \alpha = 800$ e $t = 0.05$

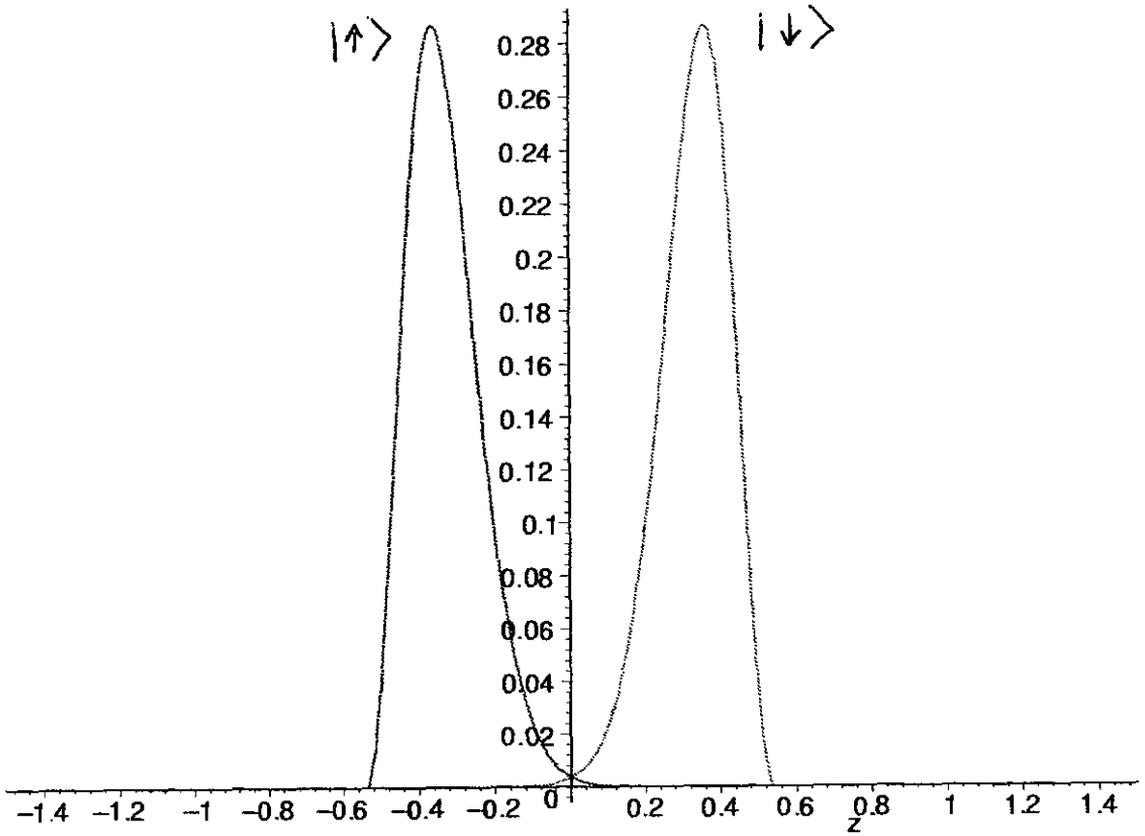
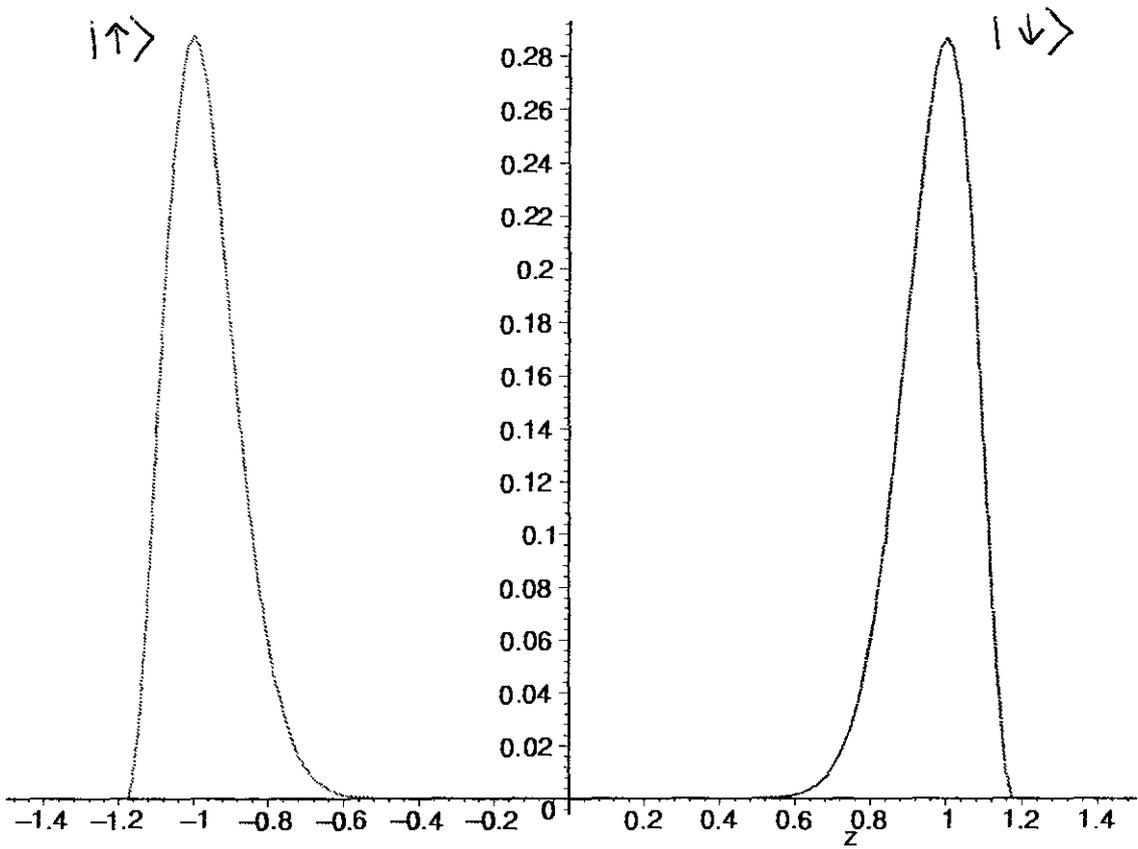


Fig 5c. $|\phi_1(z, t)|^2$ e $|\phi_2(z, t)|^2$ com $\hbar = 1$, $m = 1$, $\mu_B = 1$, $\alpha = 800$ e $t = 0.07$



2.3 Auto Energias

As energias do sistema são determinadas pelas soluções da equação estacionária:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi \quad (2.43)$$

onde $\hat{\mathcal{H}}$ é dado pela Eq.(2.2). Sobre o plano $Y = 0$ obtemos :

$$\left[\frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_z^2) + \mu_B(B_0 + \alpha z) \right] \phi_1 = E_1\phi_1 \quad (2.44)$$

$$\left[\frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_z^2) - \mu_B(B_0 + \alpha z) \right] \phi_2 = E_2\phi_2 \quad (2.45)$$

Ao substituírmos soluções do tipo :

$$\phi_1(x, z) = e^{(i/\hbar)p_x x} R(z) \quad (2.46)$$

obtemos a seguinte equação para a função R :

$$R'' - (\beta z - \gamma_1)R = 0 \quad (2.47)$$

onde :

$$\beta = \frac{2m\mu_B\alpha}{\hbar^2} \quad (2.48)$$

e também :

$$\gamma_1 = \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{p_x^2}{2m} - \mu_B B_0 \right] \quad (2.49)$$

Definindo uma nova variável η através de :

$$\eta = \beta^{1/3} z - \gamma_1 \beta^{-2/3} \quad (2.50)$$

achamos a nova equação :

$$\mathcal{R}''(\eta) - \eta\mathcal{R}(\eta) = 0 \quad (2.51)$$

a qual é a equação de Airy. Segundo a relação (2.47) esperaríamos que nossa solução tivesse como argumento para a Ai a expressão $(\beta^{1/3}z - \gamma_1\beta^{-2/3})$, mas isto não ocorre. O que de fato funciona é a expressão $(\beta^{1/3}z + \xi_o)$:

$$\phi_1(x, z) = Ai(\beta^{1/3}z + \xi_o)\Theta \left[z - \frac{\eta_o}{\beta^{1/3}} + \xi_o \right] e^{(i/\hbar)p_x x} \quad (2.52)$$

onde a função degrau, Θ , foi introduzida, tal como discutido na seção anterior. Vamos tomar esta função para procurar a sua autoenergia associada. Aqui temos as suas derivadas:

$$\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} = -\left(\frac{p_x^2}{\hbar^2}\right) Ai.e \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial z^2} = \beta^{2/3} Ai'' .e \quad (2.54)$$

onde “ Ai ” e “ e ” representam (de forma esquemática) a função de Airy e a exponencial complexa, respectivamente. Substituindo na eq.(2.41) temos:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial z^2} \right) + \mu_B(B_o + \alpha z)\phi_1 = \\ & \left(\frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_o \right) Ai.e - \left(\frac{\hbar^2 \beta^{2/3}}{2m} \right) Ai'' .e + (\mu_B \alpha z) Ai.e \end{aligned} \quad (2.55)$$

Agora vamos somar e subtrair a quantidade $\xi_o(\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2 / 2m)^{1/3}$ aos termos $Ai.e$:

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial z^2} \right) + \mu_B (B_o + \alpha z) \phi_1 &= \left(\frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \right) Ai.e + \\
&- \left(\frac{\hbar^2 \beta^{2/3}}{2m} \right) Ai''.e + (\mu_B \alpha z + \xi_o \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3}) Ai.e
\end{aligned} \tag{2.56}$$

que, após arrumação dos termos, se torna :

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial z^2} \right) + \mu_B (B_o + \alpha z) \phi_1 &= \left(\frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \right) Ai.e + \\
&- \left(\frac{\hbar^2 \beta^{2/3}}{2m} \right) \left[Ai'' - \left(\frac{2m \mu_B \alpha}{\hbar^2 \beta^{2/3}} z + \xi_o \left(\frac{2m}{\hbar^2 \beta^{2/3}} \right) \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \right) Ai \right].e
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Tendo em conta a expressão de β achamos que :

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial z^2} \right) + \mu_B (B_o + \alpha z) \phi_1 &= \left(\frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \right) \phi_1 + \\
&- \left(\frac{\hbar^2 \beta^{2/3}}{2m} \right) \left[Ai'' - (\beta^{1/3} z + \xi_o) Ai \right].e
\end{aligned} \tag{2.58}$$

Mas o segundo termo no 2º membro da eq.(2.58) é igual a zero, pois $Ai(\beta^{1/3} z + \xi_o)$ satisfaz a equação de Airy. Logo, temos que a autoenergia associada à função ϕ_1 é dada por :

$$E_1 = \frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \tag{2.59}$$

Similarmente, obtemos para ϕ_2 :

$$\phi_2(x, z) = Ai(-\beta^{1/3} z + \xi_o) \Theta \left[-z - \frac{\eta_o}{\beta^{1/3}} + \xi_o \right] e^{(i/\hbar) p_x x} \tag{2.60}$$

com autoenergia :

$$E_2 = \frac{p_x^2}{2m} - \mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \quad (2.61)$$

Pode-se ver que o efeito do gradiente do campo, no tocante às energias, é produzir um pequeno deslocamento sobre ambos os níveis magnéticos e, conseqüentemente, a diferença de energias $E_1 - E_2$ não depende do gradiente α (concretamente temos $\Delta E = 2\mu_B B_o$). Embora este seja um resultado “novo” (com respeito ao efeito Stern-Gerlach) não é uma novidade que o parâmetro que caracteriza a inomogeneidade do campo magnético (em nosso caso o gradiente α) contribua às autoenergias do sistema considerado. Na referência [28] as autoenergias do hamiltoniano de partículas neutras e com spin viajando em campos magnéticos helicoidais possuem um termo dependente da magnitude que caracteriza a inomogeneidade do campo.

Capítulo 3

Solução Exata com $B_o = 0$ no plano

$$Z = 0$$

3.1 Introdução

Um dos resultados do capítulo anterior foi o fato de que a componente homogênea do campo, B_o , não tem participação dentro dos quadrados dos modulos das funções de onda, $|\phi_1(z, t)|^2$ e $|\phi_2(z, t)|^2$, e que ela só intervem nas autoenergias. Vamos supor que este é um resultado geral, não só sobre o plano $Y = 0$. Por outro lado, lembrando que o campo foi expandido em série de Taylor ao redor de $z_o = 0$ (até o termo de primeiro ordem), e que nós estamos considerando que o gradiente, α , tem em geral um valor arbitrário, não se pode escolher $z = -(B_o/\alpha)$, o que forneceria uma simplificação nas eqs.(2.3). Mas, fazendo $B_o = 0$, como em [2], e $z = 0$, obtemos as seguintes equações acopladas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial y^2} \right) + i\mu_B \alpha y \psi_2 = i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} \quad (3.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} \right) - i\mu_B \alpha y \psi_1 = i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \quad (3.2)$$

que podem ser resolvidas exatamente como mostramos abaixo.

3.2 Desacoplando o sistema de equações

Para continuar, estas equações acopladas serão denotadas como se indica a seguir:

$$\Omega \psi_1 + \mathcal{A} \psi_2 = \mathbf{C} \psi_1 \quad (3.3)$$

$$\Omega \psi_2 - \mathcal{A} \psi_1 = \mathbf{C} \psi_2 \quad (3.4)$$

onde $\Omega = -(\hbar^2/2m)(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)$, $\mathcal{A} = i\mu_B \alpha y$ e $\mathbf{C} = i\hbar \partial/\partial t$. Multiplicando a eq.(3.4) por o número arbitrário λ e somando o resultado com a eq.(3.3) obtém-se:

$$\Omega(\psi_1 + \lambda \psi_2) + \mathcal{A}(\psi_2 - \lambda \psi_1) = \mathbf{C}(\psi_1 + \lambda \psi_2) \quad (3.5)$$

Agora, vamos supor que existem números m (em geral complexos) de forma que a relação seguinte seja satisfeita :

$$\psi_2 - \lambda \psi_1 = m(\psi_1 + \lambda \psi_2) \quad (3.6)$$

Isto é, estamos impondo que as funções ψ_1 e ψ_2 sejam proporcionais.

Se agora escrevemos : $\chi = \psi_1 + \lambda \psi_2$, obtemos uma equação (desacoplada) para χ :

$$\Omega \chi + m \mathcal{A} \chi = \mathbf{C} \chi \quad (3.7)$$

Escolhendo (convenientemente, como logo veremos) dois valores para λ , que chamaremos de λ_1 , e λ_2 , pode-se obter as duas funções ψ_1 e ψ_2 :

$$\chi_1 = \psi_1 + \lambda_1 \psi_2 \quad \rightarrow \quad \psi_1 = \frac{\lambda_2 \chi_1 - \lambda_1 \chi_2}{\lambda_2 - \lambda_1} \quad (3.8)$$

$$\chi_2 = \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \quad \rightarrow \quad \psi_2 = \frac{-\chi_1 + \chi_2}{\lambda_2 - \lambda_1} \quad (3.9)$$

Notar que as relações do lado direito não significam que ψ_1 e ψ_2 dependam dos valores de λ ; são as funções χ_1 e χ_2 as que dependem destes.

Agora vamos substituir as funções ψ_1 e ψ_2 , dadas em (3.8) e (3.9), na eq.(3.3):

$$a_1 \left[\Omega \chi_1 + \left(\frac{b_1}{a_1}\right) \mathcal{A} \chi_1 - \mathbf{C} \chi_1 \right] + a_2 \left[\Omega \chi_2 + \left(\frac{b_2}{a_2}\right) \mathcal{A} \chi_2 - \mathbf{C} \chi_2 \right] = 0 \quad (3.10)$$

sendo :

$$a_1 = \lambda_2 / (\lambda_2 - \lambda_1), \quad a_2 = -\lambda_1 / (\lambda_2 - \lambda_1) \quad (3.11)$$

$$b_1 = -1 / (\lambda_2 - \lambda_1), \quad b_2 = 1 / (\lambda_2 - \lambda_1) \quad (3.12)$$

e na eq.(3.4)

$$b_1 \left[\Omega \chi_1 - \left(\frac{a_1}{b_1}\right) \mathcal{A} \chi_1 - \mathbf{C} \chi_1 \right] + b_2 \left[\Omega \chi_2 - \left(\frac{a_2}{b_2}\right) \mathcal{A} \chi_2 - \mathbf{C} \chi_2 \right] = 0 \quad (3.13)$$

Mas, χ_1 e χ_2 devem satisfazer a eq.(3.7) com m tomando certos valores, m_1 e m_2 respectivamente. Logo, vamos exigir que :

$$m_1 = \frac{b_1}{a_1} = -\frac{a_1}{b_1}$$

de onde se obtém que : $\lambda_2^2 = -1$ e $m_1 = \lambda_2$; logo temos $m_1 = \pm i$. Vamos escolher : $m_1 = -i$.

Também,

$$m_2 = \frac{b_2}{a_2} = -\frac{a_2}{b_2}$$

de onde se obtém que : $\lambda_1^2 = -1$ e $m_2 = \lambda_1$. Vamos escolher : $m_2 = i$

Com esta escolha ficamos com as equações :

$$\Omega\chi_1 - i\mathcal{A}\chi_1 = C\chi_1 \quad (3.14)$$

$$\Omega\chi_2 + i\mathcal{A}\chi_2 = C\chi_2 \quad (3.15)$$

que são as mesmas equações (2.16) e (2.17), com $B_o = 0$ e a substituição $z \rightarrow y$. Isto quer dizer que temos uma solução χ_1 , que se movimenta à esquerda, e χ_2 , que se movimenta à direita. Logo, segundo as relações (3.8) e (3.9) temos que **as funções ψ_1 e ψ_2 , soluções das eqs.(3.3) e (3.4), possuem duas partes que se movimentam em direções contrárias;** ou dito em outras palavras, que pode-se achar partículas no estado de “spin up” na região onde se esperaria achar só partículas no estado de “spin down” e vice-versa, um resultado que não se consegue em nenhuma das soluções dadas no capítulo 1 nem em outras dadas na bibliografia [2, 12, 18, 20, 29].

As funções χ_1 e χ_2 são :

$$\begin{aligned} \chi_1(x, y, t) = & Ai [a(y + (\xi_o/a) + bt^2)] \times \Theta [y - (\eta_o/a) + (\xi_o/a) + bt^2] \times \\ & \times e^{i(czt)} e^{(i/\hbar)[p_z x - \hbar w + t]} \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \chi_2(x, y, t) = & Ai [a'(-y + (\xi_o/a) + b't^2)] \times \Theta [-y - (\eta_o/a) + (\xi_o/a) + bt^2] \times \\ & \times e^{-i(c'zt)} e^{(i/\hbar)[p_z x - \hbar w - t]} \end{aligned} \quad (3.17)$$

De (3.8), (3.16) e (3.17) temos que :

$$|\psi_1|^2 = \frac{1}{4} \left([Ai_1 \cdot \Theta_1]^2 + [Ai_2 \cdot \Theta_2]^2 + 2[Ai_1 \cdot \Theta_1][Ai_2 \cdot \Theta_2] \text{Cos}\left(\frac{\mu_B \alpha y t}{\hbar}\right) \right) \quad (3.18)$$

onde “ Ai_j ” e “ Θ_j ” representam (de forma esquemática) a função de Airy e a função Heaviside da função χ_j , com $j = 1, 2$, respectivamente. A Figura 6 mostra que a contribuição do termo $(Ai_1 \cdot \Theta_1)(Ai_2 \cdot \Theta_2) \text{Cos}(\mu_B \alpha y t / \hbar)$, em (3.18) é desprezível.

Fig 6a. Contribuição (negativa) do termo $(Ai_1 \cdot \Theta_1)(Ai_2 \cdot \Theta_2) \text{Cos}(\mu_B \alpha y t / \hbar)$ na eq.(3.18), com $m = 1$, $\hbar = 1$, $\mu_B = 1$, $\alpha = 800$ e $t = 0.07$.

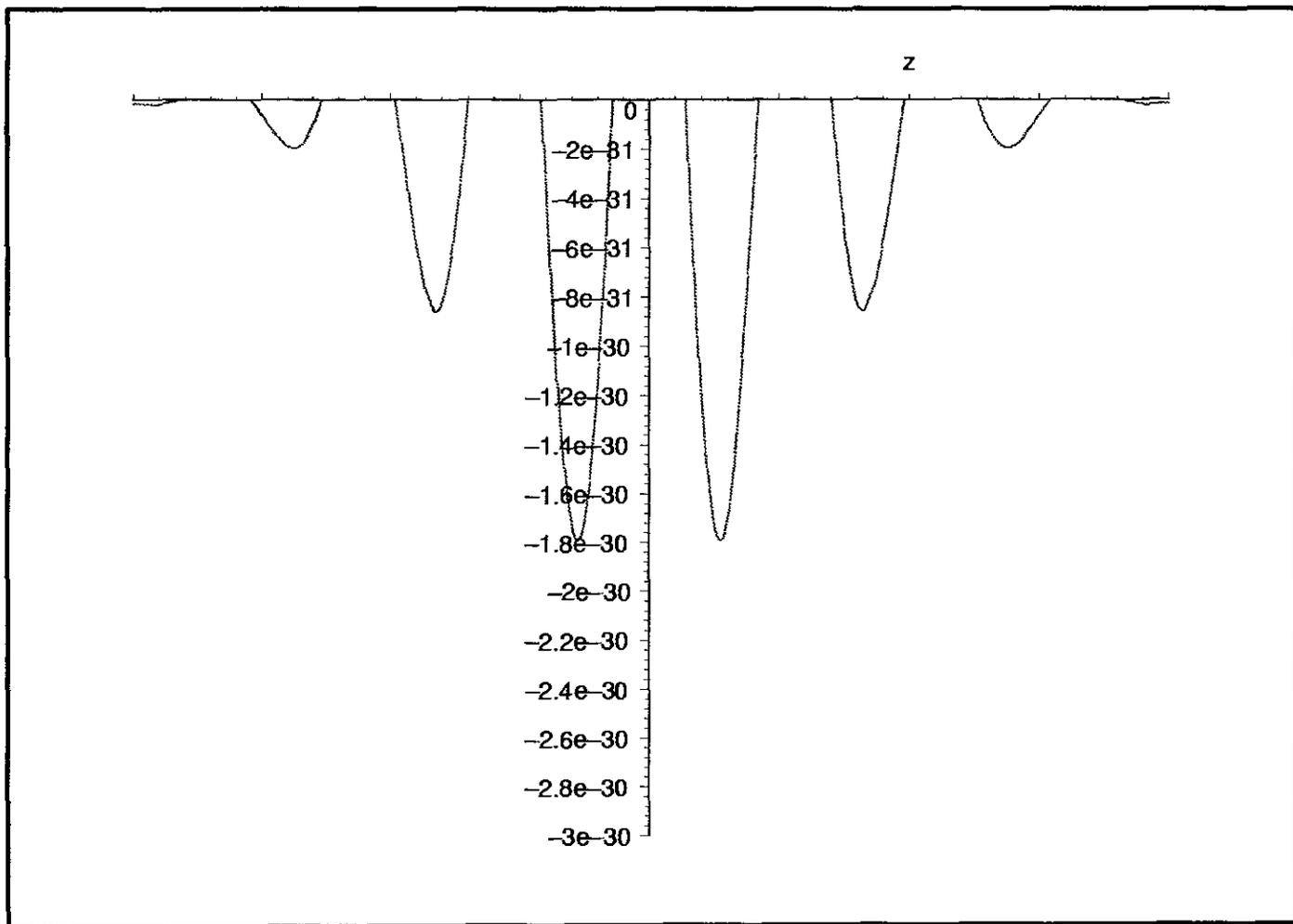
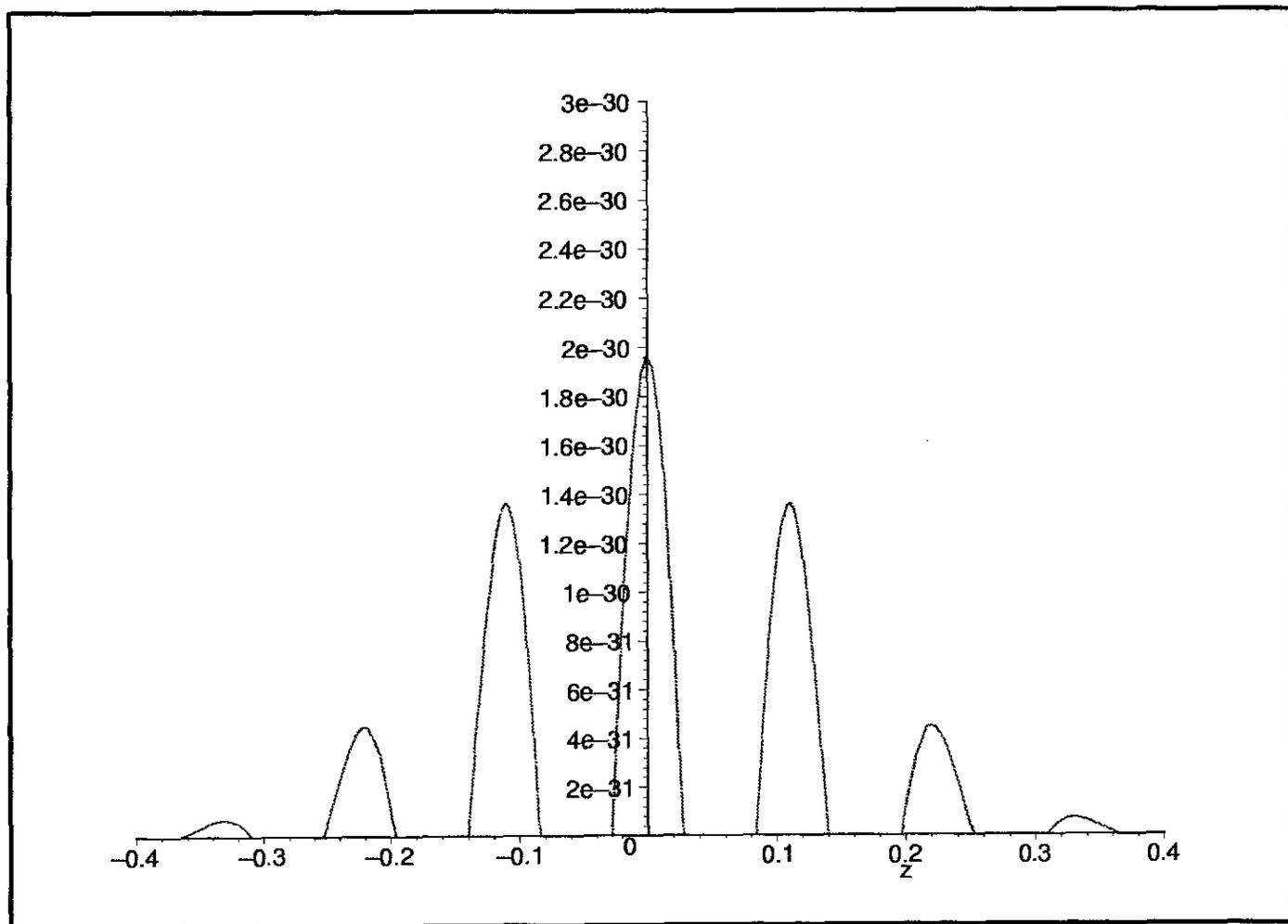


Fig 6b. Contribuição (positiva) do termo $(Ai_1 \cdot \Theta_1)(Ai_2 \cdot \Theta_2) \text{Cos}(\mu_B \alpha y t / \hbar)$ na eq.(3.18), com $m = 1$, $\hbar = 1$, $\mu_B = 1$, $\alpha = 800$ e $t = 0.07$.



Capítulo 4

Soluções Aproximadas para o Efeito Stern-Gerlach

4.1 Introdução

No capítulo 2 foi possível construir soluções para o efeito Stern-Gerlach sobre o plano de simetria $Y = 0$, onde as duas equações para as componentes do espinor ficavam desacopladas e um afastamento total dos feixes se manifestava. No capítulo 3 encontramos soluções no plano $Z = 0$ onde se mostrava que cada uma das funções de onda (componentes do espinor) possuem duas componentes movimentando-se em direções contrárias. Agora vamos considerar o caso geral e mais interessante sobre o espaço todo.

Aqui, baseados numa generalização dos resultados do capítulo 2, construímos soluções aproximadas para as equações acopladas de Schrödinger-Pauli do efeito Stern-Gerlach. Estas soluções também mostram que o efeito de separação espacial não é total. Este resultado é obtido diretamente das soluções achadas e está de acordo com alguns artigos recentes [1, 19].

4.2 Transformação de funções para as equações acopladas

Consideremos as duas equações acopladas de Schrödinger-Pauli do efeito Stern-Gerlach para uma partícula de um feixe :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} \right) + i\mu_B \alpha y \psi_2 + \mu_B (B_0 + \alpha z) \psi_1 = i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} \quad (4.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2} \right) - i\mu_B \alpha y \psi_1 - \mu_B (B_0 + \alpha z) \psi_2 = i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \quad (4.2)$$

Aqui vamos fazer uso de uma transformação de funções, sugerida por Platt [29], que vai permitir simplificar este sistema de equações acopladas. Tal transformação de funções é definida através de :

$$\psi_1(x, y, z, t) = e^{-i\mu_B B_0 t / \hbar} \psi_+(x, y, z, t) \quad (4.3)$$

$$\psi_2(x, y, z, t) = e^{+i\mu_B B_0 t / \hbar} \psi_-(x, y, z, t) \quad (4.4)$$

Ao efetuar tal operação de transformação, ficamos com um novo sistemas de equações acopladas, agora para as funções ψ_+ e ψ_- , como se indica a seguir :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_+}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_+}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_+}{\partial z^2} \right) + i\mu_B \alpha y e^{+2i\mu_B B_0 t / \hbar} \psi_- + \\ + \mu_B \alpha z \psi_+ = i\hbar \frac{\partial \psi_+}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_-}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_-}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_-}{\partial z^2} \right) - i\mu_B \alpha y e^{-2i\mu_B B_0 t / \hbar} \psi_+ + \\
& -\mu_B \alpha z \psi_- = i\hbar \frac{\partial \psi_-}{\partial t}
\end{aligned} \tag{4.6}$$

A constante de Planck h que fica nos novos termos de acoplamento das equações acima (com valor muito pequeno $\approx 6.626 \times 10^{-34}$ J.s) tem como consequência o fato de que quando a variável t experimenta uma pequena variação de seu valor, produz-se uma enorme variação na fase das exponenciais complexas, cujo modulo oscila rapidamente entre -1 e $+1$. Para funções deste tipo a sua integral tem um valor perto de zero a menos que o intervalo de integração considerado contenha um ponto onde a sua fase seja estacionária. Em nosso caso, a fase das exponencias acima não tem nenhum ponto estacionário.

A seguir vamos integrar as equações anteriores sobre um intervalo temporal, $\langle 0, T \rangle$, que seja grande comparado com o período de oscilação ($t_p \approx 2\pi\hbar/u_B B_0$) porém menor do que o tempo de vôo ao longo de sua trajetória clássica. Logo, segundo o que foi dito anteriormente, o novo termo de acoplamento pode ser desprezado. Ou seja :

$$\int_0^T y e^{i\mu_B B_0 t / \hbar} \psi_-(x, y, z, t) dt \approx 0 \tag{4.7}$$

Com isto ficamos com as seguintes equações :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial z^2} \right) + \mu_B \alpha z \zeta_+ = i\hbar (\psi_+(x, y, z, T) - \psi_+(x, y, z, 0)) \tag{4.8}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \zeta_-}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta_-}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \zeta_-}{\partial z^2} \right) - \mu_B \alpha z \zeta_- = i\hbar(\psi_-(x, y, z, T) - \psi_-(x, y, z, 0)) \quad (4.9)$$

sendo :

$$\zeta_+(x, y, z, T) = \int_0^T \psi_+(x, y, z, t) dt \quad (4.10)$$

Para certo tipo de funções que tenham valores não desprezíveis só numa pequena região de seus domínios pode-se esperar que, sobre uma certa região dentro de ditos dominios, a relação seguinte seja considerada como uma boa aproximação :

$$\psi_+(x, y, z, T) - \psi_+(x, y, z, 0) \approx \psi_+(x, y, z, T) \quad (4.11)$$

Graficamente pode-se ver que as funções que verificam a relação (4.11) deveriam ter o seguinte aspecto :

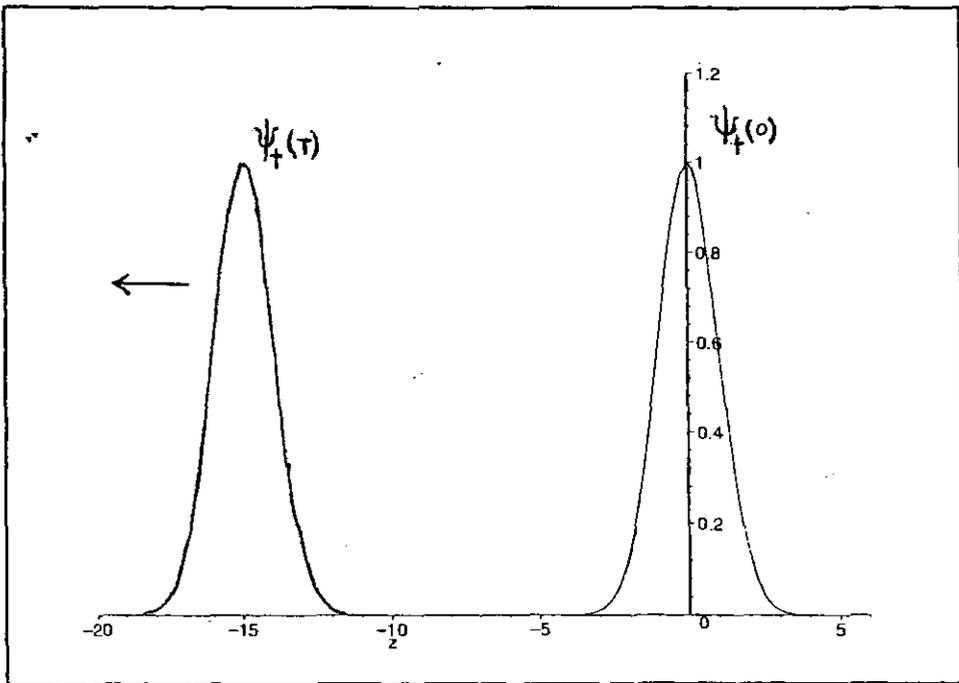


Fig 7. Funções que verificam a relação (4.11).

Por outro lado, derivando a expressão (4.10) com respeito ao parâmetro (contínuo) T consegue-se:

$$\frac{\partial}{\partial T} \zeta_+(x, y, z, T) = \psi_+(x, y, z, T) \quad (4.12)$$

Ao substituirmos este último resultado e a aproximação eq.(4.11) na eq.(4.8), ficamos com a equação aproximada :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial z^2} \right) + \mu_B \alpha z \zeta_+ = i\hbar \frac{\partial \zeta_+}{\partial T} \quad (4.13)$$

Considerações análogas sobre a função ψ_- substituídas em (4.9) produzem uma equação aproximada para ζ_- :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \zeta_-}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta_-}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \zeta_-}{\partial z^2} \right) - \mu_B \alpha z \zeta_- = i\hbar \frac{\partial \zeta_-}{\partial T} \quad (4.14)$$

A seguir vamos a obter soluções para estas equações.

4.3 Construção de soluções aproximadas

Para a eq.(4.13) procuraremos soluções cuja estrutura representem uma generalização das funções construídas no capítulo 2. Especificamente vamos considerar :

$$\zeta_+(x, y, z, T) = Ai[a(y + z + bT^2)] e^{isT(y - \pi T^2)} e^{ikTz} e^{(i/\hbar)(p_z x - \hbar\omega + T)} \quad (4.15)$$

Vejam agora se existem valores reais para os diferentes parâmetros distintos de maneira

que (4.15) represente realmente uma solução para a equação considerada. Temos a seguir as suas derivadas :

$$\frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar} Ai.e. \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial y^2} = \{(-s^2 T^2) Ai + (2isaT) Ai' + a^2 Ai''\}e. \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial^2 \zeta_+}{\partial z^2} = \{(-k^2 T^2) Ai + (2ikaT) Ai' + a^2 Ai''\}e. \quad (4.18)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \zeta_+}{\partial T} = \{\hbar(sy + kz - w_+ - 3snT^2) Ai - (2i\hbar abT) Ai''\}.e. \quad (4.19)$$

Logo temos :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \zeta_+ + \mu_B \alpha z \zeta_+ - i\hbar \frac{\partial \zeta_+}{\partial T} = & \left\{ \left[-\frac{\hbar^2 a^2}{m} \right] Ai'' - i\hbar aT \left[\frac{\hbar(s+k)}{m} + 2b \right] Ai' \right. \\ & \left. + \left[\frac{p_x^2}{2m} - \hbar w_+ + (\hbar s)y + (\mu_B \alpha + \hbar k)z + \left(\frac{\hbar^2(s^2 + k^2)}{2m} - 3\hbar sn \right) T^2 \right] Ai \right\} e. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Quando o membro direito da equação (4.20) for igual a zero teremos que ζ_+ , dado por (4.15), será uma solução da equação (4.13). Para conseguir isto vamos levar em conta a equação de Airy, eq.(2.20), e impor sobre os parâmetros as seguintes condições (na verdade, até aqui a nossa função Ai é uma função arbitrária) :

$$\text{Condição 1 : } \frac{\hbar(s+k)}{m} + 2b = 0$$

$$\text{Condição 2 : } \frac{p_x^2}{2m} - \hbar w_+ = 0$$

A primeira condição anula o termo Ai' (que a equação de Airy não possui), e a segunda reduz o coeficiente da função Ai .

Com isto temos :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\zeta_+ + \mu_B\alpha z\zeta_+ - i\hbar\frac{\partial\zeta_+}{\partial T} = \left[-\frac{\hbar^2\alpha^2}{m}\right]\{Ai'' +$$

$$- \left[\left(\frac{ms}{\hbar\alpha^2}\right)y + \left(\frac{m(\mu_B\alpha + \hbar k)}{\hbar^2\alpha^2}\right)z + \frac{m}{\hbar^2\alpha^2}\left(\frac{\hbar^2(s^2 + k^2)}{2m} - 3\hbar sn\right)T^2 \right] Ai\}e. \quad (4.21)$$

Do argumento da função Ai , dada em (4.15), e (2.20) vemos que é necessário impor condições adicionais de maneira que a equação de Airy seja satisfeita :

$$\text{Condição 3 : } \frac{ms}{\hbar\alpha^2} = a$$

$$\text{Condição 4 : } \frac{m(\mu_B\alpha + \hbar k)}{\hbar^2\alpha^2} = a$$

$$\text{Condição 5 : } \frac{m}{\hbar^2\alpha^2} \left(\frac{\hbar^2(s^2 + k^2)}{2m} - 3\hbar sn \right) = ab$$

Logo, se existem valores para estes parâmetros dentro do conjunto dos números reais de maneira que as condições sejam satisfeitas, teremos, em consequência, que a equação para ζ_+ , (4.13), será satisfeita.

A partir das 3ª e 4ª condições conseguimos as expressões para s e k que, substituídas na 5ª condição, fornece uma equação algébrica para b :

$$8m^2b^2 + (12m^2n - 2m\mu_b\alpha)b + (\mu_B^2\alpha^2 - 6m\mu_B\alpha n) = 0 \quad (4.22)$$

Aqui vamos escolher n da maneira que o discriminante desta equação seja zero :

$$72m^2n^2 + 72m\mu_B\alpha n - 14\mu^2\alpha^2 = 0 \quad (4.23)$$

Com isto, achamos os valores :

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{\mu_B\alpha}{6m} \longrightarrow b = 0 \\ n_2 &= -\frac{7\mu_B\alpha}{6m} \longrightarrow b = \frac{\mu_B}{m} \end{aligned}$$

Vamos escolher o valor n_2 . Fazendo uso das outras condições achamos os seguintes valores:

$$\begin{aligned} a &= -\left[\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right]^{1/3} \\ b &= \frac{\mu_B\alpha}{m} \\ k &= -\frac{3\mu_B\alpha}{2\hbar} \\ s &= -\frac{\mu_B\alpha}{2\hbar} \end{aligned}$$

Com estes valores dos parâmetros a equação (4.13) é satisfeita por nossa função (4.15) mas esta não satisfaz a condição (4.11). Isto pode ser conseguido facilmente, como já foi feito no capítulo 2, por meio da função de Heaviside, Θ .

Finalmente a função solução da equação considerada é :

$$\begin{aligned} \zeta_+(x, y, z, T) &= Ai \left[\left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{1/3} \left(-y - z + \xi_o \left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{-1/3} - \left(\frac{\mu_B\alpha}{m}\right)T^2 \right) \right] \times \\ &\Theta \left[-y - z - \eta_o \left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{-1/3} + \xi_o \left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{-1/3} - bT^2 \right] \times \\ &e^{-i\left(\frac{3\mu_B\alpha}{2\hbar}\right)Tz} \cdot e^{-i\left(\frac{\mu_B\alpha}{2\hbar}\right)T\left(y + \left(\frac{7\mu_B\alpha}{6m}\right)T^2\right)} \cdot e^{\left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(p_z x - \left[\frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_o - \frac{\hbar^2 a^2}{2m} \xi_o\right]T\right)} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Esta é uma função que movimenta-se para a **esquerda** segundo a direção considerada (por exemplo, sobre uma que resulta da interseção dos planos $Y = Z$ com um plano -perpendicular ao eixo X - que é paralelo ao anteparo). O interessante é que temos uma outra solução para esta mesma equação que movimenta-se para a **direita** em relação à mesma direção considerada. Esta função é dada por :

$$\zeta_+(x, y, z, T) = Ai[a(y + z - bT^2)]e^{isTy}e^{ikT(z - nT^2)}e^{(i/\hbar)(p_x x - \hbar\omega_+ T)} \quad (4.25)$$

com o seguinte conjunto de valores:

$$a = \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right]^{1/3}$$

$$b = \left(\frac{1 + \sqrt{2}}{2}\right) \frac{\mu_B \alpha}{m}$$

$$k = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\mu_B \alpha}{\hbar}$$

$$s = \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\mu_B \alpha}{\hbar}$$

$$n = \left(\frac{5 + 4\sqrt{2}}{6}\right) \frac{\mu_B \alpha}{m}$$

Explicitamente temos a solução :

$$\zeta_+(x, y, z, T) = Ai \left[\left(\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(y + z + \frac{\xi_o}{a} - \left(\frac{1 + \sqrt{2}}{2}\right) \left(\frac{\mu_B \alpha}{m}\right) T^2 \right) \right] \times$$

$$\Theta \left[y + z - \eta_o \left(\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{-1/3} + \xi_o \left(\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{-1/3} - \left(\frac{\mu_B \alpha}{m}\right) T^2 \right] \times$$

$$e^{i(1+\frac{1}{\sqrt{2}})\frac{\mu_B\alpha}{\hbar}Ty} \cdot e^{iT(\frac{1}{\sqrt{2}})\frac{\mu_B\alpha}{\hbar}\left(z - (\frac{5+4\sqrt{2}}{6})\frac{\mu_B\alpha}{m}T^2\right)} \cdot e^{\left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(p_x x - \left[\frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_0 - \frac{\hbar^2}{2m}\left(1+\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{\mu_B\alpha m}{\hbar^2}\right]^{2/3}\xi_o\right)T} \quad (4.26)$$

Portanto, achamos duas soluções, correspondentes **ao mesmo estado de spin**, que movimentam-se em **direções contrárias**. Isto quer dizer que nem todas as partículas no estado de “spin up” são defletidas na mesma direção ao longo do eixo Z : uma partícula tem certa probabilidade de se afastar na direção contrária onde se esperaria achar só partículas no outro estado de spin (tal como acontece num experimento Stern-Gerlach *ideal*). Nas referências [1, 19] pode-se achar comentários a respeito deste fato que acontece num experimento Stern-Gerlach real.

Agora vamos considerar a outra equação, a correspondente a ζ_- :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\zeta_-}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\zeta_-}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\zeta_-}{\partial z^2}\right) - \mu_B\alpha z\zeta_- = i\hbar\frac{\partial\zeta_-}{\partial T} \quad (4.27)$$

Procedendo semelhantemente ao feito para a equação de ζ_+ achamos para esta equação as duas soluções seguintes :

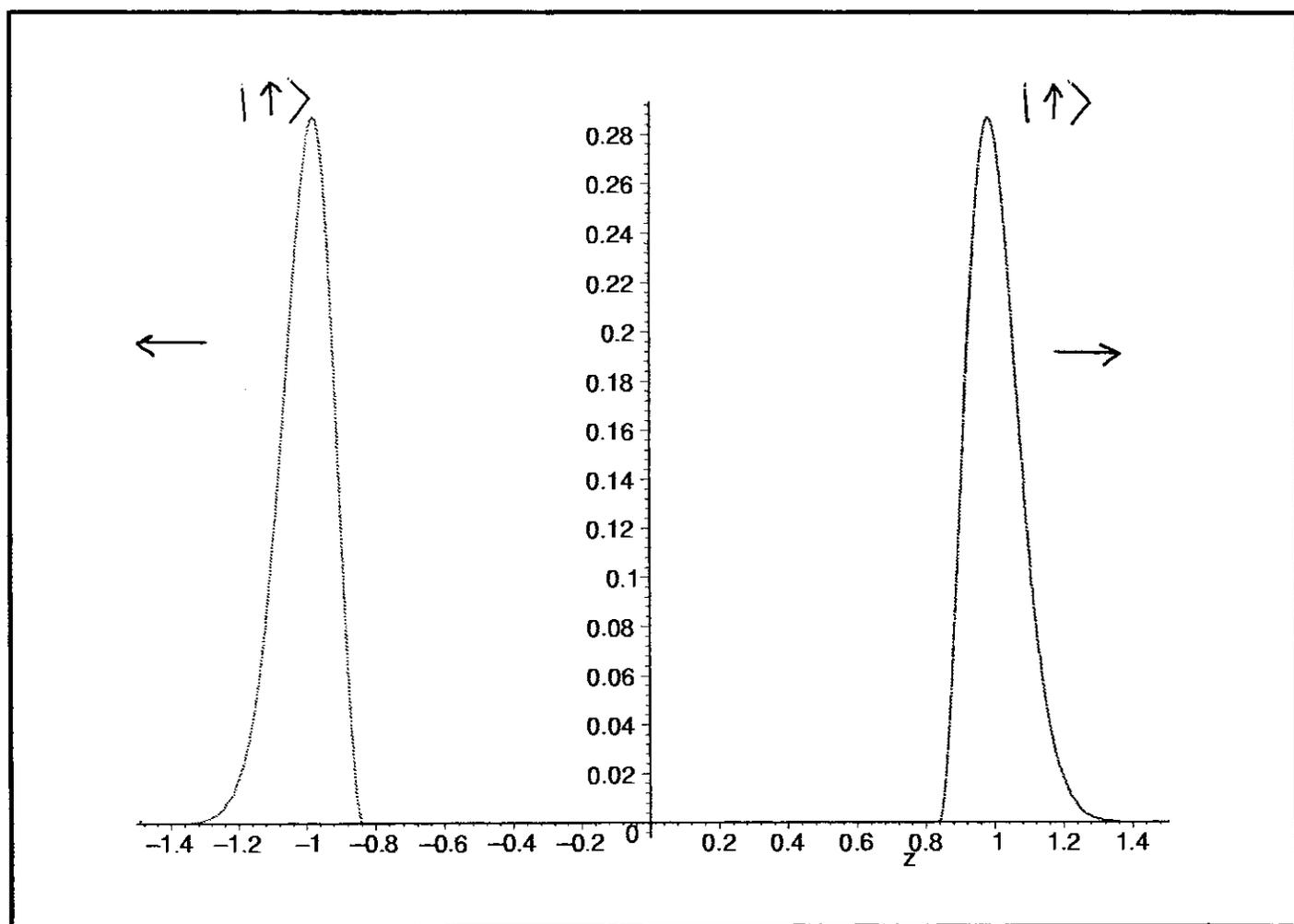
$$\begin{aligned} \zeta_-(x, y, z, T) = & Ai \left[\left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{1/3}(y + z + \xi_o\left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{-1/3} - \left(\frac{\mu_B\alpha}{m}\right)T^2) \right] \times \\ & \Theta \left[y + z - \eta_o\left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{-1/3} + \xi_o\left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{-1/3} - \left(\frac{\mu_B\alpha}{m}\right)T^2 \right] \times \\ & e^{i\left(\frac{3\mu_B\alpha}{2\hbar}\right)Tz} \cdot e^{i\left(\frac{\mu_B\alpha}{2\hbar}\right)T\left(y - (7\mu_B\alpha/6m)T^2\right)} \cdot e^{\left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(p_x x - \left[\frac{p_x^2}{2m} - \mu_B B_0 - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mu_B\alpha m}{2\hbar^2}\right)^{2/3}\xi_o\right]T\right)} \quad (4.28) \end{aligned}$$

a que se movimenta para a **direita** em relação à direção considerada, e também a solução:

$$\begin{aligned}
\zeta_{-}(x, y, z, T) = & Ai \left[\left(\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(-y - z + \frac{\xi_o}{a} - \left(\frac{1 + \sqrt{2}}{2} \right) \left(\frac{\mu_B \alpha}{m} \right) T^2 \right) \right] \times \\
& \Theta \left[-y - z - \zeta_o \left(\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{-1/3} + \xi_o \left(\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{-1/3} - bT^2 \right] \times \\
& e^{-i(1+\frac{1}{\sqrt{2}})\frac{\mu_B \alpha}{\hbar} T y} . e^{-iT(\frac{1}{\sqrt{2}})\frac{\mu_B \alpha}{\hbar} \left(z + \left(\frac{5+4\sqrt{2}}{6} \right) \frac{\mu_B \alpha}{m} T^2 \right)} . e^{\left(\frac{i}{\hbar} \right) \left(p_x x - \left[\frac{p_x^2}{2m} - \mu_B B_o - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \frac{\mu_B \alpha m}{\hbar^2} \right)^{2/3} \xi_o \right] T \right)}
\end{aligned} \tag{4.29}$$

que se movimenta para a **esquerda** segundo a mesma direção. Logo, como se esperava, temos também aqui duas soluções que movimentam-se em sentidos opostos (sobre a direção considerada) para o mesmo estado de spin. Este resultado é mostrado no gráfico seguinte

Fig 8. Duas distribuições se movimentando em direções contrárias para o mesmo estado de spin. A unidade de comprimento e os valores dos parâmetros são aqueles dados nas páginas 39 e 40.



Capítulo 5

Átomos com spin arbitrário

5.1 O Spin 3/2

Nesta seção estamos interessados em ampliar um pouco nossos resultados. Para isto vamos tentar construir as autoenergias para o caso de um feixe de átomos neutros de spin 3/2 que ingressam no aparelho Stern-Gerlach segundo a direção x ; a construção será semelhante ao caso já estudado de spin 1/2.

Sabemos que neste caso se produzem quatro feixes de átomos, os quais afastam-se entre si como consequência da interação dos spins dos átomos com o campo Stern-Gerlach.

5.2 Soluções quânticas no caso de spin 3/2

O hamiltoniano para uma partícula de spin S arbitrário, com $L = 0$, por simplicidade, interagindo com um campo magnético é dado pela expressão :

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{P}^2}{2m} I + \frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{S} \cdot \mathbf{B} \quad (5.1)$$

A equação matricial de Schrödinger-Pauli será :

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = -I \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \mu_B [-\alpha y \Sigma_2 + (B_0 + \alpha z) \Sigma_3] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad (5.2)$$

onde as Σ_i , com $i = 1, 2, 3$, são as matrizes de spin. Sobre o plano $Y = 0$ temos definido o espinor de quatro componentes $\Phi(x, z, t) = \Psi(x, y = 0, z, t)$. Chamaremos de $\phi_3, \phi_2, \phi_1, \phi_0$ as componentes deste espinor. Para elas temos o seguinte conjunto de equações :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_3}{\partial z^2} \right) + 3\mu_B (B_0 + \alpha z) \phi_3 = i\hbar \frac{\partial \phi_3}{\partial t} \quad (5.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_2}{\partial z^2} \right) + \mu_B (B_0 + \alpha z) \phi_2 = i\hbar \frac{\partial \phi_2}{\partial t} \quad (5.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_1}{\partial z^2} \right) - \mu_B (B_0 + \alpha z) \phi_1 = i\hbar \frac{\partial \phi_1}{\partial t} \quad (5.5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial z^2} \right) - 3\mu_B (B_0 + \alpha z) \phi_0 = i\hbar \frac{\partial \phi_0}{\partial t} \quad (5.6)$$

Seguindo o procedimento (similar) já visto para o spin 1/2 obtemos as seguintes auto-energias :

$$E_3 = \frac{p_x^2}{2m} + 3\mu_B B_0 - \xi_0 \left(\frac{9\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \quad (5.7)$$

$$E_2 = \frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_0 - \xi_0 \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \quad (5.8)$$

$$E_1 = \frac{p_x^2}{2m} - \mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \quad (5.9)$$

$$E_0 = \frac{p_x^2}{2m} - 3\mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{9\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \quad (5.10)$$

de onde, como pode-se ver, os níveis têm deslocamentos distintos devido às distintas contribuições do gradiente. Na seguinte figura temos um gráfico dos níveis dados acima.

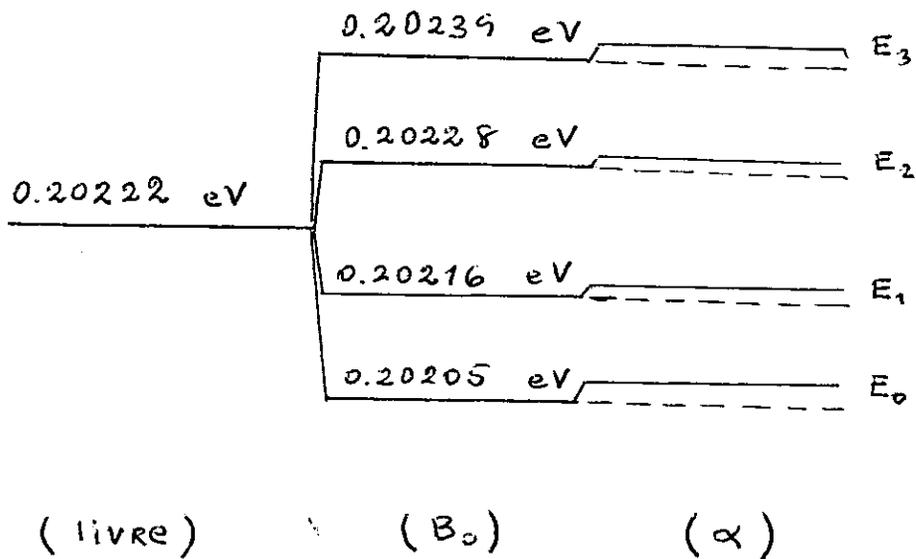


Figura 9. Níveis energéticos para átomos com spin 3/2 em um aparelho de Stern-Gerlach.

Neste sistema de 4 estados a diferença de energias entre estados consecutivos permitiria verificar experimentalmente a contribuição do gradiente α sobre as autoenergias. Como vimos, no caso de sistemas de 2 estados ($S = 1/2$), as contribuições do gradiente eram de igual magnitude e produziam-se deslocamentos iguais de ambos níveis. Com isso nenhuma

das técnicas experimentais baseadas na medição de diferenças de energia poderia detectar tal contribuição. Ao contrário, com um sistema de spin $S = 3/2$ isto seria possível, em princípio. Poder-se-ia pensar em irradiar nosso sistema com ondas eletromagnéticas de frequência ω “adequada” para produzir uma transição entre níveis energéticos com deslocamentos distintos, tais como E_3 e E_2 ou E_3 e E_1 cuja diferença depende diretamente de α .

5.3 O caso de spin arbitrário

Das seções anteriores e como uma aplicação do visto a outras situações obteremos aqui uma generalização para o caso de átomos neutros de qualquer valor de spin S (mas fixo para todos os átomos do feixe) os quais, vamos supor, ingressam no magneto de Stern-Gerlach tal como no primeiro caso considerado. As $2m_s + 1$ autoenergias serão dadas pelas relações :

$$E_{m_s} = \frac{p_x^2}{2m} + 2m_s\mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{(2m_s)^2 \mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \quad (5.11)$$

Deste espectro de energias podemos ver que diferentes níveis de um dado valor de spin S deslocam-se em graus distintos. A diferença de energias entre dos níveis que são definidos por m_s e $m_{s'}$ é dada por :

$$E_{m_s} - E_{m_{s'}} = 2(m_s - m_{s'})\mu_B B_o - \xi_o \left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} [(2m_s)^2 - (2m_{s'})^2] \quad (5.12)$$

Capítulo 6

Ordens de Grandeza

Aqui vamos avaliar algumas ordens de grandeza das quantidades físicas de maior interesse nesta tese. A separação espacial das partículas de spin $S = 1/2$ contidas no plano $Y = 0$, e a contribuição do gradiente, α , às autoenergias das partículas com spin $S = 3/2$.

6.1 Separação energética

Vamos fazer uso dos seguintes valores numéricos para as grandezas físicas [5]:

$$v = 600 \text{ m/s}$$

$$m(\text{átomo de Ag}) = 1.8 \times 10^{-25} \text{ Kg}$$

$$\mu_B = 9.27408 \times 10^{-24} \text{ J/T}$$

$$h = 6.62607 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$B_o = 1\text{T}$$

$$\alpha = 10^3 \text{ T/m}$$

$$L = 0.2 \text{ m}$$

$$l = 0.2 m$$

$$\xi_o = -1.0188$$

com isto temos que a contribuição do gradiente, α , às autoenergias, no caso de spin $S = 3/2$, é :

$$\left(\frac{9\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m}\right)^{1/3} = 0.1411 \times 10^{-8} \text{ eV}$$

para os níveis E_0 e E_3 , e

$$\left(\frac{\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2}{2m}\right)^{1/3} = 0.1832 \times 10^{-8} \text{ eV}$$

para os níveis E_1 e E_2 (eqs.(5.8) a (5.11)). Com isto temos que $\nu = (E_1 - E_0)/h \approx 0,4 \text{ MHz}$. As ordens de grandeza dos termos de energia cinética e da energia no campo homogêneo são :

$$\frac{p_x^2}{2m} = 0.2022 \text{ eV}$$

$$\mu_B B_o = 0.5788 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

A Figura 10 mostra os níveis energéticos e as transições entre aqueles níveis que possuem uma diferença de energias dependente do gradiente.

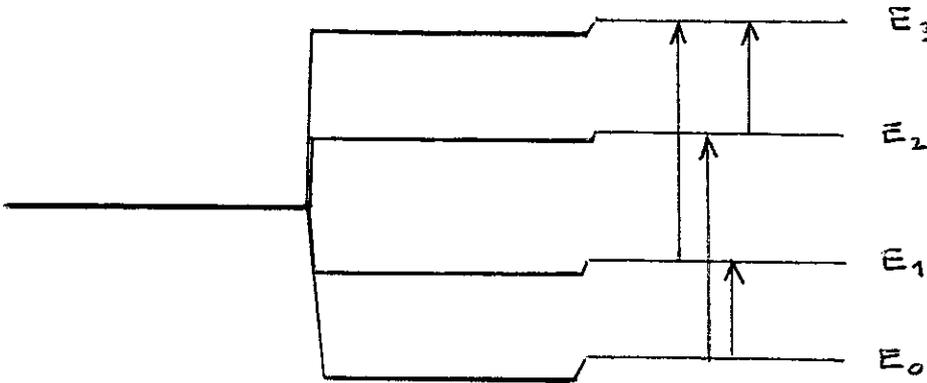


Fig 10. Níveis magnéticos para átomos neutros com spin $S = 3/2$.

6.2 Separação espacial

Seja l o comprimento do aparelho de Stern-Gerlach na direção x . Aqui vamos determinar a separação dos feixes sobre uma tela que fica distante do aparelho um comprimento L tal como o a Figura 11 mostra.

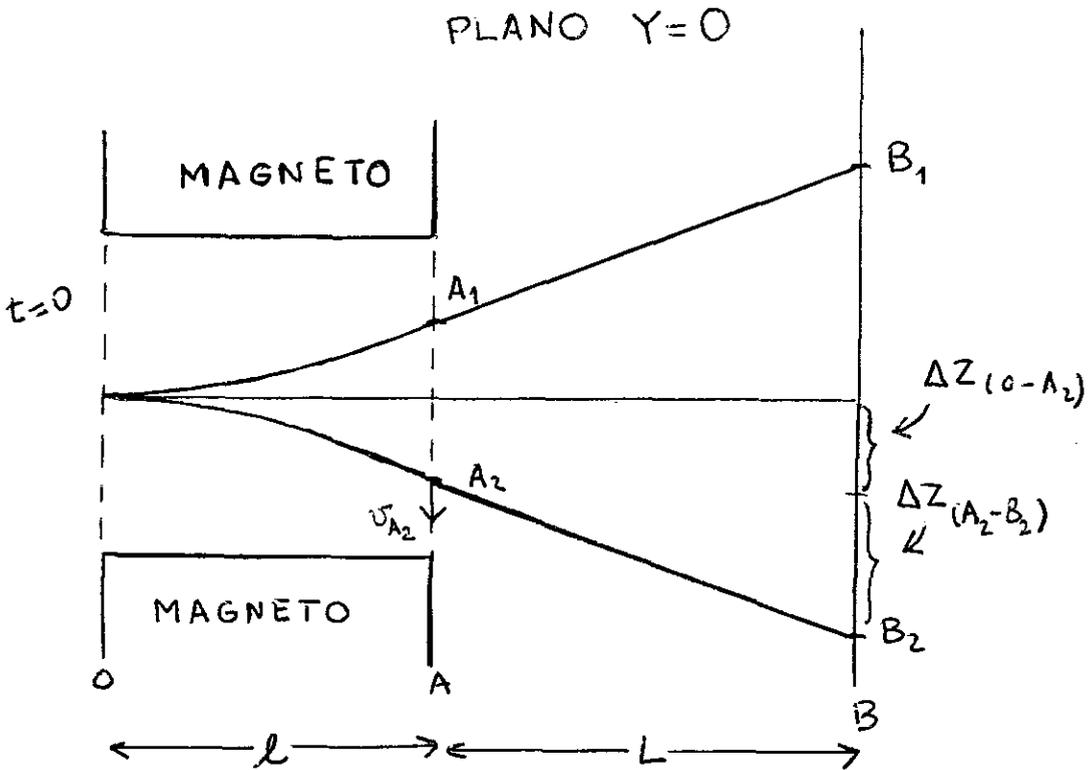


Fig 11. Desenho da situação após as partículas saírem de um aparelho de Stern-Gerlach. A aceleração, \dot{v} , com que movimenta-se a função de onda pode ser obtida fazendo o argumento da função de Airy, eq.(2.34), igual a uma constante e derivando-a com respeito ao tempo. Assim, obtém-se : $\dot{v} = -2b = -(\mu_B \alpha / 2m)$.

O tempo de vôo dentro do campo é $t_{OA} = (lm/p_x)$ e o tempo desde que ele sai do campo

até bater no anteparo é $t_{AB} = (Lm/p_x)$.

A velocidade, segundo a direção z , quando alcança a linha A é :

$$v_{(A_2)} = -(2b) \frac{lm}{p_x} = -\left(\frac{\mu_B \alpha}{2m}\right) \frac{lm}{p_x}$$

O afastamento $\Delta z_{(0,A_2)}$ da partícula, quando alcança A_2 , relativo ao zero da direção Z , é dado por :

$$\Delta z_{(0,A_2)} = \frac{1}{2} \dot{v} t_{0B}^2 = -\frac{\mu_B \alpha}{4m} \left(\frac{l^2}{v_x^2}\right)$$

onde $v_x = (p_x/m)$ e o afastamento $\Delta z_{(A_2,B_2)}$ da partícula, com respeito à posição A_2 e segundo a direção Z , quando bate no anteparo em B_2 , é dado por :

$$\Delta z_{(A_2,B_2)} = v_{(A_2)} t_{AB} = -\frac{\mu_B \alpha}{2m} \left(\frac{lL}{v_x^2}\right)$$

Logo, o afastamento $\Delta z_{(0,B_2)}$, a partir da origem de coordenadas, de uma partícula se movimentando segundo valores negativos da direção Z com os valores dados na primeira página deste capítulo é :

$$\Delta z_{(0,B_2)} = \Delta z_{(0,A_2)} + \Delta z_{(A_2,B_2)} \approx 4\text{mm}$$

Esta pode ser comparado com o resultado de Stern [4] quem esperava que os átomos fossem defletidos, segundo a direção Z , uma distância s dada pela relação :

$$s = 1.12 \times 10^{-5} \left(\frac{\partial H}{\partial z}\right) \frac{l^2}{T} \text{cm} \quad (6.1)$$

sendo $\partial H/\partial z$ o gradiente do campo medido em G/cm e a temperatura T em graus absolutos. Aqui, para um gradiente de $10^4 G/cm$ e uma temperatura de 1000°C , Stern esperava uma deflexão do orden de 10^{-2}mm , considerando que $\partial H/\partial z$ é uma constante sobre uma

longitude de 3cm.

Blokhintsev [3], por outro lado, dá para a separação espacial das partículas quando elas ainda estão no campo, numa distância l , a relação :

$$\Delta z = -\frac{1}{2M} \frac{e\hbar}{2\mu c} (m \pm 1) \left(\frac{d\mathcal{H}}{dz}\right) \frac{l^2}{v^2}$$

onde : M é a massa do átomo, m o número quântico magnético, \mathcal{H} o campo magnético, μ a massa do elétron e l o comprimento (na direção de incidência do feixe inicial) do magneto.

Outros dados achados na literatura [7] reportam que um campo magnético de 10^3 Tm^{-1} produz um afastamento (a partir da origem de coordenadas do eixo Z) de 1mm logo de que as partículas atravessam o aparelho -de 20 cm de comprimento- com velocidades térmicas. Estes afastamentos são grandes comparadas com as fendas frequentemente usadas em experimentos com feixes atômicos.

Capítulo 7

Discussões e Conclusões

7.1 Discussões

(1) As Figuras 5a, 5b e 5c mostram a evolução temporal das densidades de probabilidade para “spin-up” e “spin down”, com $\alpha = 800$. Pode-se ver que as partículas com spins opostos afastam-se mais e mais enquanto elas viajam através da região do magneto. É importante apontar que não foi feita nenhuma aproximação sobre o valor de α comparado com o valor de B_0 . De fato, no que diz respeito à separação, a intensidade da componente homogênea do campo não é importante. Isto contrasta com a aproximação a que usa α como uma pequena perturbação sobre B_0 [10].

(2) As funções dadas pelas relações (2.34) e (2.35) descrevem corretamente as características observadas num experimento Stern-Gerlach: (2.1) a $t = 0$ as duas funções se superpõem espacialmente; (2.2) elas descrevem distribuições de spin-up e spin-down aproximadamente homogêneas.

(3) Quanto ao fato de o hamiltoniano (2.2) não possuir dependência explícita com o tempo, poder-se-ia esperar uma solução simples para as equações (2.16) e (2.17) com a forma seguinte:

$$\phi_n(x, z, t) = f_n(x, z)e^{-iE_n t/\hbar}$$

mas, estas funções têm como característica o fato de que o seu quadrado complexo é estacionário; portanto elas não podem representar distribuições que se afastam com o tempo de maneira acelerada.

(4) Na seção (2.2) fizemos uso da função Θ como uma maneira de construir soluções de quadrado integrável a partir de funções de Airy, as quais, como é bem conhecido, não têm esta propriedade. Aqui poderia apresentar-se uma dificuldade com este tipo de construção. Apesar de que a função delta de Dirac atua pontualmente seu efeito não é pontual. Para contornar possíveis problemas poderíamos tratar formalmente a delta, ou seja, como uma distribuição e não, como é usualmente feito e como aqui se faz, como uma função “ordinária”. Também poderia curvar ligeiramente a função escada a fim de evitar a presença da delta.

(5) Com respeito às equações (2.16) e (2.17) sobre o plano $Y = 0$ pode-se ver que elas correspondem ao caso de uma partícula submetida a um potencial linear; sabe-se que neste caso o espectro de energias é contínuo e não degenerado [30]. Em nosso resultado achamos duas autoenergias, o que significa que temos aqui um espectro discreto de energias, o que representa uma aparente inconsistência. Entretanto, esta pode ser parcialmente aclarada. Notamos que a função de Airy possui um conjunto infinito e enumerável de zeros. Por outro lado, lembremos que nas equações (2.34) e (2.35) truncamos a função de Airy no seu primeiro zero (ξ_0) e que a autoenergia correspondente inclui esse zero. Mas, no caso de considerar quaisquer outro de seus zeros, ξ_j , obteríamos igualmente que a autoenergia correspondente dependeria do zero considerado. Isto quer dizer que teríamos um conjunto infinito e enumerável (mas não contínuo) de energias como soluções das eqs.(2.16) e (2.17). Mas este conjunto é *quase* contínuo pois a separação energética entre níveis vizinhos é

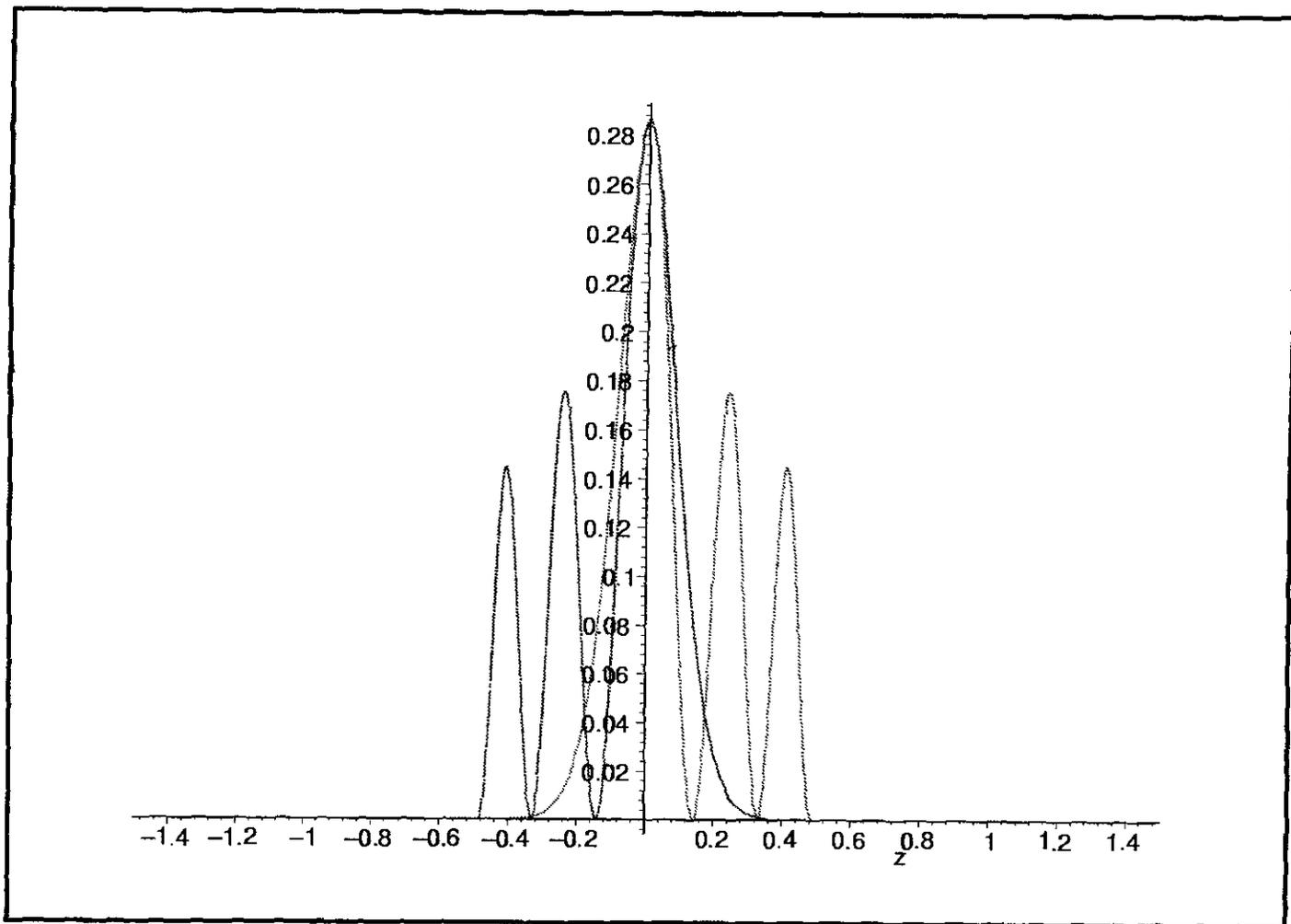
muito pequena (da ordem de $10^{-8}eV$, seção 6.1). A escolha do primeiro zero de Airy foi uma necessidade em nossa construção para representar a situação seguinte: no instante $t = 0$ as partículas ingressam ao aparelho de Stern-Gerlach no mesmo feixe sem nenhuma separação espacial que seja devida ao spin. O que acontece quando a função de Airy for truncada, por exemplo, em seu terceiro zero, é mostrado na Figura 12.

Isto significa que no lado esquerdo temos uma maior probabilidade de achar partículas no estado de spin “down” que “up” e, no lado direito, o caso contrário; portanto, teríamos que as partículas ficam afastadas espacialmente (por spin) no instante inicial. A escolha do primeiro zero de Airy produz, em consequência, que só se obtenham duas autoenergias, do amplo espectro infinito de energias, como soluções para o efeito Stern-Gerlach.

No caso de expandir o campo magnético até termos de segunda ordem em sua série de Taylor, quer dizer, incorporar o termo z^2 , já não teríamos esta situação mas sim outras novas.

(6) Ao considerar o caso mais geral em todo o espaço, achamos soluções que indicam que, para cada uma das componentes de spin, as densidades de probabilidade possuem dois pulsos que se movimentam em direções opostas, ou seja, pode-se achar partículas de um dado estado de spin onde se esperaria achar só partículas no estado de spin oposto e vice-versa. Isto está de acordo com o que acontece num experimento real de Stern-Gerlach [1].

Fig 12. Funções ϕ_1 e ϕ_2 , truncadas em ξ_2 (terceiro zero de Airy).



7.2 Conclusões

(1) Construimos soluções exatas para as autofunções e as autoenergias de partículas de spin $S = 1/2$ sobre o plano de simetria ($Y = 0$). Estas autoenergias possuem uma contribuição muito pequena do gradiente do campo que produz deslocamentos iguais em ambos níveis na quantidade $\xi_o(\mu_B^2 \alpha^2 \hbar^2 / 2m)^{1/3}$. Para gradiente zero as energias reduzem-se corretamente para aquelas no caso de campo homogêneo. O re-escalamento feito faz que α possa ter valor arbitrário.

(2) No caso de spin $S = 3/2$ temos que os níveis são deslocados em quantidades distintas o que quer dizer que teríamos pares de níveis cuja diferença de energias é diretamente dependente do gradiente.

(3) Construimos soluções, com $B_o = 0$, sobre o plano $Z = 0$ e soluções (aproximadas) no espaço todo, para partículas de spin $S = 1/2$. Mostra-se que o efeito de separação não é completo; dito em outras palavras, além de as partículas se afastarem -de um dado estado de spin- sobre uma certa direção podem-se achar também partículas no mesmo estado de spin mas afastando-se na direção *oposta* (onde só se esperaria achar partículas no outro estado de spin) e vice-versa para as partículas no outro estado de spin. A referência [1] indica que isto acontece num experimento real.

(4) As ordens de grandeza para a separação espacial do feixe estão de acordo geral com o que é observado experimentalmente.

Bibliografia

- [1] C.W. Müller, F.W. Metz, "Phase-space study of the Stern-Gerlach experiment", *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** (1994) 3511.
- [2] H.M. França *et al.*, "Possible interference effect in the Stern-Gerlach phenomenon", *Phys. Rev. A* **46**(5) (1992) 2265.
- [3] D.I. Blokhintsev, *Quantum Mechanics*, D. Reidel Publishing Company, Holland, 1964.
- [4] J. Mehra, H. Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory*, Vol.1, Part 2., Springer-Verlag, 1982.
- [5] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol. 1, John Wiley Sons, New York, 1977.
- [6] P. Alstrom, "Coment on 'Paradox in the classical treatment of the Stern-Gerlach experiment'", *Am. J. Phys.* **52**(3) (1984) 275.
- [7] J.M. Pendleburg, K.F. Smith, "Molecular beams", *Contemp. Phys.* **28**(1) (1987) 24.
- [8] A. Bohm, *Quantum Mechanics Foundations and Applications*, Springer-Verlag, New York (1993).
- [9] H.G. Valqui, "El spin no es necesariamente relativístico", *Revciumi* **2**(1) (1996) 48.

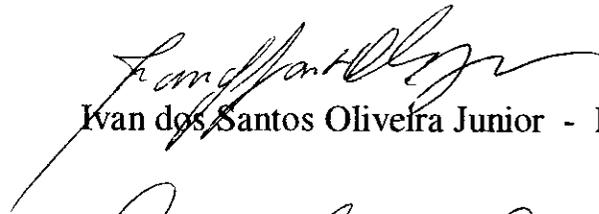
- [10] J.L. Martin, *Basic Quantum Mechanics*, Oxford Science Publications, Oxford (1982).
- [11] M.F Barros, J. Andrade and M.H. Andrade, "On the quantum-mechanical description of the Stern-Gerlach experiment", *Ann. Fond. Louis de Broglie* **12**(2) (1987) 285.
- [12] M.F Barros, J. Andrade and M.H. Andrade, "On the quantum-mechanical description of the Stern-Gerlach experiment with spin-orbit coupling", *Ann. Fond. Louis de Broglie* **13**(1) (1988) 69.
- [13] P.R. Holland, *The Quantum Theory of Motion*, Cambridge University Press, 1995.
- [14] H. Batelaan, T.J. Gay, and J.J Schwendiman, "Stern-Gerlach Effect for Electrons Beams", *Phys. Rev. Lett.* **79**(23) (1997) 4517.
- [15] H. Martens and W.M. de Muynck, "On the possibility of measuring the electron spin in an inhomogeneous magnetic field", *Found. Phys. Lett.* **7**(4) (1994) 343.
- [16] M. Hannout *et al.*, "Quantum measurement theory and the Stern-Gerlach experiment", *Am. J. Phys.* **66**(5) (1998) 377.
- [17] S. Nic Chormaic *et al.*, "Atomic Stern-Gerlach interferences with Time-Dependent Magnetic Fields", *Phys. Rev. Lett.* **72**(1) (1994) 1.
- [18] M.I. Shirokov, "Measurement of spin state using Stern-Gerlach devices", *Ann. Fond. Louis de Broglie* **21**(4) (1996) 391.
- [19] J.M. Gracia-Bondía, "A Phase-space description of Stern-Gerlach phenomenon", *Phys. Lett. A* **183** (1993) 19.
- [20] F. Schwabl, *Quantum Mechanics*, Springer, Berlin (1995).

- [21] M.V. Berry, N.L. Balazs, "Nonspreading wave packets", *Am. J. Phys.* **47**(3) (1979) 264.
- [22] D.M. Greenbergert, "Comment on 'Nonspreading wave packets'", *Am. J. Phys.* **48**(3) (1980) 256.
- [23] I.M. Besieris *et al.*, "Nondispersive accelerating wave packets", *Am. J. Phys.* **62**(6) (1994) 519.
- [24] A.B. Nassar *et al.*, "Dispersive Airy packets", *Am. J. Phys.* **63**(9) (1995) 849.
- [25] C. Kemble, *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1937.
- [26] B.G Englert, *Semiclassical theory of Atoms*, Springer-Verlag, 1988, pag. 190.
- [27] R.G. Winter, *Quantum Physics*, Sec. 2.9, 8.1 and 8.2, Wadsworth Publishing Company, California (1979).
- [28] M. Calvo, "Quantum mechanics of a chargeless spinning particle in a periodic magnetic field: A simple, soluble system", *Am. J. Phys.* **55**(6) (1987) 552.
- [29] D.E. Platt, "A modern analysis of the Stern-Gerlach experiment", *Am. J. Phys.* **60**(4) (1992) 306.
- [30] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory*, Pergamon press, London, 1959.
- [31] B.W. Roos, "Analytic Functions and Distributions in Physics and Engineering", John Wiley Sons, Inc., New York, 1969.

**“CONSTRUÇÃO DE SOLUÇÕES EXATAS E
APROXIMADAS PARA O EFEITO STERN-GERLACH”**

Juan José Díaz Bulnes

Tese de Mestrado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



Ivan dos Santos Oliveira Junior - Presidente



Geraldo Monteiro Sigaud



Sebastião Alves Dias

Rio de Janeiro, 14 de setembro de 2000