UNIVERSIDADE DO MINHO

Física Quântica I / Mecânica Quântica

Teste 2 (3 de junho 2022)

Duração: 2h 00m

Soluções comentadas

por Vitor M. Pereira

Instruções

1. Escreva o seu **número** de identificação de aluno nas folhas de resposta que submeter.
2. Este enunciado tem **quatro (4)** páginas (incluindo esta) e contém **quatro** (4) problemas.
3. Responda a **todas** as questões, escrevendo **apenas** nas folhas de resposta. No final submeterá apenas as folhas de resposta e guardará o enunciado consigo.
4. Neste teste é permitido a cada aluno assistir-se de uma folha individual com **notas manuscritas por si**, as quais podem ocupar as 2 páginas de **apenas uma folha A4**. As folhas de notas serão inspecionadas no decorrer do Teste. Não são permitidos quaisquer outros materiais ou dispositivos de apoio.
5. A pontuação (percentagem) de cada questão é indicada no cabeçalho de cada problema.
6. Só será permitida a saída da sala depois de decorridos os primeiros 30 minutos do teste.

Responda apenas nas folhas de resposta.

Problema 1 — 40 % [5% cada]

Considere o movimento de uma partícula de massa m, em uma dimensão (1D), sob influência do potencial seguinte, que é constante por partes:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0 \\ -U, & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases} \qquad (a > 0,\ U > 0).$$

1. Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo (ESIT) para um potencial genérico $V(x)$, em 1D.

2. Sem efetuar qualquer cálculo, indique o intervalo de energias em que este potencial pode *eventualmente* admitir estados estacionários ligados. (*Facilita esquematizar o potencial.*)

3. Considerando o caso de **energias negativas** ($E < 0$) e apenas soluções físicas, escreva a solução *geral* (antes de impor qualquer condição fronteira) da ESIT em cada uma das *três* regiões definidas pelo potencial acima. Explicite quaisquer constantes que definir em termos da energia (por exemplo, se definir algum k, λ, etc.).

4. Que condições fronteira devem satisfazer as funções de onda para este potencial nos pontos $x = 0$ e $x = a$?

5. Obtenha (mas não tente resolver analiticamente) a equação transcendente que determina as energias dos estados ligados neste potencial.

6. Mostre que só haverá estados ligados se $U \geq U_c$, onde U_c representa a profundidade mínima do poço para que haja pelo menos um estado ligado. Determine esse valor crítico, U_c. (*Sugestão: analise graficamente a existência de soluções da equação obtida acima.*)

7. Que energia terá o estado ligado da partícula quando tivermos exatamente $U = U_c$?

8. Considerando agora o caso de **energias positivas** ($E > 0$), que valor tem o coeficiente de reflexão, R, para partículas provenientes da direita (de $x = +\infty$) com energia positiva? Justifique. (*Não requer cálculos explícitos.*)

Solução

1. A equação pretendida é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\,\varphi(x) = E\,\varphi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \varphi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\big[E - V(x)\big]\,\varphi(x),$$

   onde $\varphi''(x) \equiv d^2\varphi(x)/dx^2$ pode ser usado como notação mais simples para a 2ª derivada.

2. A existirem estados ligados, eles estarão associados a energias no intervalo $-U < E < 0$, porque é neste intervalo que existe um poço de potencial (classicamente, a partícula estaria localizada para qualquer energia neste intervalo).

3. A solução geral da ESIT para $-U < E < 0$ compatível com o requisito de ser normalizável (soluções físicas) é

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ A\sin(kx) + B\cos(kx), & 0 \leq x \leq a \\ Ce^{-\lambda x} & x > a \end{cases},$$

onde as constantes k e λ são definidas em termos da energia da partícula como

$$k \equiv \sqrt{\frac{2m(E+U)}{\hbar^2}}, \quad \lambda \equiv \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

e as restantes constantes A, B e C são determinadas pelas condições fronteira e/ou de continuidade.

4. A função de onda dever ser contínua em todo o espaço. Logo, as soluções da ESIT devem satisfazer as condições

$$\varphi(0^-) = \varphi(0^+) \qquad \text{e} \qquad \varphi(a^-) = \varphi(a^+).$$

Como o potencial é infinito para $x < 0$, isso implica que $\varphi(x) = 0$ em toda essa região. Daí resulta que, no caso específico deste potencial, a condição em $x = 0$ é concretamente

$$\varphi(0) = 0.$$

Além disso, as soluções terão derivada contínua sempre que haja uma descontinuidade finita do potencial. Isso implica que

$$\varphi'(a^-) = \varphi'(a^+).$$

Em resumo, as condições são

$$\boxed{\varphi(0^-) = \varphi(0^+) = 0, \qquad \varphi(a^-) = \varphi(a^+), \qquad \varphi'(a^-) = \varphi'(a^+)}.$$

5. A equação pretendida resulta de impor as condições de continuidade referidas acima:

$$\begin{aligned} \varphi(0) = 0 : &\qquad A\sin(0) + B\cos(0) = 0 \quad \longrightarrow \quad B = 0. \\ \varphi(a^-) = \varphi(a^+) : &\qquad A\sin(ka) + \cancelto{0}{B}\cos(ka) = Ce^{-\lambda a} \quad \longrightarrow \quad A\sin(ka) = Ce^{-\lambda a}. \\ \varphi'(a^-) = \varphi'(a^+) : &\qquad kA\cos(ka) - k\cancelto{0}{B}\sin(ka) = -\lambda Ce^{-\lambda a} \quad \longrightarrow \quad kA\cos(ka) = -\lambda Ce^{-\lambda a}. \end{aligned}$$

Temos portanto que satisfazer simultaneamente as duas equações

$$A\sin(ka) = Ce^{-\lambda a} \qquad \text{e} \qquad kA\cos(ka) = -\lambda Ce^{-\lambda a},$$

que são duas equações homogéneas para as incógnitas A e C, como vemos se as escrevermos explicitamente na forma

$$\begin{cases} A\ \sin(ka) - C\ e^{-\lambda a} = 0 \\ A\ k\cos(ka) + C\ \lambda e^{-\lambda a} = 0 \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} \sin(ka) & -e^{-\lambda a} \\ k\cos(ka) & \lambda e^{-\lambda a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ C \end{bmatrix} = 0.$$

Dividindo a segunda equação pela primeira, obtemos

$$\frac{kA\cos(ka)}{A\sin(ka)} = \frac{-\lambda Ce^{-\lambda a}}{Ce^{-\lambda a}} \quad \longrightarrow \quad k\cot(ka) = -\lambda.$$

Esta condição é necessária para que existam soluções não triviais da ESIT (soluções com $A \neq 0$ e $C \neq 0$) com energia negativa, e determina os valores discretos de energia que originam tais soluções. A equação pretendida é então

$$\boxed{-k\cot(ka) = \lambda} \qquad \text{onde} \qquad k \equiv \sqrt{\tfrac{2m(E+U)}{\hbar^2}}, \quad \lambda \equiv \sqrt{-\tfrac{2mE}{\hbar^2}}.$$

6. Temos de analisar em que condições (para que energias) a equação acima tem solução. Para facilitar essa análise é conveniente exprimir λ em termos de k:

$$\lambda^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mU}{\hbar^2} - k^2 \quad \longrightarrow \quad \lambda = \sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2} - k^2}$$

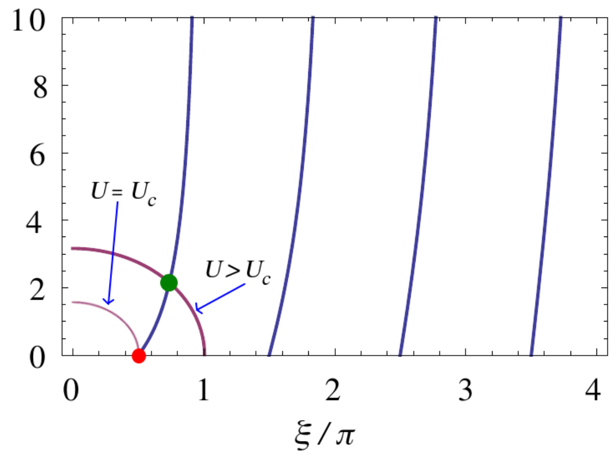
A equação pode então ser reescrita como

$$-k\cot(ka) = \sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2} - k^2}.$$

Podemos simplificar um pouco definindo $\xi \equiv ka$ e, multiplicando ambos os lados da equação acima por a, obtemos uma versão equivalente da equação transcendente, mas que é mais simples de analisar porque só depende da variável ξ.

$$\boxed{-\xi\cot\xi = \sqrt{\alpha^2 - \xi^2}} \qquad \text{onde} \qquad \alpha \equiv \sqrt{\frac{2mUa^2}{\hbar^2}}.$$

Podemos analisar a existência de soluções desta última equação visualizando graficamente a interseção das curvas da função $-\xi\cot\xi$ (lado esquerdo da equação) com a curva da função $\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}$ (lado direito). A figura abaixo mostra um exemplo, onde as curvas azuis representam os valores *positivos* da função $-\xi\cot\xi$.



Note-se que este gráfico **não** precisa de ser desenhado *com rigor* num computador ou calculadora para mostrarmos que existe um valor crítico de U abaixo do qual deixam de existir soluções. Basta considerarmos o seguinte:

(a) a função $\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}$, que surge no lado direito da equação transcendente, representa uma porção do círculo de raio α centrado na origem; esta função anula-se em $\xi = \alpha$ e é positiva no intervalo $0 \leq \xi < \alpha$; esta curva é representada a púrpura na imagem acima para dois valores de U;

(b) como a função $\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}$ nunca é negativa, só haverá soluções quando $-\xi \cot \xi$ for positivo ou zero; é por isso que basta analisar os valores positivos da função $-\xi \cot \xi$;

(c) como $\xi \equiv ka \geq 0$, para termos $-\xi \cot \xi \geq 0$ precisamos que $-\cot \xi \geq 0$, ou seja, que $\cot \xi \leq 0$;

(d) a função $\cot \xi$ toma o valor $+\infty$ em $\xi = 0$ e decresce monotonamente até $-\infty$ em $\xi = \pi$, passando por zero em $\xi = \pi/2$; portanto, a situação $\cot \xi \leq 0$ só se verifica se $\xi \geq \pi/2$; isto é verificado no gráfico acima em que vemos a curva azul aparecer (tomar valores positivos) apenas para $\xi \geq \pi/2$.

Portanto, para que haja, pelo menos, uma interseção entre as curvas $\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}$ e $-\xi \cot \xi$ é necessário termos $\alpha \geq \pi/2$. Por exemplo, na imagem acima o ponto verde marca essa interseção para um determinado valor de U; ao diminuirmos o parâmetro U, a interseção das duas curvas ocorre a valores de ξ cada vez menores, até à situação limite assinalada pelo ponto vermelho: se U for reduzido abaixo do valor que resulta na curva marcada "$U = U_c$", deixará de haver interseção entre as curvas púrpura e azul. Como cada curva representa um dos lados da equação transcendente, a ausência de interseção significa que essa equação não tem solução.

Recordando a definição de α introduzida acima, a condição $\alpha \geq \pi/2$ significa que só existirão soluções se tivermos

$$\sqrt{\frac{2mUa^2}{\hbar^2}} \geq \frac{\pi}{2} \qquad \longrightarrow \qquad U \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}.$$

Esta condição define um valor crítico do parâmetro U,

$$\boxed{U_c \equiv \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}}$$

abaixo do qual não há qualquer estado ligado.

7. De acordo com o discutido na questão anterior, $U = U_c$ representa o caso limite em que a solução da equação transcendente ocorre precisamente para $\xi = \pi/2$, ou seja, recordando a definição de ξ feita na questão anterior,

$$\xi = \frac{\pi}{2} \quad \Leftrightarrow \quad ka = \frac{\pi}{2} \quad \xrightarrow{k \to \sqrt{\frac{2m(E+U_c)}{\hbar^2}}} \quad E = 0.$$

Nota: Este é o resultado esperado qualitativamente, se recordarmos que as energias dos estados ligados se vão aproximando do topo do poço de potencial à medida que a profundidade do poço (ou seja, o valor de U) diminui, e que neste caso o topo do poço de potencial ocorre para $E = 0$.

8. O coeficiente de reflexão será $R = 1$ para qualquer energia positiva. Qualitativamente, isto acontece porque o potencial é infinito em toda a região $x < 0$, o que significa que a distribuição de probabilidade é estritamente nula aí para todas as energias. Portanto, toda a densidade de probabilidade incidente será refletida pelo potencial na região $0 \leq x \leq a$ e propagará de volta em direção a $x = +\infty$.

Podemos também ver que é assim formalmente, recordando que o coeficiente de reflexão é a razão entre as correntes de probabilidade refletida e incidente:

$$R \equiv \frac{\mathcal{J}_r}{\mathcal{J}_i},$$

e que, por conservação da corrente de probabilidade,

$$\mathcal{J}_r + \mathcal{J}_t = \mathcal{J}_i \qquad \xrightarrow{\mathcal{J}_t=0} \qquad \mathcal{J}_r = \mathcal{J}_i.$$

$\mathcal{J}_t = 0$ porque a região de transmissão, se existisse, seria a região $x < 0$. Mas, como a função de onda é nula nesta região, então $\mathcal{J}_t = 0$.

Nota final: As questões relativas aos estados ligados deste problema (para $E < 0$), incluindo as questões 5 e 6, foram anteriormente resolvidas para o primeiro dos 2 potenciais considerados no Problema 3 da Folha de Problemas 11. Trata-se da mesma equação transcendente, que aparece também como condição para as soluções ímpares na discussão do potencial que fizemos na Lição 18 (ver p. L18-5 a L18-7).

Problema 2 — 25 % [5 + 5 + 10 + 5]

Os operadores Hamiltoniano e de "destruição" para o potencial harmónico em 1D são

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2, \qquad a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{P}.$$

1. Como se escreve $\hat{H}$ em termos dos operadores de criação e destruição, e quais são as energias, E_n, dos estados ligados de uma partícula neste potencial? (*Basta escrever, sem derivar ou mostrar.*)

2. Os autoestados normalizados de energia $|\varphi_n\rangle$ podem relacionar-se através dos operadores a e $a^\dagger$ segundo
$$a|\varphi_n\rangle = \gamma_n|\varphi_{n-1}\rangle, \qquad a^\dagger|\varphi_n\rangle = \mu_n|\varphi_{n+1}\rangle.$$
Indique quais são as constantes reais γ_n e μ_n que garantem a normalização dos autoestados.

3. Determine como varia no tempo o valor esperado do momento, $\langle\hat{P}\rangle$, quando o estado da partícula em $t = 0$ é dado por
$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle.$$
Apresente o resultado na forma mais simples possível como função de t.

4. Se a partícula se movesse, não em 1D, mas em 3D sob influência do potencial harmónico e isotrópico dado por
$$\hat{V} = \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{X}^2 + \hat{Y}^2 + \hat{Z}^2),$$
qual seria a energia do primeiro estado excitado e a respetiva degenerescência?

Solução

1. O Hamiltoniano e os seus autovalores são, respetivamente,
$$\hat{H} = \hbar\omega\Big(a^\dagger a + \frac{1}{2}\Big), \qquad E_n = \hbar\omega\Big(n + \tfrac{1}{2}\Big), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

2. As relações normalizadas são
$$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle, \qquad a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle,$$
o que significa que
$$\gamma_n = \sqrt{n}, \qquad \mu_n = \sqrt{n+1}.$$

3. Para determinar a dependência temporal do momento,
$$\langle\hat{P}\rangle = \langle\psi(t)|\hat{P}|\psi(t)\rangle$$
são necessárias duas coisas: obter o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ e exprimir $\hat{P}$ em função dos operadores a e $a^\dagger$, para assim podermos calcular os elementos de matriz necessários de forma simples. Partindo do estado inicial
$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle,$$

no instante t o sistema será descrito pelo estado

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_1t/\hbar}|\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_2t/\hbar}|\varphi_2\rangle,$$

onde as energias do primeiro e segundo estados excitados são

$$E_1 = \hbar\omega\Big(n+\tfrac{1}{2}\Big)_{n=1} = \frac{3\hbar\omega}{2}, \qquad E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2}.$$

Partindo da definição dada no texto do problema,

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{P}, \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{P},$$

podemos exprimir o operador momento à custa dos operadores a e $a^\dagger$ como

$$\hat{P} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,\big(a - a^\dagger\big).$$

Assim, o valor esperado no instante t será

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\hat{P}|\psi(t)\rangle &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\Big(\langle\psi(t)|a|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|a^\dagger|\psi(t)\rangle\Big)\\ &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\langle\psi(t)|a|\psi(t)\rangle + \text{complexo conjug.}\end{aligned}$$

Expandindo o valor esperado que nos falta determinar:

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|a|\psi(t)\rangle =&\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}e^{iE_1t/\hbar}\langle\varphi_1| + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{iE_2t/\hbar}\langle\varphi_2|\Big)\, a\,\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_1t/\hbar}|\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_2t/\hbar}|\varphi_2\rangle\Big)\\ =&\frac{1}{2}e^{iE_1t/\hbar}e^{-iE_2t/\hbar}\langle\varphi_1|a|\varphi_2\rangle + 0 + 0 + 0\\ =&\frac{1}{2}e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\underbrace{\langle\varphi_1|a|\varphi_2\rangle}_{\sqrt{2}}\\ =&\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t/\hbar}.\end{aligned}$$

Substituindo na expressão acima,

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\hat{P}|\psi(t)\rangle &= -i\frac{\sqrt{m\hbar\omega}}{2}e^{-i\omega t/\hbar} + \text{complexo conjug.}\\ &= -i\frac{\sqrt{m\hbar\omega}}{2}e^{-i\omega t/\hbar} + i\frac{\sqrt{m\hbar\omega}}{2}e^{i\omega t/\hbar}\\ &= -i\frac{\sqrt{m\hbar\omega}}{2}\big(e^{-i\omega t/\hbar} - e^{i\omega t/\hbar}\big)\\ &= -\sqrt{m\hbar\omega}\,\sin(\omega t).\end{aligned}$$

Em conclusão,

$$\boxed{\langle\psi(t)|\hat{P}|\psi(t)\rangle = -\sqrt{m\hbar\omega}\,\sin(\omega t).}$$

4. Nesse caso, o Hamiltoniano da partícula seria

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega X^2}_{\hat{H}^{(x)}} + \underbrace{\frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega Y^2}_{\hat{H}^{(y)}} + \underbrace{\frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega Z^2}_{\hat{H}^{(z)}},$$

que é um Hamiltoniano do tipo separável em coordenadas Cartesianas. Como discutido na Lição 20, o espectro de energias para este Hamiltoniano é

$$E_{lmn} = E_l + E_m + E_n = \hbar\omega\Big(l + \tfrac{1}{2}\Big) + \hbar\omega\Big(m + \tfrac{1}{2}\Big) + \hbar\omega\Big(n + \tfrac{1}{2}\Big) = \hbar\omega\Big(l + m + n + \tfrac{3}{2}\Big),$$

onde qualquer um dos números quânticos toma, independentemente, os valores $0, 1, 2, \ldots$ (Nesta expressão, E_l, E_m e E_n representam a regra de quantização de um oscilador harmónico 1D, associados ao movimento segundo cada uma das 3 direções Cartesianas.)

O estado fundamental é obtido para $l = m = n = 0$, a que corresponde a energia $E = 3\hbar\omega/2$. A energia imediatamente acima (primeiro estado excitado) obtém-se quando um dos números quânticos toma o valor 1 e os restantes são nulos. Essa energia é

$$E^{(1^{\underline{o}}\ \text{excitado})} = 5\hbar\omega/2.$$

Notamos que existem três combinações de números quânticos com este valor de energia:

$$E_{1,0,0} = E_{0,1,0} = E_{0,0,1} = 5\hbar\omega/2.$$

Isto significa que a degenerescência do 1º estado excitado é 3.

Problema 3 — 20 % [6 + 6 + 8]

Considere os estados normalizados $|l,m\rangle$, que são autoestados comuns aos operadores de momento angular $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$,

$$\hat{L}^2|l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2\,|l,m\rangle, \qquad \hat{L}_z|l,m\rangle = m\hbar\,|l,m\rangle,$$

e os operadores de escada $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$, cuja ação nesses autoestados é descrita pelas relações

$$\hat{L}_\pm|l,m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\,|l,m\pm 1\rangle.$$

1. O produto $\hat{L}_+\hat{L}_-$ é um operador Hermítico? Explique ou mostre porquê.

2. Calcule o comutador $[\hat{L}_+, \hat{L}_-]$.

3. Partindo do autoestado $|l,m\rangle = |2,1\rangle$, que é representado em coordenadas esféricas pelo harmónico esférico
$$Y_2^1(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,\sin\theta\cos\theta\,e^{i\phi},$$
calcule a função que representa o harmónico esférico $Y_2^2(\theta,\phi)$, apresentando-a na forma mais simples possível.

Nota: em coordenadas esféricas,

$$\hat{L}_x = i\hbar\left[\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right], \quad \hat{L}_y = i\hbar\left[-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right], \quad \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

Solução

Nota prévia: Como anunciado no decorrer do Teste, há uma gralha na expressão fornecida para a ação dos operadores de escada. A expressão correta deve ter um fator de $\hbar$:

$$\hat{L}_\pm|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\,|l,m\pm 1\rangle.$$

1. Um operador é Hermítico se for igual ao seu Hermítico conjugado. Notemos primeiro que
$$\hat{L}_+^\dagger = \left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)^\dagger = \hat{L}_x^\dagger - i\hat{L}_y^\dagger = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hat{L}_-,$$
porque $\hat{L}_x$ e $\hat{L}_y$ são Hermíticos. Do mesmo modo, temos $\hat{L}_-^\dagger = \hat{L}_+$. Portanto, tomando o Hermítico conjugado do produto,
$$\left(\hat{L}_+\hat{L}_-\right)^\dagger = \hat{L}_-^\dagger\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_+\hat{L}_- \quad \longrightarrow \quad \text{Hermítico.}$$

2. Recordando as relações de comutação entre as componentes de momento angular segundo as direções Cartesianas,
$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z,$$

o comutador pedido é

$$\begin{aligned}
\big[\hat{L}_+,\hat{L}_-\big] &= \big[\hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_x - i\hat{L}_y\big] \\
&= \big[\hat{L}_x,\hat{L}_x\big] + \big[\hat{L}_x,-i\hat{L}_y\big] + \big[i\hat{L}_y,\hat{L}_x\big] + \big[i\hat{L}_y,-i\hat{L}_y\big] \\
&= 0 - i\big[\hat{L}_x,\hat{L}_y\big] + i\big[\hat{L}_y,\hat{L}_x\big] + \big[\hat{L}_y,\hat{L}_y\big] \\
&= 0 - i\big[\hat{L}_x,\hat{L}_y\big] - i\big[\hat{L}_x,\hat{L}_y\big] + 0 \\
&= -2i\big[\hat{L}_x,\hat{L}_y\big] \\
&= 2\hbar\hat{L}_z.
\end{aligned}$$

3. O harmónico esférico $Y_2^2(\theta,\phi)$ é a função angular que descreve o estado $|2,2\rangle$. Este estado obtém-se do estado $|2,1\rangle$ através de uma aplicação do operador de escada $\hat{L}_+$:

$$\begin{gathered}
\hat{L}_+|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,|l,m+1\rangle \\
\downarrow \\
\hat{L}_+|2,1\rangle = \hbar\sqrt{2(2+1)-1(1+1)}\,|2,1\rangle = 2\hbar\,|2,2\rangle \\
\downarrow \\
|2,2\rangle = \tfrac{1}{2\hbar}\,\hat{L}_+|2,1\rangle \\
\downarrow \\
Y_2^2(\theta,\phi) = \tfrac{1}{2\hbar}\,\hat{L}_+Y_2^1(\theta,\phi).
\end{gathered}$$

Precisamos agora de explicitar o operador $\hat{L}_+$ em coordenadas esféricas. Usando a representação fornecida no problema para $\hat{L}_x$ e $\hat{L}_y$, obtemos

$$\begin{aligned}
\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y &= i\hbar\left[\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] + i^2\hbar\left[-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \\
&= \hbar\left[\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \\
&= \hbar\left[\big(\cos\phi + i\sin\phi\big)\frac{\partial}{\partial\theta} + i\Big(\frac{\cos\phi}{\tan\theta} + i\frac{\sin\phi}{\tan\theta}\Big)\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \\
&= \hbar e^{i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right].
\end{aligned}$$

Substituindo esta representação na expressão acima,

$$\begin{aligned}
Y_2^2(\theta,\phi) &= \tfrac{1}{2\hbar}\,\hat{L}_+Y_2^1(\theta,\phi) \\
&= \frac{1}{2}e^{i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right]Y_2^1(\theta,\phi) \\
&= \frac{1}{2}e^{i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\left[-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,\sin\theta\cos\theta\,e^{i\phi}\right] \\
&= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{i\phi}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\cos\theta\,e^{i\phi}\right] - i\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{i\phi}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\left[\sin\theta\cos\theta\,e^{i\phi}\right] \\
&= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\phi}\left[\cos^2\theta - \sin^2\theta\right] + \sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\phi}\cos^2\theta \\
&= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,\sin^2\theta\,e^{2i\phi}.
\end{aligned}$$

Portanto, o resultado é

$$\boxed{Y_2^2(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,\sin^2\theta\,e^{2i\phi}.}$$

Problema 4 15 % [5 + 5 + 5]

Considere o movimento de uma partícula *livre* com massa m em 1D. Denote os autoestados do operador momento como $|p\rangle$, e os autoestados do operador posição como $|x\rangle$, ou seja:

$$\hat{P}\,|p\rangle = p\,|p\rangle, \qquad \hat{X}\,|x\rangle = x\,|x\rangle, \qquad \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}.$$

1. Mostre que $|p\rangle$ são também autoestados do Hamiltoniano da partícula livre, e escreva as auto-energias correspondentes, E_p, em termos de p.

2. Partindo da expressão geral para a evolução temporal do vetor de estado,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,0)\,|\psi(0)\rangle,$$

mostre que, na base de posição, a função de onda no instante t se pode obter a partir da função de onda no instante $t = 0$ através da expressão

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x,x',t)\,\psi(x',0)\,dx',$$

e indique o que é a função $K(x,x',t)$ em termos de $\hat{U}(t,0)$.

3. Calcule explicitamente a função $K(x,x',t)$, que é uma função que depende de x, x' e t.

Resultados potencialmente úteis:

$$\hat{U}(t,0) = e^{-it\hat{H}/\hbar} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-iE_p t/\hbar} |p\rangle\langle p| \qquad \text{(decomposição espectral).}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha x^2 + i\beta x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{i\alpha}}\, e^{i\beta^2/(4\alpha)}, \qquad \int dx\,|x\rangle\langle x| = \hat{\mathbf{1}}, \qquad \int dp\,|p\rangle\langle p| = \hat{\mathbf{1}}.$$

Solução

1. O Hamiltoniano de uma partícula livre é

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}.$$

A sua ação num autoestado de $\hat{P}$ é, portanto, bastante simples:

$$\hat{H}|p\rangle = \frac{1}{2m}\hat{P}^2|p\rangle = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{E_p}|p\rangle$$

Isto significa que $|p\rangle$ é um autoestado do Hamiltoniano associado ao valor próprio (energia)

$$E_p = \frac{p^2}{2m}.$$

2. Uma vez que queremos um resultado onde figuram as funções de onda na base de posição, começamos por projetar a relação dada na base de posição,

$$\underbrace{\langle x|\psi(t)\rangle}_{\psi(x,t)} = \langle x|\hat{U}(t,0)\,|\psi(0)\rangle.$$

A forma de "fazermos aparecer" a função de onda inicial é introduzir uma das identidades fornecidas

$$\int dx'\,|x'\rangle\langle x'| = \hat{\mathbf{1}} \qquad \text{(resolução da identidade na base } |x\rangle\text{)},$$

da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\langle x|\psi(t)\rangle &= \langle x|\hat{U}(t,0)\,\hat{\mathbf{1}}\,|\psi(0)\rangle = \langle x|\hat{U}(t,0)\left(\int dx'\,|x'\rangle\langle x'|\right)|\psi(0)\rangle \\ &= \int dx'\,\langle x|\hat{U}(t,0)|x'\rangle\,\underbrace{\langle x'|\psi(0)\rangle}_{\psi(x',0)} = \int dx'\,\langle x|\hat{U}(t,0)|x'\rangle\,\psi(x',0).\end{aligned}$$

Esta expressão tem a forma pretendida,

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x,x',t)\,\psi(x',0)\,dx', \quad \text{onde} \quad \boxed{K(x,x',t) \equiv \langle x|\hat{U}(t,0)|x'\rangle}.$$

3. Na questão anterior concluímos que

$$K(x,x',t) = \langle x|\hat{U}(t,0)|x'\rangle.$$

Um dos resultados fornecidos no final do problema é a decomposição espectral do operador de evolução:

$$\hat{U}(t,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-iE_pt/\hbar}|p\rangle\langle p|.$$

Substituindo-a na expressão acima,

$$\begin{aligned}K(x,x',t) &= \langle x|\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-iE_pt/\hbar}|p\rangle\langle p|\right)|x'\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-iE_pt/\hbar}\langle x|p\rangle\,\langle p|x'\rangle \\ &\Big\downarrow \text{ subst. } \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar} \text{ que é dado no problema} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-iE_pt/\hbar}e^{ip(x-x')/\hbar} \\ &\Big\downarrow \text{ subst. } E_p = \frac{p^2}{2m} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{-ip^2t/(2m\hbar)}e^{ip(x-x')/\hbar}.\end{aligned}$$

Reparemos que este integral em p é do tipo fornecido no final do problema,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha x^2+i\beta x}dx = \sqrt{\frac{\pi}{i\alpha}}\,e^{i\beta^2/(4\alpha)},$$

(com a evidente substituição da variável de integração x por p para o nosso caso de interesse), onde as constantes α e β nesta fórmula correspondem, no nosso integral, a

$$\alpha \equiv \frac{t}{2m\hbar}, \qquad \beta \equiv \frac{x - x'}{\hbar}.$$

Resulta assim que

$$\begin{aligned} K(x, x', t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, e^{-ip^2 t/(2m\hbar)} e^{ip(x-x')/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\pi\hbar}{it}} \exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}\right] \\ &= \boxed{\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}\right].} \end{aligned}$$

— FIM DO TESTE —