Mecânica Quântica I

LEFT, 3º ano 2021-2022
Filipe Joaquim, Bernardo Gonçalves, João Penedo

Série 3 - Formalismo Geral da Mecânica Quântica

Problema 3.1. Identidades de Comutadores

Mostre que:

i) $[A+B, C] = [A, C] + [B, C]$.

ii) $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$.

iii) $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ (conhecida como identidade de Jacobi).

iv) $[x^n, p] = i\hbar n x^{n-1}$.

v) $[f(x), p] = i\hbar \frac{df}{dx}$, para qualquer função $f(x)$.

vi) Se A e B são hermíticos, então $i[A, B]$ também é hermítico.

vii) $e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + ...$

Problema 3.2. Observáveis compatíveis

Mostre que, se $\hat{P}$ e $\hat{Q}$ apresentam um conjunto completo de funções próprias comuns, então $[\hat{P}, \hat{Q}]f = 0$ para qualquer função no espaço de Hilbert e, portanto, os operadores comutam. Aos observáveis correspondentes, P e Q, chamam-se observáveis compatíveis.

Problema 3.3. Espaço vectorial tridimensional

Considere um espaço vectorial tridimensional com uma base ortonormal $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$. Os kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são dados por:

$$|\alpha\rangle = i\,|1\rangle - 2\,|2\rangle - i\,|3\rangle \ , \ |\beta\rangle = i\,|1\rangle + 2\,|3\rangle \ . \tag{3.1}$$

i) Qual é a forma de $\langle\alpha|$ e $\langle\beta|$ (em termos da base dual)?

ii) Determine $\langle\alpha|\beta\rangle$ e $\langle\beta|\alpha\rangle$, e verifique que $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$.

iii) Encontre os elementos de matriz do operador $\hat{A} = |\alpha\rangle\langle\beta|$, nesta base, e construa a matriz correspondente. A matriz obtida é hermítica? Poderia esta matriz representar um observável?

Respostas: i) $\langle\alpha| = -i\,\langle 1| - 2\,\langle 2| + i\,\langle 3|$, $\langle\beta| = -i\,\langle 1| + 2\,\langle 3|$; ii) $\langle\alpha|\beta\rangle = 1 + 2i$; iii) $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2i \\ 2i & 0 & -4 \\ -1 & 0 & -2i \end{pmatrix}$; a matriz obtida não é hermítica.

Problema 3.4. Notação de Dirac 1

Considere um estado dado em termos de três vectores ortonormais $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$, e $|\phi_3\rangle$ da seguinte forma:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}}\,|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}\,|\phi_3\rangle \ , \tag{3.2}$$

onde $|\phi_n\rangle$ são estados próprios de um operador $\hat{B}$ tal que $\hat{B}\,|\phi_n\rangle = (3n^2 - 1)\,|\phi_n\rangle$, com $n = 1, 2, 3$.

i) Determine a norma do estado $|\psi\rangle$.

ii) Calcule o valor esperado de $\hat{B}$ para o estado $|\psi\rangle$.

iii) Calcule o valor esperado de $\hat{B}^2$ para o estado $|\psi\rangle$.

Respostas: i) $\langle\psi|\psi\rangle = 3/5$; ii) $\langle\hat{B}\rangle_\psi = 15$; iii) $\langle\hat{B}^2\rangle_\psi = 293$.

Problema 3.5. Notação de Dirac 2

O estado inicial de um sistema é dado em termos de quatro estados próprios da energia, ortonormais, $|\phi_n\rangle$, com $n = 1, 2, 3, 4$:

$$|\psi_0\rangle = |\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\phi_1\rangle + \frac{1}{2}\,|\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\,|\phi_3\rangle + \frac{1}{2}\,|\phi_4\rangle\ . \tag{3.3}$$

i) Sendo os quatro kets vectores próprios do operador Hamiltoniano $\hat{H}$ com energias E_1, E_2, E_3 e E_4, respectivamente, encontre o estado $|\psi(t)\rangle$.

ii) Quais são os possíveis resultados de uma medição da energia do sistema? E com que probabilidades?

iii) Qual o valor esperado do Hamiltoniano do sistema para $t = 0$ e para $t = 10\ s$.

Respostas: i) $|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{4} c_n e^{-iE_n t/\hbar}|\phi_n\rangle$, com $c_n = \{1/\sqrt{3}, 1/2, 1/\sqrt{6}, 1/2\}$; ii) $P(E_1) = 1/3$, $P(E_2) = 1/4$, $P(E_3) = 1/6$ e $P(E_4) = 1/4$; iii) $\langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = E_1/3 + E_2/4 + E_3/6 + E_4/4$.

Problema 3.6. Operador L_z^2

Considere o seguinte operador:

$$\hat{Q} = \frac{d^2}{d\phi^2}\,, \tag{3.4}$$

onde ϕ é o ângulo azimutal em coordenadas polares. Este operador pode ser interpretado como o operador L_z^2, em que L_z é o momento angular segundo a direção z. Considere funções periódicas $f(\phi + 2\pi) = f(\phi)$.

i) O operador $\hat{Q}$ é hermítico?

ii) Encontre as funções e os valores próprios do operador $\hat{Q}$. O espectro é degenerado?

Respostas: i) Sim, $\hat{Q}$ é hermítico; ii) Funções próprias: $f_\pm(\phi) = Ae^{\pm\sqrt{q}\phi}$; Valores próprios: $q = -n^2$, $(n = 0, 1, 2, ...)$.

Problema 3.7. Equação de Heisenberg

Aplique a Equação de Heisenberg:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{Q}]\rangle + \left\langle \frac{\partial\hat{Q}}{\partial t} \right\rangle\,, \tag{3.5}$$

aos seguintes casos: i) $Q = \langle\psi|\psi\rangle$; ii) $Q = H$; iii) $Q = x$; iv) $Q = p$. Comente os resultados que obteve.

Respostas: i) $\frac{d}{dt}\langle\psi|\psi\rangle = 0$; ii) $\frac{d}{dt}\langle H\rangle = 0$ ou $\frac{d}{dt}\langle H\rangle = \left\langle\frac{\partial H}{\partial t}\right\rangle$; iii) $\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \langle p\rangle/m$; $\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\left\langle\frac{dV}{dx}(x)\right\rangle$.

Problema 3.8. Electrão num campo eléctrico oscilante

Um electrão num campo eléctrico oscilante é descrito pelo seguinte Hamitoniano:

$$H = \frac{p^2}{2m} - (eE_0 \cos\omega t)x\,. \tag{3.6}$$

Utilize os resultados do exercício anterior para calcular expressões para a dependência temporal de $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, e $\langle H\rangle$. Resolva as equações do movimento que obteve. Escreva as soluções em termos de $\langle x\rangle_0$ e $\langle p\rangle_0$, os valores esperados para $t = 0$.

Respostas: $\langle p\rangle = \frac{eE_0 \sin\omega t}{\omega} + \langle p\rangle_0$; $\langle x\rangle = \langle x\rangle_0 + \frac{\langle p\rangle_0}{m}t - \frac{eE_0}{m\omega^2}(\cos\omega t - 1)$; $\frac{d}{dt}\langle H\rangle = eE_0\omega\sin\omega t\,\langle x\rangle$.

Problema 3.9. Sistema de três níveis

O Hamiltoniano de um certo sistema de três níveis é representado pela matriz

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \tag{3.7}$$

Dois observáveis, A e B, são representados pelas matrizes

$$A = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},\; B = \mu \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.8}$$

Os parâmetros ω, λ, e μ são números reais positivos.

i) Encontre os valores e os vectores próprios, estes últimos convenientemente normalizados, de H, A e B. Utilize as funções Eigenvalues, Eigenvectors e Normalize para verificar os seus resultados no *Mathematica*.

ii) Suponha que o sistema começa no estado genérico representado por

$$|\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}, \tag{3.9}$$

onde $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$. Encontre os valores esperados, em $t = 0$, de H, A e B.

iii) Qual é a expressão para $|\mathcal{S}(t)\rangle$? Se medir a energia deste estado, num determinado instante t, que valores pode obter? E com que probabilidades? Repita para os observáveis A e B. Confirme que a soma das probabilidades é sempre 1.

Respostas: i) $E_1 = \hbar\omega$, $E_2 = E_3 = 2\hbar\omega$; $|h_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|h_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|h_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$; $a_1 = 2\lambda$, $a_2 = \lambda$, $a_3 = -\lambda$; $|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $|a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|a_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$; $b_1 = 2\mu$, $b_2 = \mu$, $b_3 = -\mu$; $|b_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $|b_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$; ii) $\langle H\rangle = \hbar\omega\left(|c_1|^2 + 2|c_2|^2 + 2|c_3|^2\right)$, $\langle A\rangle = \lambda\left(c_1^* c_2 + c_2^* c_1 + 2|c_3|^2\right)$, $\langle B\rangle = \mu\left(2|c_1|^2 + c_2^* c_3 + c_3^* c_2\right)$

iii) $|\mathcal{S}(t)\rangle = e^{-2i\omega t}\begin{pmatrix} c_1 e^{i\omega t} \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$; H: $h_1 = \hbar\omega, P = |c_1|^2$; $h_2 = h_3 = 2\hbar\omega, P = |c_2|^2 + |c_3|^2$;
A: $a_1 = 2\lambda, P = |c_3|^2$; $a_2 = \lambda, P = \frac{1}{2}\left(|c_1|^2 + |c_2|^2 + c_1^* c_2 e^{-i\omega t} + c_2^* c_1 e^{i\omega t}\right)$;
$a_3 = -\lambda, P = \frac{1}{2}\left(|c_1|^2 + |c_2|^2 - c_1^* c_2 e^{-i\omega t} - c_2^* c_1 e^{i\omega t}\right)$;
B: $b_1 = 2\mu, P = |c_1|^2$; $b_2 = \mu, P = \frac{1}{2}\left(|c_1|^2 + |c_2|^2 + c_1^* c_2 + c_2^* c_1\right)$; $b_3 = -\mu, P = \frac{1}{2}\left(|c_2|^2 + |c_3|^2 - c_2^* c_3 - c_3^* c_2\right)$.

Problema 3.10. Medidas sequenciais

Um operador $\hat{A}$, que representa o observável A, possui dois estados próprios normalizados ψ_1 e ψ_2, com valores próprios a_1 e a_2, respectivamente. O operador $\hat{B}$, representando o observável B, tem dois estados próprios normalizados ϕ_1 e ϕ_2, com valores próprios b_1 e b_2. Os estados próprios encontram-se relacionados da seguinte forma

$$\psi_1 = \frac{3\phi_1 + 4\phi_2}{5}\ ,\ \psi_2 = \frac{4\phi_1 - 3\phi_2}{5}\ . \tag{3.10}$$

Vão-se efectuar algumas medições. Responda às seguintes questões.

i) O observável A é medido e obtém-se a_1. Qual é o estado do sistema (imediatamente) após esta medição?

ii) Se se medir B após a medição da alínea anterior, quais são os resultados possíveis? E com que probabilidades?

iii) Após a medição de B, volta-se a medir A. Qual é, agora, a probabilidade de obter novamente a_1?

Respostas: i) ψ_1; ii) b_1 com probabilidade $= 9/25$ ou b_2 com probabilidade $= 16/25$; iii) 0.5392.

Problema 3.11. Teorema do Virial

Utilize a equação de Heisenberg para mostrar que

$$\frac{d}{dt}\langle xp\rangle = 2\langle T\rangle - \left\langle x\frac{dV}{dx}\right\rangle\ , \tag{3.11}$$

onde T é a energia cinética. Explique por que razão, para um estado estacionário, a equação anterior se reduz a

$$2\langle T\rangle = \left\langle x\frac{dV}{dx}\right\rangle\ . \tag{3.12}$$

Este é o conhecido teorema do virial. Use-o para provar que $\langle T\rangle = \langle V\rangle$ para estados estacionários do oscilador harmónico.

Problema 3.12. Valores esperados no oscilador harmónico

Encontre os valores esperados $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle x^2\rangle$ e $\langle p^2\rangle$ para qualquer um dos estados estacionários do oscilador harmónico utilizando a notação de Dirac, *i.e.* determine as quantidades pedidas para um estado n do oscilador harmónico. Verifique que o princípio da incerteza é satisfeito, assim como o teorema do virial. Compare os seus resultados com os obtidos no Problema 2.13 da Série 2.

Respostas: $\langle x\rangle = \langle p\rangle = 0$, $\langle x^2\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}$, $\langle p^2\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)m\hbar\omega$.

Problema 3.13. Elementos de matriz do oscilador harmónico

Encontre os elementos de matriz $\langle n|x|n'\rangle$ e $\langle n|p|n'\rangle$ na base ortonormal dos estados estacionários do oscilador harmónico. Os elementos diagonais ($n = n'$) foram calculados no problema anterior. Construa as matrizes correspondentes, X e P. Mostre ainda que $(1/2m)P^2 + (m\omega^2/2)X^2 = H$, sendo que H é diagonal nesta base. A que correspondem os elementos da matriz H?

Respostas: $\langle n|x|n'\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n'}\delta_{n,n'-1})$, $\langle n|p|n'\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\sqrt{n}\delta_{n',n-1} - \sqrt{n'}\delta_{n,n'-1})$.

Problema 3.14. Enigma no oscilador harmónio

Considere um oscilador harmónico num determinado estado de tal forma que uma medida da energia pode resultar em $(1/2)\hbar\omega$ ou $(3/2)\hbar\omega$, com igual probabilidade. Qual é o maior valor possível de $\langle p\rangle$ neste estado? Se esta quantidade assumir o seu valor máximo em $t = 0$, qual pode ser a forma de $\Psi(x,t)$?