

UNIVERSIDADE DO MINHO

Física Quântica I / Mecânica Quântica

Teste 1 (22 de abril 2022)

Duração: 1h 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 **CINCO (5)** páginas (incluindo esta) e está organizado em **DUAS (2)** partes: a **Parte I** começa na pág. 3 e tem **DEZ (10)** questões de escolha múltipla; a **Parte II** está na pág. 5 e contém **TRÊS (3)** problemas.
3. O verso desta folha (pág. 2) contém um formulário.
4. Responda às questões da **Parte I diretamente na folha do enunciado**.
5. Responda às questões da **Parte II apenas nas folhas de resposta fornecidas**, nelas apresentando os cálculos que efetuar. Não serão consideradas respostas ou anotações na folha do enunciado relativamente à Parte II.
6. No final, deverá **entregar** este **enunciado** e as **folhas de resposta**.
7. A percentagem de cada questão é indicada no cabeçalho de cada problema.
8. Não são permitidos quaisquer materiais ou dispositivos de apoio.
9. Em caso de desistência, não será permitida a saída da sala nos primeiros 30 minutos do teste.

Identificação (n^o de aluno)

--

Formulário Teste 1

— MATRIZES —

Definições

$A^{\top} = A$ (simétrica), $A^{\dagger} = (A^*)^{\top} = A$ (hermítica), $A^{-1} = A^{\dagger}$ (unitária).

Operações

$[A, B] = AB - BA, \quad [A, BC] = [A, B]C + B[A, C].$

$(A^{\dagger})_{ij} = A^*_{ji}, \quad A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix} \longrightarrow A^{\dagger} = \begin{bmatrix} a^*_{11} & a^*_{21} & a^*_{31} & \cdots \\ a^*_{12} & a^*_{22} & a^*_{32} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix}.$

$(AB \cdots Z)^{\dagger} = Z^{\dagger} \cdots B^{\dagger} A^{\dagger}.$

$\text{Tr}(A) = \sum_i a_{ii}, \quad \text{Tr}(A + B) = \text{Tr} A + \text{Tr} B, \quad \text{Tr}(A B \cdots Z) = \text{Tr}(Z A B \cdots).$

$\det(AB \cdots) = (\det A)(\det B) \cdots, \quad \det(A^{-1}) = (\det A)^{-1}.$

Funções de matrizes

$f(A) \equiv f(0) \mathbf{1} + f'(0) A + \frac{1}{2!} f''(0) A^2 + \cdots$

Se $A = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix}$ então $f(A) = \begin{bmatrix} f(a_1) & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & f(a_2) & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix}.$

$e^{A+B} = e^A e^B$ se (e só se) $[A, B] = 0.$

Matrizes de Pauli e seus vetores próprios (VP)

$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \text{ VP: } \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \text{ VP: } \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \text{ VP: } \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$

Vetor de matrizes de Pauli:

$\boldsymbol{\sigma} \equiv \sigma_x \hat{\mathbf{x}} + \sigma_y \hat{\mathbf{y}} + \sigma_z \hat{\mathbf{z}}, \quad \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z,$

$\exp(i \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{1} \cos \alpha + i (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \alpha, \quad |\mathbf{n}| = 1, \alpha \in \mathbb{R}.$

Vetores próprios de $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$:

$\begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{bmatrix} \text{ e } \begin{bmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{n} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}}.$

Valores e vetores próprios

$H \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v} \longrightarrow \begin{bmatrix} h_{11} - \lambda & h_{12} & \cdots \\ h_{21} & h_{22} - \lambda & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}.$

Sinónimos

valor próprio = autovalor (= *eigenvalue*, em inglês),

vetor próprio = autovetor = autoestado (= *eigenvector* = *eigenstate*, em inglês).

Representação na base dos autovetores (mudança de base)

$\overset{\text{matriz}}{\uparrow} H \longrightarrow \{\overset{\text{autovalores}}{\uparrow} \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\} \longrightarrow \{\overset{\text{autovetores / base própria}}{\uparrow} \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\} \longrightarrow U^{\dagger} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n \\ \uparrow & \downarrow & \vdots & \downarrow \end{pmatrix}$
matriz de transformação

$H' = U H U^{\dagger} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \cdots \\ 0 & \lambda_2 & 0 \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$

— DIVERSOS —

$e^z = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \frac{z^3}{3!} + \frac{z^4}{4!} + \cdots, \quad e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta, \quad \theta \in \mathbb{R}.$

Parametrização universal de um sistema de 2 níveis

$H = \begin{bmatrix} E_1 & \gamma \\ \gamma^* & E_2 \end{bmatrix} = E_m \mathbf{1} + \frac{\hbar \omega}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \quad \text{onde}$
 $E_m \equiv \frac{E_1 + E_2}{2}, \quad \frac{\hbar \omega}{2} \equiv \frac{|\gamma|}{\sin \theta}, \quad \tan \theta \equiv \frac{2|\gamma|}{E_1 - E_2} \quad (0 \leq \theta \leq \pi),$

$\phi \equiv -\arg \gamma \quad (0 \leq \phi < 2\pi), \quad \mathbf{n} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}}.$

Desigualdade de Schwarz. Para quaisquer vetores $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$,

$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle.$

Parte I (40%, 4% cada)

Questões de resposta direta. Assinale a correta com ☒ diretamente nesta folha.

Nas questões seguintes: $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}$ é uma base ortonormal; a notação é a usada nas aulas; as questões são todas independentes umas das outras.

1) O ket dual do bra $\langle\psi| = i\langle x_1| - \langle x_2| + (1+i)\langle x_3|$ é

☐ $|\psi\rangle = i|x_1\rangle - |x_2\rangle + (1-i)|x_3\rangle.$

☒ $|\psi\rangle = -i|x_1\rangle - |x_2\rangle + (1-i)|x_3\rangle.$

☐ $|\psi\rangle = i|x_1\rangle - |x_2\rangle + (1+i)|x_3\rangle.$

☐ $|\psi\rangle = -i|x_1\rangle + |x_2\rangle + (1-i)|x_3\rangle.$

2) O produto interno entre o ket $|R\rangle = i|x_1\rangle + |x_2\rangle$ e o ket $|S\rangle = |x_1\rangle - 2i|x_2\rangle$ é

☐ $\langle R|S\rangle = 1 - 2i.$

☒ $\langle R|S\rangle = -3i.$

☐ $\langle R|S\rangle = -i.$

☐ $\langle R|S\rangle = 2i.$

3) Na notação de Dirac, a que corresponde a expressão $|U\rangle(2+3i)\langle V|S\rangle\langle P|e^{i\phi}$?

☒ Um operador.

☐ Um bra.

☐ Um ket.

☐ Um número.

4) A que é igual $\hat{O}|x_2\rangle$, quando \hat{O} é representado pela matriz $\begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ na base $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}$?

☐ $\hat{O}|x_2\rangle = |x_1\rangle - |x_3\rangle.$

☐ $\hat{O}|x_2\rangle = -|x_2\rangle + |x_3\rangle.$

☒ $\hat{O}|x_2\rangle = -|x_1\rangle + |x_3\rangle.$

☐ $\hat{O}|x_2\rangle = -|x_1\rangle + |x_2\rangle.$

5) O operador \hat{B} definido pelas relações $\hat{B}|x_1\rangle = |x_2\rangle - |x_3\rangle$, $\hat{B}|x_2\rangle = |x_3\rangle - |x_1\rangle$, $\hat{B}|x_3\rangle = |x_1\rangle - |x_2\rangle$ é Hermítico.

☐ Verdadeiro.

☒ Falso.

6) A experiência de Stern-Gerlach esquematizada abaixo é realizada preparando partículas com spin $1/2$ todas no mesmo estado inicial $|\psi\rangle$. A percentagem de deflexões em cada direção é a indicada junto a cada feixe de saída.



À entrada, o vetor de estado $|\psi\rangle$ destas partículas poderia ser

☐ A $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle_z + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_z$.

☐ C $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle_z - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_z$.

☐ B $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle_z + i\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_z$

☒ ~~X~~ $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle_z - i\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_z$.

7) Um sistema quântico com um espaço de estados 5-dimensional tem um Hamiltoniano cujos valores próprios distintos são apenas $+2$ e -2 (em unidades de energia), sendo a degenerescência do último 3. Isto significa:

☐ A o valor esperado da energia é 0.

☐ C o valor mais provável de energia é -2 .

☐ B o valor esperado da energia é -2 .

☒ ~~X~~ uma medição de energia não é suficiente para especificar o vetor de estado.

8) Qual é a probabilidade de encontrar uma partícula na posição x_2 , quando o seu vetor de estado é $|\psi\rangle = \frac{1}{2}|x_1\rangle + \frac{1}{2}|x_2\rangle + \frac{1}{2}|x_3\rangle$?

☐ A 1.

☒ ~~X~~ $1/3$.

☐ B $1/2$.

☐ D $1/4$.

9) Após se ter medido a energia de uma partícula, foi medida a sua posição. Imediatamente a seguir a esta última medição, o vetor de estado

☐ A é um autoestado do Hamiltoniano.

☒ ~~X~~ é um autoestado da posição.

☐ B é ortogonal aos autoestados de energia.

☐ D é ortogonal aos autoestados da posição.

10) Em mecânica quântica, a incerteza δA associada a uma observável \hat{A} define-se como

☒ ~~X~~ $\delta A \equiv \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$.

☐ C $\delta A \equiv \sqrt{\langle \hat{A} \rangle^2 - \langle \hat{A}^2 \rangle}$.

☐ B $\delta A \equiv \langle \hat{A} \rangle - \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle}$.

☐ D $\delta A \equiv \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$.

Parte II (60%)

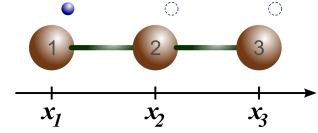
Responda apenas nas folhas de resposta.

Problema 1

40 % [12 + 8 + 8 + 12]

Considere o modelo ilustrado abaixo para um elétron numa molécula com três átomos localizados em posições distintas. Os autoestados da posição (\hat{X}) são respetivamente $|x_1\rangle$, $|x_2\rangle$ e $|x_3\rangle$, que usaremos como base ortonormal do espaço de estados. O Hamiltoniano e o operador posição são representados nesta base por

$$\hat{H} \mapsto \hbar\omega \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{X} \mapsto a \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$



onde $\hbar\omega$ e a são constantes com dimensões de energia e comprimento, respetivamente. No instante $t = 0$, o elétron tem o vetor de estado

$$|\psi(0)\rangle = |x_1\rangle.$$

- Que resultados se podem obter numa medição da energia em $t = 0$, e quais as respetivas probabilidades?
- Qual é o valor esperado da energia, $\langle \hat{H} \rangle$, e a respetiva incerteza em $t = 0$?
- Se uma medida em $t = 0$ resultar na energia mais provável, qual será o valor esperado da posição imediatamente a seguir?
- Deixando evoluir o sistema sem o perturbar, mostre que a probabilidade de encontrar o elétron no átomo 2 no instante t é dada por

$$\mathcal{P}(t) = \frac{4}{9} \sin^2 \left(\frac{3}{2} \omega t \right).$$

Solução

- Uma medição da energia resultará num dos valores próprios de \hat{H} , por exemplo ε_n , com uma probabilidade que é dada por $\mathcal{P}(\varepsilon_n) = \langle \psi | \hat{P}_{\varepsilon_n} | \psi \rangle$ (se ψ estiver normalizado), onde \hat{P}_{ε_n} é o projetor no subespaço coberto pelos vetores próprios de \hat{H} associados ao valor próprio ε_n . Temos, portanto, que determinar os valores e vetores próprios da matriz que representa \hat{H} . A equação característica, que determina os valores próprios tem a seguinte solução:

$$\begin{vmatrix} 1 - \lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 1 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (1 - \lambda)(\lambda^2 - \lambda - 2) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda = \{-1, 1, 2\},$$

de onde resultam os seguintes valores próprios de \hat{H} (repondo as constantes $\hbar\omega$):

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

Uma vez que os três valores próprios são diferentes, os vetores próprios correspondentes deverão ser automaticamente ortogonais. Vejamos:

$$\varepsilon_1 : \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} 2u = -v \\ u + v + w = 0 \\ v = -2w \end{cases} \quad |\varepsilon_1\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$\varepsilon_2 : \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} v = 0 \\ u - v + w = 0 \end{cases} \quad |\varepsilon_2\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix},$$

$$\varepsilon_3 : \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} u = v \\ u + 2v + w = 0 \\ v = w \end{cases} \quad |\varepsilon_3\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Podemos agora determinar as probabilidades associadas a cada valor possível de energia:

$$\mathcal{P}(\varepsilon_1) = |\langle \varepsilon_1 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{6}, \quad \mathcal{P}(\varepsilon_2) = |\langle \varepsilon_2 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2}, \quad \mathcal{P}(\varepsilon_3) = |\langle \varepsilon_3 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{3}.$$

Em resumo, numa medição de energia podemos obter qualquer um dos três valores $\{-\hbar\omega, \hbar\omega, 2\hbar\omega\}$ com as probabilidades $\{\frac{1}{6}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}\}$, respetivamente.

- b) Uma vez que acabámos de determinar, na questão anterior, os valores próprios de energia e as respetivas probabilidades, basta-nos recordar que o valor esperado de uma potência p do Hamiltoniano pode sempre ser calculado como

$$\langle \hat{H}^p \rangle_\psi = \sum_n (\varepsilon_n)^p \mathcal{P}(\varepsilon_n).$$

No caso que pretendemos,

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_\psi &= \left[(-1)\frac{1}{6} + (1)\frac{1}{2} + (2)\frac{1}{3} \right] \hbar\omega = \hbar\omega, \\ \langle \hat{H}^2 \rangle_\psi &= \left[(-1)^2\frac{1}{6} + (1)^2\frac{1}{2} + (2)^2\frac{1}{3} \right] \hbar^2\omega^2 = 2(\hbar\omega)^2. \end{aligned}$$

Assim, no instante inicial, o valor esperado e a incerteza na energia são

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \hbar\omega, \quad \delta H = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{H} \rangle_\psi^2} = \hbar\omega.$$

Nota: Naturalmente que poderíamos ter calculado estes valores esperados usando as representações matriciais do estado ψ , de \hat{H} e de \hat{H}^2 :

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_\psi &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \hbar\omega \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar\omega, \\ \langle \hat{H}^2 \rangle_\psi &= \overbrace{(\hbar\omega)^2 \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}}^{HH} = (\hbar\omega)^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 2(\hbar\omega)^2. \end{aligned}$$

Ou seja, o cálculo de $\langle \hat{H} \rangle_\psi$ e $\langle \hat{H}^2 \rangle_\psi$ não requer saber as probabilidades associadas a cada valor próprio de energia no estado ψ . Mas, tendo nós calculado esses valores próprios e as respectivas probabilidades na questão 1, fica muito mais expedito calcular os valores esperados diretamente em termos dos resultados da questão 1.

- c) De acordo com os resultados da questão 1, a energia mais provável é $\varepsilon_2 = \hbar\omega$, com probabilidade $\mathcal{P} = 0.5$. Se for este o resultado da medição de energia, o postulado relativo à redução do vetor de estado diz-nos que, imediatamente a seguir à medição de energia, o vetor de estado é reduzido à sua projeção no subespaço definido pelos vetores próprios de \hat{H} associados ao valor próprio que foi medido. Esquematicamente:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{H} \rightarrow \varepsilon_2} \hat{P}_{\{\varepsilon_2\}} |\psi\rangle.$$

Como o valor próprio ε_2 é não degenerado, o projetor é apenas

$$\hat{P}_{\{\varepsilon_2\}} = |\varepsilon_2\rangle\langle\varepsilon_2|, \quad \text{logo} \quad |\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{H} \rightarrow \varepsilon_2} |\varepsilon_2\rangle.$$

Este vetor próprio de \hat{H} foi determinado acima, onde encontrámos

$$|\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|x_3\rangle.$$

É com este (novo) vetor de estado que calculamos o valor esperado da posição imediatamente após a medida da energia. Esse valor esperado é então, recorrendo à representação matricial de \hat{X} dada no texto inicial do problema,

$$\langle \varepsilon_2 | \hat{X} | \varepsilon_2 \rangle = a \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = 0.$$

- d) A probabilidade que se pretende corresponde, de acordo com o postulado da probabilidade, (e tendo em conta que os valores próprios do operador posição são todos não degenerados) à quantidade

$$\mathcal{P}(t) = |\langle x_2 | \psi(t) \rangle|^2.$$

O vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ obtém-se do vetor inicial através do resultado geral (válido quando \hat{H} é independente do tempo)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle \varepsilon_n | \psi(0) \rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |\varepsilon_n\rangle.$$

Substituindo aqui o vetor inicial que é dado no início deste problema, $|\psi(0)\rangle = |x_1\rangle$, e expandindo, obtemos:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle \varepsilon_n | x_1 \rangle e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} |\varepsilon_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} e^{i\omega t} |\varepsilon_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} |\varepsilon_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-2i\omega t} |\varepsilon_3\rangle.$$

Daqui resulta que

$$\langle x_2 | \psi(t) \rangle = -\frac{2}{6} e^{i\omega t} + \frac{1}{3} e^{-2i\omega t},$$

e, portanto, a probabilidade de encontrar a partícula no átomo 2 no instante t é dada por

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(t) &= \left| -\frac{1}{3}e^{i\omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\omega t} \right|^2 = \left(-\frac{1}{3}e^{i\omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\omega t} \right) \left(-\frac{1}{3}e^{i\omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\omega t} \right)^* \\
 &= \left(-\frac{1}{3}e^{i\omega t} + \frac{1}{3}e^{-2i\omega t} \right) \left(-\frac{1}{3}e^{-i\omega t} + \frac{1}{3}e^{2i\omega t} \right) \\
 &= \frac{1}{9} (1 + 1 - e^{3i\omega t} - e^{-3i\omega t}) = \frac{2}{9} - \frac{1}{9} (e^{3i\omega t} + e^{-3i\omega t}) \\
 &\quad \downarrow \text{usando } 2 \cos z = e^{iz} + e^{-iz} \\
 &= \frac{2}{9} [1 - \cos(3\omega t)] \\
 &\quad \downarrow \text{usando } 2 \sin^2 z = 1 - \cos(2z) \\
 &= \frac{4}{9} \sin^2 \left(\frac{3\omega t}{2} \right).
 \end{aligned}$$

Nota: Para avaliar rapidamente expressões do tipo $|a + b|^2$, onde a, b são ambos números complexos, pode ser útil memorizar o facto de que

$$|a + b|^2 = |a|^2 + |b|^2 + 2 \operatorname{Re}(ab^*),$$

onde $\operatorname{Re}(z)$ significa a parte real do número complexo z . Esta “regra” é particularmente útil em cálculos como o que precisámos de efetuar na questão 5, onde a e b são ambos exponenciais de módulo unitário:

$$\begin{array}{c}
 |e^{i\omega t} - e^{-2i\omega t}| \\
 \begin{array}{cc}
 \uparrow & \uparrow \\
 \text{“}a\text{”} & \text{“}b\text{”}
 \end{array}
 \end{array}
 = 1 + 1 - 2 \operatorname{Re}(e^{3i\omega t}) = 2 - 2 \cos(3\omega t) = 4 \sin^2 \left(\frac{3\omega t}{2} \right).$$

Problema 2

10 %

Se $|- \rangle_x$ for o autoestado da projeção de spin \hat{S}_x associado ao valor próprio $-\hbar/2$, calcule

$${}_x \langle - | e^{i \frac{\pi}{2\hbar} \hat{S}_y}.$$

Expresse o resultado como combinação linear de ${}_z \langle \pm |$, onde $|\pm \rangle_z$ são os autoestados de \hat{S}_z .

Solução

Método I: Na base própria de \hat{S}_z , a representação matricial do bra e do operador presentes na expressão dada é a seguinte:

$${}_x \langle - | \mapsto \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad e^{i \frac{\pi}{2\hbar} \hat{S}_y} \rightarrow e^{i \frac{\pi}{4} \sigma_y}.$$

Recorrendo à identidade que nos permite avaliar diretamente a exponencial de uma combinação linear de matrizes de Pauli (formulário),

$$e^{i\alpha \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \cos \alpha \mathbf{1} + i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin \alpha,$$

a função exponencial acima pode então expressar-se como

$$e^{i \frac{\pi}{4} \sigma_y} = \cos \frac{\pi}{4} \mathbf{1} + i \sigma_y \sin \frac{\pi}{4} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Logo, convertendo a ação do operador no bra na operação matricial correspondente,

$${}_x\langle - | e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y} \mapsto \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

O resultado é a representação matricial do bra ${}_z\langle + |$. Portanto,

$${}_x\langle - | e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y} = {}_z\langle - |.$$

Método II (mais lento): Como temos \hat{S}_y no argumento da função exponencial, podemos avaliar esta função na base própria de \hat{S}_y , isto é, na base $\{|+\rangle_y, |-\rangle_y\}$. Para expressar este operador na sua base própria, basta recordar que os valores próprios de qualquer projeção de spin são sempre $\pm\hbar/2$. Isto significa que

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} |+\rangle_{yy}\langle +| - \frac{\hbar}{2} |-\rangle_{yy}\langle -|, \quad (\text{decomposição espectral de } \hat{S}_y)$$

de onde resulta que

$$\begin{aligned} e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y} &= e^{i\frac{\pi}{2\hbar}(\frac{\hbar}{2})} |+\rangle_{yy}\langle +| + e^{i\frac{\pi}{2\hbar}(-\frac{\hbar}{2})} |-\rangle_{yy}\langle -| \\ &= e^{i\frac{\pi}{4}} |+\rangle_{yy}\langle +| + e^{i\frac{\pi}{4}} |-\rangle_{yy}\langle -|. \end{aligned}$$

A seguir, determinamos como se expressa o ket $|-\rangle_x$ na base dos autoestados de \hat{S}_y . Para isso, recordamos que (formulário)

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle_z \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle_z, \quad |\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle_z \pm \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle_z,$$

de onde resulta

$$|-\rangle_x = {}_y\langle + | - \rangle_x |+\rangle_y + {}_y\langle - | - \rangle_x |-\rangle_y = \frac{1+i}{2} |+\rangle_y + \frac{1-i}{2} |-\rangle_y = \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} |+\rangle_y + \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} |-\rangle_y.$$

Podemos então combinar os dois resultados e escrever a expressão dada no problema como

$${}_x\langle - | e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y} = \underbrace{\left[\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} {}_y\langle + | + \frac{e^{+i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} {}_y\langle - | \right]}_{{}_x\langle - |} \underbrace{\left[e^{i\frac{\pi}{4}} |+\rangle_{yy}\langle +| + e^{i\frac{\pi}{4}} |-\rangle_{yy}\langle -| \right]}_{e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y}}.$$

Agora é só expandir:

$$\begin{aligned} {}_x\langle - | e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y} &= \left[\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} {}_y\langle + | + \frac{e^{+i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} {}_y\langle - | \right] \left[e^{i\frac{\pi}{4}} |+\rangle_{yy}\langle +| + e^{i\frac{\pi}{4}} |-\rangle_{yy}\langle -| \right] \\ &= \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} {}_y\langle + | e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y} + \frac{e^{+i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} {}_y\langle - | e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y} \\ &= \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} {}_y\langle + | e^{i\frac{\pi}{4}} + \frac{e^{+i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} {}_y\langle - | e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} {}_y\langle + | + \frac{1}{\sqrt{2}} {}_y\langle - |. \end{aligned}$$

Por fim, convertamos para a base dos autoestados de \hat{S}_z , como pedido no texto do problema:

$$\begin{aligned} x\langle -|e^{i\frac{\pi}{2\hbar}\hat{S}_y} = \frac{1}{\sqrt{2}}y\langle +| + \frac{1}{\sqrt{2}}y\langle -| \\ = \frac{1}{2}[z\langle +| - iz\langle -|] + \frac{1}{2}[z\langle +| + iz\langle -|] \\ = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)z\langle +| - i\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)z\langle -| \\ =_z \langle +|. \end{aligned}$$

Problema 3

10 %

Considere um sistema quântico com Hamiltoniano independente do tempo, preparado em $t = 0$ no estado inicial $|\psi(0)\rangle$. *Demonstre* que, no instante t posterior, a probabilidade de encontrar o sistema no estado *inicial* é dada aproximadamente por

$$\mathcal{P} \approx 1 - \left(\frac{\delta E}{\hbar}\right)^2 t^2,$$

onde desprezamos termos de ordem superior em t ; δE é a incerteza na energia do estado inicial.

Sugestão: considere uma expansão em série do operador de evolução para tempos pequenos.

Solução

Assumamos que $|\psi(0)\rangle$ está normalizado, por conveniência, apesar de não ser necessário assumir isso para estabelecer o resultado pretendido. O vetor de estado nos instantes t e 0 estão relacionados através do operador de evolução, segundo

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

Como nos é dito que \hat{H} é independente do tempo, sabemos que

$$\hat{U}(t, 0) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}.$$

A probabilidade de encontrar os sistema no estado inicial ao fim de um tempo t é dada, de acordo com o postulado das probabilidades, por

$$\mathcal{P} = |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 = \left|\langle\psi(0)|\hat{U}(t, 0)|\psi(0)\rangle\right|^2.$$

Como estamos interessados em tempos pequenos até segunda ordem em t , expandimos o operador \hat{U} em série até segunda ordem:

$$\hat{U}(t, 0) \approx e^{-i\hat{H}t/\hbar} \simeq \mathbf{1} - \frac{it}{\hbar}\hat{H} - \frac{t^2}{2\hbar^2}\hat{H}^2 + \mathcal{O}(t^4)$$

Substituindo esta expansão na expressão acima,

$$\begin{aligned} \langle\psi(0)|\hat{U}(t, 0)|\psi(0)\rangle &\approx \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle - \frac{it}{\hbar}\langle\psi(0)|\hat{H}|\psi(0)\rangle - \frac{t^2}{\hbar^2}\langle\psi(0)|\hat{H}^2|\psi(0)\rangle \\ &= 1 - \frac{it}{\hbar}\langle\hat{H}\rangle - \frac{t^2}{2\hbar^2}\langle\hat{H}^2\rangle. \end{aligned}$$

Tomando o módulo quadrado,

$$\begin{aligned}
\left| \langle \psi(0) | \hat{U}(t, 0) | \psi(0) \rangle \right|^2 &\approx \left| 1 - \frac{it}{\hbar} \langle \hat{H} \rangle - \frac{t^2}{2\hbar^2} \langle \hat{H}^2 \rangle \right|^2 \\
&= \left(1 - \frac{t^2}{2\hbar^2} \langle \hat{H}^2 \rangle \right)^2 + \left(\frac{t}{\hbar} \langle \hat{H} \rangle \right)^2 \\
&= 1 - \frac{t^2}{\hbar^2} \langle \hat{H}^2 \rangle + \frac{t^2}{\hbar^2} \langle \hat{H} \rangle^2 + \mathcal{O}(t^4) \\
&= 1 - \frac{t^2}{\hbar^2} \left[\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 \right] + \mathcal{O}(t^4),
\end{aligned}$$

onde desprezamos termos de ordem superior a t^2 . Reparemos que a incerteza na energia é dada, por definição, pela quantidade

$$\delta E \equiv \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}.$$

Portanto, a probabilidade pretendida pode ser escrita como

$$\mathcal{P} = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 \simeq 1 - \left(\frac{t\delta E}{\hbar} \right)^2,$$

numa aproximação até à ordem t^2 .

Comentário à parte: Se o estado de um sistema quântico coincidir com um dos autoestados do Hamiltoniano (isto é, se $|\psi(0)\rangle = |\varepsilon_n\rangle$), a incerteza na energia é automaticamente zero. Podemos ver isso explicitamente porque, nesse caso,

$$(\delta E)^2 = \langle \varepsilon_n | \hat{H}^2 | \varepsilon_n \rangle - \langle \varepsilon_n | \hat{H} | \varepsilon_n \rangle^2 = \varepsilon_n^2 - \varepsilon_n^2 = 0.$$

O resultado acima para este problema diz-nos que, neste caso, como $\delta E = 0$ a probabilidade de o sistema permanecer no estado inicial é 1. Ou seja, o sistema permanece no estado inicial indefinidamente e, conseqüentemente, nada nesse sistema varia no tempo (valores esperados de qualquer observável, probabilidades, etc). Isto é o mesmo que dizer que o sistema permanece *estacionário*, já as medições de qualquer uma das suas propriedades terão os mesmos resultados/probabilidades associados, independentemente do instante em que sejam feitas. É por este facto que os autoestados do Hamiltoniano se designam também como “estados estacionários”: são estados em que todas as propriedades físicas do sistema permanecem estáticas.

— FIM DO TESTE —