UNIVERSIDADE DO MINHO

Física Quântica I / Mecânica Quântica

Exame Época Especial (20 de julho 2022)

Duração: 2h 30m

Soluções comentadas

por Vitor M. Pereira

Instruções

1. Escreva o seu número de identificação **neste enunciado** (na caixa abaixo) e **também** nas folhas de respostas que submeter.
2. Este enunciado tem **6** páginas (incluindo esta) e está organizado em **2** partes: a **Parte I** começa na pág. **3** e tem **10** questões de escolha múltipla; a **Parte II** começa na pág. **5** e contém **5** problemas.
3. Responda às questões da **Parte I diretamente na folha do enunciado**.
4. Responda às questões da **Parte II apenas nas folhas de resposta** fornecidas, **justificando** adequadamente ou apresentando os cálculos que efetuar. Não serão consideradas respostas ou anotações na folha do enunciado relativamente à Parte II.
5. No final, deverá **entregar** este **enunciado** juntamente com as **folhas de resposta**.
6. A pontuação (percentagem) de cada questão é indicada no cabeçalho de cada problema.
7. 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 exame. Não são permitidos quaisquer outros materiais ou dispositivos de apoio.
8. Só será permitida a saída da sala depois de decorridos os primeiros 30 minutos do exame.

Identificação (nº de aluno)

[– página deliberadamente em branco –]

Parte I (30%, 3% cada)

Assinale a resposta correta com $\boxed{\textbf{X}}$ diretamente nesta folha.

1) Qual das seguintes formas de apresentar a equação de Schrödinger está errada?

- [ ] A $\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$
- [x] B $\langle\psi|\hat{H} = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}\langle\psi|$
- [ ] C $\langle\psi|\hat{H} = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}\langle\psi|$
- [ ] D $-i\hat{H}|\psi\rangle = \hbar \dfrac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$

2) Para uma partícula em 1D, o que representa o objeto matemático $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} + V(x)$?

- [ ] A O operador momento
- [ ] B A eq. Schrödinger indep. do tempo
- [ ] C A eq. de Schrödinger
- [x] D O operador Hamiltoniano

3) Quando uma partícula é descrita pela função de onda $\psi(x)$, a probabilidade de a encontrar entre as posições x e $x + dx$ é

- [ ] A $\left[\psi(x)^*/\psi(x)\right] dx$
- [ ] B $|\psi(x)|\, dx$
- [x] C $\psi(x)^*\psi(x)\, dx$
- [ ] D $\psi(x)\, dx$

4) Quando uma observável é independente do tempo e comuta com o Hamiltoniano, ela diz-se

- [ ] A Hermítica
- [x] B Constante do movimento
- [ ] C Incompatível com o Hamiltoniano
- [ ] D Observável dinâmica

5) Na descrição quântica, a redução (ou colapso, ou projeção) do vetor de estado ocorre

- [ ] A Ao longo da evolução temporal unitária
- [x] B No ato de medição
- [ ] C Na reflexão por barreiras de potencial
- [ ] D Na transição entre níveis de energia

6) Apenas uma das funções seguintes, definidas em todo o espaço $-\infty < x < +\infty$, pode representar uma solução *física* de uma equação de Schrödinger independente do tempo. Qual? (λ e $\mathcal{C}$ são constantes positivas)

- A $\psi(x) = \mathcal{C}\, e^{-\lambda x}$
- B $\psi(x) = \mathcal{C}\, e^{\lambda x}$
- C $\psi(x) = \mathcal{C}\, e^{-\lambda |x|}$
- D $\psi(x) = \mathcal{C}\, e^{\lambda x^2}$

7) Num poço de potencial infinito em 1D definido na região $0 \leq x \leq a$, a função de onda, $\psi(x)$, e a sua derivada, $\psi'(x)$, no ponto $x = a$ são, respetivamente

- A contínua e descontínua
- B descontínua e contínua
- C ambas contínuas
- D ambas descontínuas

8) A diferença de energia entre os níveis E_{n+1} e E_n de um oscilador harmónico em 1D é

- A $n\,\hbar\omega$
- B $\dfrac{\hbar\omega}{2}$
- C $\hbar\omega\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$
- D $\hbar\omega$

9) Qual dos seguintes é o Hermítico conjugado de $\lambda|\phi\rangle\langle\chi|\psi\rangle\langle\xi|\hat{A}$, onde λ é um número e $\hat{A}$ um operador?

- A $\lambda^*\langle\phi|\langle\chi|\psi\rangle|\xi\rangle\hat{A}^\dagger$
- B $\hat{A}^\dagger|\xi\rangle\langle\psi|\chi\rangle\langle\phi|\lambda^*$
- C $\hat{A}|\phi\rangle\langle\chi|\psi\rangle\langle\xi|\lambda$
- D $\hat{A}^\dagger|\xi\rangle\langle\chi|\psi\rangle\langle\phi|\lambda^*$

10) A regra de quantização da energia dos estados ligados do átomo de hidrogénio é (n é o número quântico principal)

- A $E_n \propto n^{-2}$
- B $E_n \propto n^2$
- C $E_n \propto n^{-1}$
- D $E_n \propto n$

Parte II (70%)

Responda apenas nas folhas de resposta.

Problema 1

20 % [6 + 4 + 6 + 4]

Considere um sistema de 3 níveis cujo Hamiltoniano $\hat{H}$ e estado inicial (em $t = 0$) são dados pelas matrizes seguintes

$$\hat{H} \mapsto \hbar\omega \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{bmatrix}, \qquad |\psi_0\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad \text{na base} \quad \{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\},$$

onde $\hbar\omega > 0$ é uma constante com dimensões de energia.

a) No estado ψ_0, que valores se podem obter numa medição da energia e quais são as respetivas probabilidades?

b) Calcule a incerteza na energia, δH, associada ao estado inicial do sistema?

c) Assumindo que não é feita qualquer medição desde $t = 0$, determine a dependência temporal do vetor do estado, expressando $|\psi(t)\rangle$ de forma simples na base $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}$.

d) Supondo que num instante t é medida a energia e se obtém o menor dos resultados possíveis, qual será o vetor de estado imediatamente a seguir?

Solução

a) É necessário começar por determinar os valores e vetores próprios da matriz de $\hat{H}$. Ignorando temporariamente a constante global $\hbar\omega$,

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & i \\ 0 & -i & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad (2-\lambda)\left(\lambda^2 - 1\right) = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \lambda = -1,\, 1,\, 2.$$

Isto significa que, em princípio, os potenciais resultados de uma medição de energia são

$$\varepsilon_1 = -\hbar\omega, \qquad \varepsilon_2 = \hbar\omega, \qquad \varepsilon_3 = 2\hbar\omega.$$

Todavia, ainda precisamos de determinar as probabilidades associadas a cada um. Para isso, calculamos os vetores próprios correspondentes:

$$\varepsilon_1 = -1: \qquad \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} u = 0 \\ w = iv \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \to \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{bmatrix},$$

$$\varepsilon_2 = 1: \qquad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & i \\ 0 & -i & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} u = 0 \\ w = -iv \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \to \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -i \end{bmatrix},$$

$$\varepsilon_3 = 2: \qquad \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

As probabilidades associadas a cada um dos potenciais resultados ε_n são então

$$\mathcal{P}(\varepsilon_1) = |\langle \varepsilon_1 | \psi_0 \rangle|^2 = \frac{|1-i|^2}{4} = \frac{1}{2}, \qquad \mathcal{P}(\varepsilon_2) = |\langle \varepsilon_2 | \psi_0 \rangle|^2 = \frac{|1+i|^2}{4} = \frac{1}{2}, \qquad \mathcal{P}(\varepsilon_3) = 0.$$

Como $\mathcal{P}(\varepsilon_3) = 0$ para o estado ψ_0 dado neste problema, os únicos resultados numa medição de energia serão $\varepsilon_1 = \hbar\omega$ ou $\varepsilon_2 = -\hbar\omega$, ambos com a mesma probabilidade de $1/2$.

b) A forma mais expedita é recorrer à definição,

$$\delta H = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}, \qquad \text{e ao facto de que} \qquad \langle \hat{H}^k \rangle = \sum_n \varepsilon_n^k \, \mathcal{P}(\varepsilon_n).$$

De acordo com os resultados da questão anterior,

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_n \varepsilon_n \, \mathcal{P}(\varepsilon_n) = (-\hbar\omega) \, \frac{1}{2} + (\hbar\omega) \, \frac{1}{2} = 0$$

e

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \sum_n \varepsilon_n^2 \, \mathcal{P}(\varepsilon_n) = (-\hbar\omega)^2 \, \frac{1}{2} + (\hbar\omega)^2 \, \frac{1}{2} = (\hbar\omega)^2.$$

Logo,

$$\delta H = \hbar\omega.$$

c) A dependência do vetor de estado é dada, genericamente, pela expansão

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle \varepsilon_n | \psi_0 \rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} | \varepsilon_n \rangle.$$

Considerando que $|\varepsilon_n\rangle$ representam os kets próprios encontrados na questão acima e $|\psi_0\rangle$ o vetor inicial dado no problema, temos

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \sum_n \langle \varepsilon_n | \psi_0 \rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} | \varepsilon_n \rangle \\
&= \langle \varepsilon_1 | \psi_0 \rangle e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} | \varepsilon_1 \rangle + \langle \varepsilon_2 | \psi_0 \rangle e^{-i\varepsilon_2 t/\hbar} | \varepsilon_2 \rangle + \langle \varepsilon_3 | \psi_0 \rangle e^{-i\varepsilon_3 t/\hbar} | \varepsilon_3 \rangle \\
&= \frac{1-i}{2} e^{i\omega t} | \varepsilon_1 \rangle + \frac{1+i}{2} e^{-i\omega t} | \varepsilon_2 \rangle. \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i(\omega t - \pi/4)} | \varepsilon_1 \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i(\omega t - \pi/4)} | \varepsilon_2 \rangle.
\end{aligned}$$

Expandindo os autoestados $|\varepsilon_n\rangle$ temos, por fim,

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i(\omega t - \pi/4)} \, \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|x_2\rangle + i|x_3\rangle \Big) + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i(\omega t - \pi/4)} \, \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|x_2\rangle - i|x_3\rangle \Big) \\
&= \frac{e^{i(\omega t - \pi/4)} + e^{-i(\omega t - \pi/4)}}{2} \, |x_2\rangle + i \frac{e^{i(\omega t - \pi/4)} - e^{-i(\omega t - \pi/4)}}{2} \, |x_3\rangle \\
&= \cos\left(\omega t - \frac{\pi}{4}\right) \, |x_2\rangle - \sin\left(\omega t - \frac{\pi}{4}\right) \, |x_3\rangle.
\end{aligned}$$

Em forma matricial, este resultado fica

$$|\psi(t)\rangle \mapsto \begin{bmatrix} 0 \\ \cos\left(\omega t - \frac{\pi}{4}\right) \\ -\sin\left(\omega t - \frac{\pi}{4}\right) \end{bmatrix}.$$

d) O menor valor de energia possível é $\varepsilon_1 = -\hbar\omega$, que corresponde a um valor próprio não degenerado de $\hat{H}$, e com uma probabilidade de ocorrência não nula. Assim, imediatamente após a medida referida, o vetor de estado é reduzido ao autoestado correspondente do Hamiltoniano. Ou seja, na notação usada nas aulas:

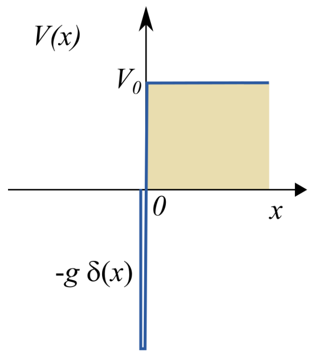
$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{H} \to \varepsilon_1} |\varepsilon_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |x_2\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |x_3\rangle.$$

Problema 2 $\qquad$ 20 % [3 + 6 + 8 + 3]

Uma partícula de massa m move-se em uma dimensão sob influência do potencial

$$V(x) = V_0\,\Theta\,(x) - g\,\delta(x), \qquad (V_0, g > 0).$$

Este potencial consiste num degrau de altura constante V_0 combinado com um termo atrativo "delta de Dirac" na origem, como esquematizado na figura.



a) Em que intervalo de energias esperamos, *a priori*, que possa haver estados ligados?

b) Se $\psi(x)$ representar uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo, que condições fronteira devem $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ obedecer em $x = 0$?

c) O potencial $V(x)$ representado na figura admite exatamente um estado ligado. Qual é a sua energia?

d) Se a magnitude de V_0 for suficientemente grande, deixa de existir o estado ligado. Qual é o valor crítico de V_0 a partir do qual isso acontece?

Nota: Recorde que a presença de $\delta(x)$ neste potencial gera uma condição especial na origem; caso não a recorde, pode derivá-la integrando a ESIT numa vizinhança infinitesimal de $x = 0$.

Solução

a) Como a componente "delta de Dirac" do potencial é atrativa, isso configura um poço de potencial na origem. É possível assim que existam estados ligados, mas apenas para $E < 0$.

b) A função de onda deve ser contínua,

$$\psi(0^+) = \psi(0^-).$$

A presença do potencial "delta de Dirac" na origem impõe uma descontinuidade na derivada de $\psi(x)$ nesse ponto, dada por

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0).$$

Nota: Trata-se da condição discutida em detalhe na aulas teórico-práticas. Pode derivar-se rapidamente integrando a ESIT numa vizinhança infinitesimal ($\varepsilon \to 0$) do ponto onde se localiza a função delta:

$$
\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \\
& \Big\downarrow \text{ integrando ambos os lados entre } -\varepsilon \text{ e } \varepsilon \\
& -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi''(x)\,dx = E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx - \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}V(x)\psi(x)\,dx \\
\Leftrightarrow\quad & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(0^+) - \psi'(0^-)\right] = g\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\psi(x)\,dx \\
\Leftrightarrow\quad & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(0^+) - \psi'(0^-)\right] = g\psi(0) \\
\Leftrightarrow\quad & \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0)
\end{aligned}
$$

c) Dado que o menor dos limites assimptóticos do potencial é $V(x \to -\infty) = 0$, qualquer estado ligado terá energia negativa. As soluções normalizáveis da ESIT terão então a forma

$$
\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\lambda_1 x}, & x < 0 \\ Be^{-\lambda_2 x}, & x > 0 \end{cases}, \qquad \lambda_1 \equiv \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad \lambda_2 \equiv \sqrt{\frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}},
$$

onde é de realçar que $\lambda_1 \neq \lambda_2$ porque, apesar de o potencial ser constante para $x < 0$ e $x > 0$, o valor dessa constante é diferente à esquerda ($V = 0$) e à direita ($V = V_0$) da origem. Estas soluções devem ser contínuas na origem, o que impões a condição

$$
A = B.
$$

Devem também satisfazer a descontinuidade na derivada referida na questão anterior, o que implica:

$$
\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0) \qquad \Leftrightarrow \qquad \lambda_2 + \lambda_1 = \frac{2mg}{\hbar^2}. \tag{$\star$}
$$

Esta última condição restringe os valores possíveis da energia, como vemos recordando as definições de λ_1 e λ_2 acima, em particular que, da sua definição resulta

$$
\lambda_2^2 - \lambda_1^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \tag{$\star\star$}
$$

Combinando as equações ($\star$) e ($\star\star$) temos

$$
\begin{aligned}
& \lambda_1^2 = \lambda_2^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \left(\frac{2mg}{\hbar^2} - \lambda_1\right)^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \\
\Leftrightarrow\quad & \lambda_1^2 = \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^2 + \lambda_1^2 - \frac{4mg\lambda_1}{\hbar^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \\
\Leftrightarrow\quad & \lambda_1 = \frac{mg}{\hbar^2} - \frac{V_0}{2g}.
\end{aligned}
$$

Substituindo aqui a definição de λ_1 e elevando ao quadrado, obtemos

$$
E = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{mg}{\hbar^2} - \frac{V_0}{2g}\right)^2 = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}\left(1 - \frac{\hbar^2 V_0}{2mg^2}\right)^2.
$$

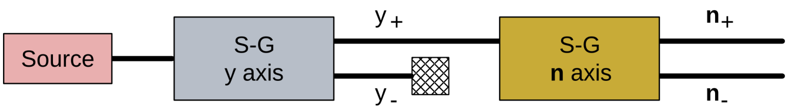
d) Do resultado precedente, podemos ver que a energia do estado ligado se aproxima de zero quando

$$\frac{\hbar^2 V_0}{2mg^2} \to 1 \qquad \Leftrightarrow \qquad V_0 \to \frac{2mg^2}{\hbar^2}.$$

Se V_0 exceder este valor crítico, o resultado da questão anterior prevê que a energia do estado ligado passaria a ser positiva, o que contradiz o facto de que qualquer estado ligado neste potencial terá de ter energia positiva, como estabelecemos acima. Isto significa que deixa de haver estados ligados se $V_0 > 2mg^2/\hbar^2$.

Problema 3 10 %

Um feixe de partículas neutras com apenas momento angular de spin ($S = 1/2$) atravessa a sequência de dispositivos de Stern-Gerlach (S-G) esquematizados abaixo,



onde a direção $\boldsymbol{n}$ é definida pelo vetor unitário no plano $\mathcal{O}yz$

$$\boldsymbol{n} = \sin\alpha\,\hat{\mathbf{y}} + \cos\alpha\,\hat{\mathbf{z}}, \qquad 0 \le \alpha \le \frac{\pi}{2}.$$

Qual deve ser o ângulo α para que a fração de partículas encontradas no feixe n_+ seja 3 vezes a fração das que saem pelo feixe n_-? (*Recorde: as partículas no feixe n_+ têm spin segundo $\boldsymbol{n}$.*)

Solução

Método I (probabilidades). As partículas selecionadas pelo primeiro S-G chegam ao segundo com spin na direção $\hat{\mathbf{y}}$, o que significa que o seu vetor de estado é, na base própria de $\hat{S}_z$,

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle_z + \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle_z.$$

À saída do segundo S-G temos partículas num dos dois autoestados de $\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}$. O autoestado com projeção positiva de spin segundo $\boldsymbol{n}$ é dado por

$$|+\rangle_{\boldsymbol{n}} = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle_z,$$

sendo θ e φ os ângulos polar e azimutal que definem a direção $\boldsymbol{n}$. O ângulo θ coincide com α dado no problema. Como é dito que $0 \le \alpha \le \frac{\pi}{2}$, o vetor $\boldsymbol{n}$ está no 1º quadrante do plano $\mathcal{O}yz$, o que significa que o seu ângulo azimutal é $\varphi = \pi/2$. Assim, o autoestado acima de $\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}$ fica

$$|+\rangle_{\boldsymbol{n}} = \cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle_z + i\sin\frac{\alpha}{2}|-\rangle_z.$$

Para prosseguir, devemos recordar que a fração das partículas selecionadas pelo primeiro S-G que emerge no feixe n_+ do segundo corresponde à probabilidade de uma partícula ter projeção positiva de spin segundo $\boldsymbol{n}$ quando é preparada com spin na direção $\hat{\mathbf{y}}$. Ou seja, essa fração é

$$P(n_+) = |{}_{\boldsymbol{n}}\langle+|+\rangle_y|^2 = \frac{1}{2}\left|\cos\frac{\alpha}{2} + \sin\frac{\alpha}{2}\right|^2 = \frac{1+\sin\alpha}{2}.$$

A fração presente no outro feixe n_- será naturalmente

$$P(n_-) = 1 - P(n_+) = \frac{1-\sin\alpha}{2}.$$

Portanto, se queremos ter $P(n_+) = 3P(n_-)$ como referido no problema,

$$\frac{1+\sin\alpha}{2} = 3\left(\frac{1-\sin\alpha}{2}\right) \qquad \longrightarrow \qquad \sin\alpha = \frac{1}{2} \quad \Leftrightarrow \quad \alpha = \frac{\pi}{6}.$$

Método II (valores esperados). Se a fração de partículas com spin positivo segundo $\boldsymbol{n}$ é o triplo da fração com spin negativo, então

$$P(n_+) = 3P(n_-) \quad \Rightarrow \quad P(n_+) = \frac{3}{4}, \quad P(n_-) = \frac{1}{4} \qquad \big[\text{porque } P(n_+) + P(n_-) = 1\big].$$

A sequência de S-G apresentada neste problema permite medir o valor esperado de $\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{n}$ quando as partículas são preparadas no estado $|+\rangle_y$. Como o problema nos dá as probabilidades/frações pretendidas, calculamos o valor esperado do spin que delas deve resultar:

$$\langle\psi|\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{n}|\psi\rangle = \left(+\frac{\hbar}{2}\right) P(n_+) + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) P(n_-) = \frac{\hbar}{4}, \tag{$\star$}$$

onde $|\psi\rangle = |+\rangle_y$. Por outro lado, sabemos que a matriz associada ao operador $\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{n}$ é

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{n} \mapsto \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \frac{\hbar}{2}\left(\sigma_y \sin\alpha + \sigma_z \cos\alpha\right) = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \cos\alpha & -i\,\sin\alpha \\ i\,\sin\alpha & -\cos\alpha \end{bmatrix}.$$

Assim, o valor esperado pode também ser calculado como

$${}_y\langle+|\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{n}|+\rangle_y = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \cos\alpha & -i\,\sin\alpha \\ i\,\sin\alpha & -\cos\alpha \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sin\alpha. \tag{$\star\star$}$$

Igualando os resultados ($\star$) e ($\star\star$),

$$\frac{\hbar}{2}\sin\alpha = \frac{\hbar}{4} \qquad \Rightarrow \qquad \alpha = \frac{\pi}{6}.$$

Problema 4	10 % [2 + 8]

Considere as duas representações equivalentes do Hamiltoniano de uma partícula num potencial harmónico em 1D,

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2 = \hbar\omega\Big(a^\dagger a + \frac{1}{2}\Big), \quad \text{onde} \quad a \equiv \frac{1}{x_0}\Big(\hat{X} + \frac{i}{m\omega}\hat{P}\Big), \quad x_0 \equiv \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}.$$

a) Escreva as relações que definem a ação elementar dos operadores a e $a^\dagger$ nos autoestados normalizados, $|\varphi_n\rangle$, deste problema:

$$a|\varphi_n\rangle = ? \qquad a^\dagger|\varphi_n\rangle = ?$$

b) Partindo destas relações, obtenha o produto das incertezas $\delta X \delta P$ quando a partícula se encontra no autoestado $|\varphi_n\rangle$. Explicite os cálculos que efetuar.

Solução

a) Essas relações são

$$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle \qquad a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle.$$

b) Cada uma das incertezas requer o cálculo de

$$\delta X^2 \equiv \langle\varphi_n|\hat{X}^2|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|\hat{X}|\varphi_n\rangle^2, \qquad \delta P^2 \equiv \langle\varphi_n|\hat{P}^2|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|\hat{P}|\varphi_n\rangle^2.$$

Da definição dos operadores a e $a^\dagger$ resulta

$$\hat{X} = \frac{x_0}{2}\big(a + a^\dagger\big), \qquad \hat{P} = \frac{m\omega x_0}{2i}\big(a - a^\dagger\big).$$

Os valores esperados de $\hat{X}$ e $\hat{P}$ são nulos em qualquer autoestado $|\varphi_n\rangle$ porque

$$\langle\varphi_n|a|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|a^\dagger|\varphi_n\rangle = 0.$$

Para os valores esperados dos quadrados, temos

$$\begin{aligned}
\langle\varphi_n|\hat{X}^2|\varphi_n\rangle &= \frac{x_0^2}{4}\langle\varphi_n|\big(a + a^\dagger\big)^2|\varphi_n\rangle \\
&= \frac{x_0^2}{4}\langle\varphi_n|a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a|\varphi_n\rangle \\
&\Big\downarrow \text{ usar } [a, a^\dagger] = 1 \text{ para substituir } aa^\dagger + a^\dagger a = 1 + 2a^\dagger a \\
&= \frac{x_0^2}{4}\Big[\cancelto{0}{\langle\varphi_n|a^2|\varphi_n\rangle} + \cancelto{0}{\langle\varphi_n|(a^\dagger)^2|\varphi_n\rangle} + 2\langle\varphi_n|a^\dagger a|\varphi_n\rangle + 1\Big] \\
&\Big\downarrow \text{ usar o facto de que } a^\dagger a|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle \\
&= \frac{x_0^2}{4}\big(1 + 2n\big),
\end{aligned}$$

e, de modo análogo,

$$
\begin{aligned}
\langle\varphi_n|\hat{P}^2|\varphi_n\rangle &= -\frac{(m\omega x_0)^2}{4}\langle\varphi_n|\big(a-a^\dagger\big)^2|\varphi_n\rangle \\
&= -\frac{(m\omega x_0)^2}{4}\langle\varphi_n|a^2+(a^\dagger)^2-aa^\dagger-a^\dagger a|\varphi_n\rangle \\
&= \frac{(m\omega x_0)^2}{4}\Big[2\langle\varphi_n|a^\dagger a|\varphi_n\rangle+1\Big] \\
&= \frac{(m\omega x_0)^2}{4}\big(1+2n\big).
\end{aligned}
$$

Portanto, em qualquer autoestado do oscilador harmónico 1D temos

$$
\delta X_n\,\delta P_n = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right).
$$

Problema 5 (são duas questões independentes) 10 % [5 + 5]

a) Considere duas observáveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$ que comutam entre si, e sejam $|\phi_m\rangle$ e $|\phi_n\rangle$ dois autoestados de $\hat{A}$ associados a dois valores próprios distintos:

$$\hat{A}|\phi_m\rangle = a_m|\phi_m\rangle, \qquad \hat{A}|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle, \qquad a_n \neq a_m.$$

Mostre que

$$\langle\phi_m|\hat{B}|\phi_n\rangle = 0.$$

b) Suponha que uma partícula no estado descrito pela função de onda normalizada $\varphi_{p_0}(x)$ tem valor esperado de momento igual a p_0. Mostre que à função de onda

$$\psi(x) = e^{ip_1x/\hbar}\,\varphi_{p_0}(x),$$

está associado o valor esperado do momento $\langle\hat{P}\rangle = p_0 + p_1$.

Solução

a) Se os dois operadores comutam,

$$\begin{aligned}
\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \quad &\Rightarrow \quad \langle\phi_m|\hat{A}\hat{B}|\phi_n\rangle = \langle\phi_m|\hat{B}\hat{A}|\phi_n\rangle \\
&\qquad \Big\downarrow \ \text{como } \hat{A} \text{ é Hermítico (observável), } \langle\phi_m|\hat{A} = a_m\langle\phi_m| \\
&\Leftrightarrow \quad a_m\langle\phi_m|\hat{B}|\phi_n\rangle = a_n\langle\phi_m|\hat{B}|\phi_n\rangle \\
&\Leftrightarrow \quad (a_m - a_n)\,\langle\phi_m|\hat{B}|\phi_n\rangle = 0.
\end{aligned}$$

Como, por hipótese, $a_m \neq a_n$ (2 valores próprios distintos), resulta que

$$\langle\phi_m|\hat{B}|\phi_n\rangle = 0.$$

b) **Método I (base de posição).** O facto de $\varphi_0(x)$ ser um estado com valor esperado de momento igual a p_0 significa que

$$\langle\hat{P}\rangle_{\varphi_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\varphi_0^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0(x) = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\varphi_0^*(x)\,\frac{\partial}{\partial x}\varphi_0(x) = p_0.$$

O valor esperado de $\hat{P}$ no estado $\psi(x)$ será

$$\begin{aligned}
\langle\hat{P}\rangle_\psi &= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi^*(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \\
&= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\left[e^{-ip_1x/\hbar}\,\varphi_{p_0}^*(x)\right]\frac{\partial}{\partial x}\left[e^{ip_1x/\hbar}\,\varphi_{p_0}(x)\right] \\
&= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\left[e^{-ip_1x/\hbar}\,\varphi_{p_0}^*(x)\right]\left[\frac{ip_1}{\hbar}e^{ip_1x/\hbar}\varphi_{p_0}(x) + e^{ip_1x/\hbar}\,\frac{\partial}{\partial x}\varphi_{p_0}(x)\right] \\
&= p_1\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\varphi_{p_0}^*(x)\varphi_{p_0}(x)}_{1\text{ (normalizado)}} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\varphi_{p_0}^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\varphi_{p_0}(x)}_{p_0} \\
&= p_1 + p_0.
\end{aligned}$$

No penúltimo passo usamos o facto de que o problema nos apresenta $\varphi_0(x)$ como estando normalizada. Logo,
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_0(x)|^2 \, dx = 1.$$

Método II (base de momento). Na base de momento, o valor esperado de $\hat{P}$ no estado ψ é dado por
$$\langle \hat{P} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, p \, |\psi(p)|^2.$$

A função de onda $\psi(p)$ representa o estado ψ dado no problema e é obtida mediante uma transformada de Fourier:

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-ipx/\hbar} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-i(p-p_1)x/\hbar} \varphi_{p_0}(x) \equiv \varphi_{p_0}(p - p_1),$$

onde $\varphi_{p_0}(p)$ representa a função de onda na base de momento do estado φ_{p_0}:

$$\varphi_{p_0}(p) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-ipx/\hbar} \varphi_{p_0}(x).$$

Substituindo na expressão acima para o valor esperado,

$$\begin{aligned}
\langle \hat{P} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, p \, |\psi(p)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, p \, |\varphi_{p_0}(p - p_1)|^2 \\
&\Big\downarrow \text{ mud. variável: } p - p_1 \to p \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \ (p + p_1) \ |\varphi_{p_0}(p) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, p \, |\varphi_{p_0}(p)|^2 + p_1 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dp \, |\varphi_{p_0}(p)|^2}_{1 \text{ (normalizado)}} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, p \, |\varphi_{p_0}(p)|^2 + p_1
\end{aligned}$$

O integral que resta representa o valor esperado de $\hat{P}$ no estado φ_{p_0}, o qual, por hipótese, é p_0 de acordo com o problema. Concluímos portanto que

$$\langle \hat{P} \rangle = p_0 + p_1.$$

— **FIM DO EXAME** —