He cambiado un poco de opinión y creo que es más sensato que veamos ahora el tema 5 de la propuesta inicial (resonancia magnética nuclear) porque viene más al hilo de lo que acabas de aprender. Quizá también cuando el trabajo vaya adquiriendo forma sea conveniente pasar esto después del tema 2 y hay que plantearse si el título es adecuado, porque la resonancia magnética nuclear es sólo un ejemplo más complicado de lo que se llaman sistemas de dos estados.

Antes de comenzar, te cuento algunas ligeras nociones de física, que seguramente ya conozcas (la idea básica está en lo que leíste de "Esos pequeños y maravillosos imanes"), sobre todo para que la fórmula de partida y lo que obtengamos, te resulte natural.

Intuitivamente, si uno pone un imán en un campo magnético uniforme, siempre tiende a alinearse con él. Cuando ya está alineado no pasa nada pero si no lo está, resulta que en condiciones ideales, sin rozamiento ni ningún efecto externo, resulta que el imán se pone a oscilar como una peonza, lo que se llama un movimiento de *precesión* (mira la animación en [Wik16] si tienes dudas). De alguna manera es el mismo fenómeno que un péndulo esférico, la masa tiende a caer pero la fuerza centrífuga la mantiene a una distancia del eje describiendo círculos. En el caso de un imán, si lo suponemos generado por partículas cargadas en movimiento (como se cree que ocurre con el gran imán que forma la Tierra), lo que mantiene la precesión es que las cargas al moverse en un campo magnético sufren un cambio de dirección debido a lo que se llama fuerza de Lorentz. Si no sabes nada de electrodinámica y quieres aprender un poquito, escribí hace unas semanas [Cha16] pero no tomes como obligación ni como recomendación leerlo, es sólo por si tienes curiosidad y quieres dar un vistazo.

Una cosa un poco sorprendente es que tanto si se procede con la electrodinámica clásica como si se procede con argumentos cuánticos, como haremos aquí, se obtiene la misma precesión con el mismo valor numérico de la frecuencia, a pesar de que la interpretación y los cálculos en ambos casos son bien diferentes.

Clásicamente, para una partícula que gira, con una carga y masa fijadas, la fuerza del imán que genera es proporcional al momento angular, llamamos γ a esa constante de proporcionalidad[1]. Por otra parte parece lógico que cuanto mayor sea el campo magnético en que metamos un imán más energía nos costará moverlo. Esto sugiere, que si la "fuerza" del campo magnético uniforme es B en la dirección x, entonces el operador Hamiltoniano (la "energía") es[2]

$$H = -\gamma B S_x = -\gamma B \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma\hbar B/2 \\ -\gamma\hbar B/2 & 0 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Vamos a tomar esta fórmula como hipótesis de partida independientemente de que la física

[1] Para electrones $\gamma = -1{,}7588 \cdot 10^{11}$ en el sistema internacional. Con cálculos clásicos sale la mitad, esto se debe al *g-factor*, que lo mismo te suena de haberlo leído en mis notas.

[2] En esta hoja uso simultáneamente las notaciones σ_x, σ_y, σ_z y σ_1, σ_2, σ_3. Significan lo mismo. También lo hago aquí con S_x.

te parezca convincente, lo cual sería mucho pedir con las explicaciones tan someras que te he dado.

1) Para el Hamiltoniano de (1), calcula el operador de evolución temporal $U(t)$ y con él estudia la evolución de una partícula que parte en el tiempo $t = 0$ del estado (normalizado) de espín[3] $|+\rangle$. En caso de que tengas dudas todavía acerca de U y sus significado, lee el siguiente párrafo.

Recuerda que el Hamiltoniano actúa sobre una función de ondas como una matriz sobre sus coordenadas que son cada una de las componentes del espín (hoja 2). Es decir, si $|\Psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$, entonces

$$H|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma\hbar B/2 \\ -\gamma\hbar B/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

y el resultado se suele escribir como $c|+\rangle + d|-\rangle$ para indicar que las coordenadas son c y d. El operador de evolución temporal definido formalmente por (hoja 3)

$$U(t) = \mathrm{Id} + \frac{1}{1!}\Big(-\frac{it}{\hbar}\Big)H + \frac{1}{2!}\Big(-\frac{it}{\hbar}\Big)^2 H^2 + \frac{1}{3!}\Big(-\frac{it}{\hbar}\Big)^3 H^3 + \dots$$

que se denota con $e^{-itH/\hbar}$, es ahora realmente $e^{-itH/\hbar}$ si hacemos la exponencial de la matriz (hoja 1). Entonces lo que pide el ejercicio anterior es que después de que calcules $U(t)$, se lo apliques a la función de ondas inicial $|\Psi(x,0)\rangle = |+\rangle$ que es simplemente el vector $\vec{e}_1$ de la base canónica de $\mathbb{C}^2$. Por la conservación de la probabilidad, el estado permanecerá normalizado a lo largo de su evolución.

2) ¿En qué tiempos obtendremos $|-\rangle$ siempre que midamos? ¿En qué tiempos obtendremos $|+\rangle$ con una probabilidad del 75 %?

3) Si partiéramos de un "imán" en la dirección x no debería ocurrir nada, porque ya está alineado con el campo magnético. Compruébalo matemáticamente, es decir, toma como condición inicial $|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$ y explica en qué sentido el estado correspondiente es "constante".

4) Si excluimos el caso de las condiciones iniciales (normalizadas) $|x\pm\rangle$, la probabilidad de medir $|+\rangle$ es una función periódica no constante del tiempo. Calcula la frecuencia (número de oscilaciones por unidad de tiempo). Dibuja gráficas de esta probabilidad para $\gamma = B = 2$ bajo diferentes condiciones iniciales y estudia cómo se va deformando según nos acercamos a $|x+\rangle$ y a $|x-\rangle$.

En el problema anterior y alguno de los que siguen es muy fácil despistarse con lo siguiente: El periodo (mínimo) de $\cos^2 x$ <u>no</u> es 2π.

[3] Aquí y en lo sucesivo, estoy usando, como es habitual, la abreviatura $|+\rangle = |z+\rangle$ y $|-\rangle = |z-\rangle$.

Si esto del operador de evolución temporal tiene sentido, debería dar lo mismo que resolver "a mano" la ecuación de Schrödinger.

5) Convéncete de que la ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano H de (1) y una función de ondas genérica[4] $|\Psi(t)\rangle = f(t)|+\rangle + g(t)|-\rangle$, bajo la condición inicial del primer problema es

$$\begin{cases} f'(t) = i\dfrac{\gamma B}{2}g(t) \\ g'(t) = i\dfrac{\gamma B}{2}f(t) \end{cases} \qquad \text{con} \qquad f(0)=1, \quad g(0)=0.$$

Resuélvela sustituyendo la derivada de una de las ecuaciones en la derivada de la otra y comprueba que se llega al mismo resultado que has obtenido antes.

Si en vez de un campo magnético en la dirección x lo tenemos en la dirección y ó z, habría que reemplazar σ_x en (1) por σ_y o σ_z. En general, el campo magnético viene dado por un vector de tres coordenadas $\vec{B} = (B_1, B_2, B_3)$, llamado *inducción magnética*. Cuando sumamos las contribuciones de la energía en las tres direcciones, aparece de manera natura el Hamiltoniano que generaliza (1)

$$H = -\gamma \sum_{j=1}^{3} B_j S_j = -\frac{\gamma\hbar}{2}\sum_{j=1}^{3} B_j\sigma_j. \tag{2}$$

En el ejemplo que hemos estado analizando, $\vec{B} = (B, 0, 0)$ y hemos visto que las soluciones y las probabilidades oscilaban con cierta frecuencia. Vamos a ver ahora que eso corresponde a la preceśion de la que te hablé al principio. Por la orientación convencional habitual de las coordenadas esféricas es mejor considerar para ello el caso $\vec{B} = (0, 0, B)$.

6) Prueba que para $\vec{B} = (0, 0, B)$, si partimos de un estado inicial que tiene coordenadas esféricas (θ_0, ϕ_0) en la esfera de Bloch, entonces al evolucionar el estado, θ permanece constante y ϕ es una función lineal del tiempo. ¿Ves que esto corresponde al movimiento como el de una peonza describiendo el cono $\theta = \theta_0$?

Los Hamiltonianos que actúan sobre $\mathbb{C}^2$ se dice que corresponden a sistemas de dos estados. el ejemplo tipo es el espín y lo de los dos estados, la dimensión de $\mathbb{C}^2$, viene de $|+\rangle$ y $|-\rangle$ que son los vectores de la base canónica. Hay otros ejemplos, como veremos a continuación.

Recuerda que $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ son una base (sobre $\mathbb{R}$) de todas las matrices hermíticas con traza nula. Si añadimos la identidad, que a veces se denota con σ_0, por razones obvias, tendremos una base de todas las matrices hermíticas. Sabemos por otra parte que los Hamiltonianos son

[4] Para abreviar, no pongo la dependencia en la posición x, porque H no actúa sobre ella.

operadores hermíticos, entonces todos Hamiltonianos de sistemas de dos estados son de la forma (2) salvo sumar múltiplos de la identidad.

Un ejemplo que no viene del espín es el de las oscilaciones de la molécula de amoniaco. Dicha molécula está compuesta por tres átomos de hidrógeno y uno de nitrógeno. Pueden estar colocados en dos posiciones relativas, esencialmente con el nitrógeno arriba o con el nitrógeno abajo. Aunque no tenga que ver con el espín, las denotaremos $|+\rangle$ y $|-\rangle$, respectivamente. El Hamiltoniano es

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta/2 \\ -\Delta/2 & E_0 \end{pmatrix}$$

donde $\Delta = 1{,}5817 \cdot 10^{-23}$ en el sistema internacional de unidades.

7) ¿Cuál es la diferencia entre los niveles de energía de los dos estados de la molécula de amoniaco? Calcula cuántas veces por segundo oscila. Indicación: Recuerda que los niveles de energía son los autovalores del Hamiltoniano y $\hbar = 1{,}0546 \cdot 10^{-34}$ en el sistema internacional.

8) Ahora estudia el problema general, si tenemos un Hamiltoniano genérico de un sistema de dos estados $H = \sum_{j=0}^{3} a_j \sigma_j$, con $\sigma_0 = \mathrm{Id}$, halla una fórmula en términos de los coeficientes a_j que dé cuántas veces oscila el sistema por unidad de tiempo. Seguramente te vendrá bien recordar lo que hiciste en la primer hoja.

Con esto hemos agotado todos los sistemas de dos estados cuando H no depende del tiempo. Lo que hace un poco más complicado el modelo de la resonancia magnética nuclear, es que se aplican campos magnéticos variables para que "resuenen" con el espín (recuerda mi articulito) y por tanto H sí depende del tiempo. Esto se relaciona con la pregunta ingenua de si existe una fórmula general fácil para resolver las EDOs lineales con matrices quizá no constantes. Esto resulta ser más profundo de lo que parece.

Como sería muy largo meterlo todo en la misma hoja, paramos aquí. Prefiero que no escribas nada hasta que no terminemos el tema. Para comprobar que no te estás equivocando sólo te pido que me mandes los resultados de **2)** y las frecuencias que salen en **4)**, **7)** y **8)**. Me lo puedes enviar en un mensaje o en un PDF, como quieras.

Referencias

[Cha16] F. Chamizo. Las ecuaciones de maxwell en plan fácil. `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2016.

[Wik16] Wikipedia. Precession — wikipedia, the free encyclopedia, 2016. [Online; accessed 10-November-2016].