Métodos de Operadores

Ney Lemke

Mecânica Quântica

2013

Visão Geral

As informações sobre um determinado sistema físico podem estar contidas:

- na função de onda $\psi(x)$
- na função de onda no espaço de momento $\phi(p)$
- nos coeficientes da expansão em termos de autofunções de enegia c_a

Visão Geral

Usando a notação de Dirac podemos representar de forma abstracta essas informações usando o vetor de estado:

$$|\psi\rangle$$

ou pelo seu vetor conjugado:

$$\langle\psi|$$

eles são chamados de “bras” : $\langle\psi|$ e de “kets” $|\psi\rangle$.
Observe que em Inglês “$\langle$” e “$\rangle$” são chamados de brackets.

Alice no País das maravilhas

Alice Would you tell me, please, which way I ought to go from here?

The Cat That depends a good deal on where you want to get to.

Alice I don't much care where.

Alice no País das maravilhas

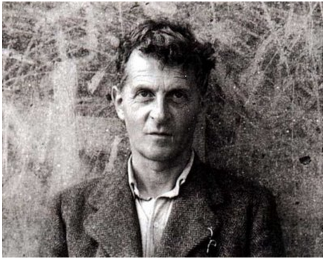
The Cat Then it doesn't much matter which way you go.

Alice ...so long as I get somewhere.

The Cat Oh, you're sure to do that, if only you walk long enough.

Wittgenstein

My propositions are elucidatory in this way: he who understands me finally recognizes them as senseless, when he has climbed out through them, on them, over them.



Poder da Notação

A notação de Dirac é uma das maravilhas modernas, muito mais concisa e intuitiva ela é o melhor veículo para transmitir MQ. Mas vamos precisar de um dicionário para migrar da nossa notação para a nova notação

Dicionário

1. $$\langle \phi | \psi \rangle$$
2. $$\langle \phi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \phi \rangle$$

1. $$\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \psi(x)$$
2. $$\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x) \psi(x) \right)^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) \psi(x)^*$$

Sanduíche

$$A|\psi\rangle = |A\psi\rangle$$

$$(A|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|A^\dagger$$

$$\langle\phi|A|\psi\rangle$$

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle$$

Identidade

Considere um conjunto completo de autovetores $|n\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$$

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

$$C_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$I = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

Teorema

Mostre que dois autokets são ortogonais se os autovalores de um operador Hermitiano forem diferentes.

$$\hat{H}|a\rangle = a|a\rangle$$

$$\hat{H}|b\rangle = b|b\rangle \quad \langle b|\hat{H}^{\dagger} = \langle b|b^{*} = \langle b|b$$

$$\langle b|\hat{H}|a\rangle = a\langle b|a\rangle$$
$$\langle b|\hat{H}|a\rangle = b\langle b|a\rangle$$

Temos que:

$$0 = (a - b)\langle b|a\rangle$$

Ou seja $a = b$ ou $\langle b|a\rangle = 0$

Posição

$$\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx C(x)|x\rangle$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

Posição

$$I = \int dx |x\rangle\langle x|$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int dx \langle\psi|x\rangle\langle x|\phi\rangle = \int dx \psi^*(x)\phi(x)$$

$$\langle\phi|A|\psi\rangle = \int dx \phi^* A \psi$$

Momentum

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle$$

$$= \int dp \phi(p)\langle x|p\rangle$$

Mas sabemos que:

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{-ipx/\hbar}$$

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}$$

Operadores de Projeção

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

Este operador projeta o estado no estado $|n\rangle$:

$$\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$$

.

Propriedades

$$P_n P_m = |n\rangle\langle n|m\rangle\langle m| = \delta_{mn}|n\rangle\langle n| = \delta_{mn} P_n$$

$$P_n^2 = P_n$$

Observável

Considere um observável $\hat{H}$ e sua base de autovetores $|n\rangle$ e autovalores E_n. Temos que:

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n E_n\langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_n E_n P_n|\psi\rangle$$

Oscilador Harmônico

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Classicamente temos que:

$$H = \omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}} x - i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}} x + i \frac{p}{\sqrt{2m\omega}} \right)$$

Caso Quântico

$$\hat{H} = \omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}} \right) =$$

$$\omega \left(\frac{m\omega\hat{x}^2}{2} + \frac{1}{2m\omega}\hat{p}^2 - \frac{i}{2}(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} \right) =$$

$$\frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{1}{2}\omega\hbar$$

Operadores Criação e Destruição

$$A = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

$$A^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

$$[A, A^{\dagger}] = 1$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(A^{\dagger}A + \frac{1}{2}\right)$$

Comutadores

$$[\hat{H}, A] = -\hbar\omega A \quad [\hat{H}, A^\dagger] = \hbar\omega A^\dagger$$

Autovalores e autovetores

$$\hat{H}A|E\rangle = (A\hat{H} - \hbar\omega A)|E\rangle = (E - \hbar\omega)A|E\rangle$$

Conclusão $A|E\rangle$ são autoestados de E com autovalor $E - \hbar\omega$.
O operador A “destrói fótons”!

Autovalores e autovetores

Existe um estado de mínima energia.

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \frac{1}{2m}\langle\psi|p^2|\psi\rangle + \frac{m\omega^2}{2}\langle\psi|x^2|\psi\rangle =$$

$$\frac{1}{2m}\langle p\psi|p\psi\rangle + \frac{m\omega^2}{2}\langle x\psi|x\psi\rangle \geq 0$$

Tomando $|\psi\rangle$ como sendo um autoestado da energia, esta relação implica que os autovalores são todos positivos.

$$\langle E|\hat{H}|E\rangle = E > 0$$

Autovalores e autovetores

O autoestado de mínima energia satisfaz:

$$A|0\rangle = 0$$

Qual é a energia desse estado?

$$|\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega\left(A^{\dagger}A + \frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle$$

Estado de mínima energia possui energia $\hbar\omega/2$.

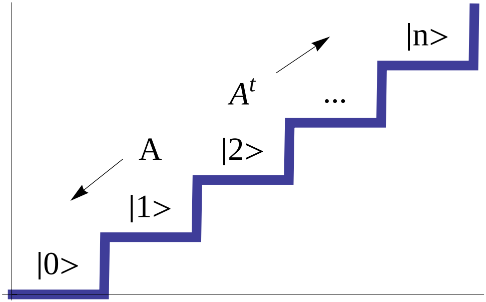
Autovalores e autovetores

$$\hat{H}|A^{\dagger}|0\rangle = (A^{\dagger}\hat{H} + \hbar\omega A^{\dagger}|0\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2}A^{\dagger}|0\rangle$$

Ou seja $A^{\dagger}$ cria um fóton. Aplicando $A^{\dagger}$ sucessivamente obtemos os diferentes valores de energia possíveis.

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Escada



Autoestados

$$(A^\dagger)^n|0\rangle = C|n\rangle$$

C =?

$$C = \sqrt{n!}$$

$$|n\rangle = \frac{(A^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

Funções de onda

Devemos determinar $\langle n|x\rangle$, as autofunções do operador Hamiltoniano.

$$|n\rangle = \frac{(A^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left\langle x\left|\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}\right)^n\right|0\right\rangle$$

Para conseguir fazer esse cáculo precisamos de dois ingredientes

$$\langle x|\hat{x}|0\rangle \quad \langle x|\hat{p}|0\rangle$$

$\langle x|\hat{x}|0\rangle$

$$\langle x|\hat{x}|0\rangle = x\langle x|0\rangle = xu_o(x)$$

$\langle x|\hat{p}|0\rangle$

$$\langle x|\hat{p}|0\rangle = \int dp\langle x|\hat{p}|p\rangle\langle p|0\rangle$$

$$= \int dpp\langle x|p\rangle\langle p|0\rangle$$

Interpretando:

$$\int dppe^{ixp/\hbar}\phi_o(p) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\int dpe^{ixp/\hbar}\phi_o(p)$$

onde $\phi_o(p)$ é a autofunção de energia na representação p.

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}u_o(x)$$

Funções de onda

Devemos determinar $\langle n|x\rangle$, as autofunções do operador Hamiltoniano.

$$\langle x|n\rangle = \left\langle x \left| \frac{(A^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \right| 0 \right\rangle$$

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left\langle x \left| \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p} \right)^n \right| 0 \right\rangle$$

Com alguma dose de fé:

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x} \right)^n u_o(x)$$

Funções de onda: $u_o(x)$

$$Au_o(x) = 0$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) u_o(x) = 0$$

Resolvendo esta equação temos que:

$$u_o = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{(1/4)} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Finalmente temos:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{(1/4)} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Dependência temporal dos operadores

Equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

$$\langle B\rangle_t = \langle\psi(t)|\hat{B}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{B}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(t)\rangle$$

$$\hat{B}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{B}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

“Picture de Heisenberg”

Picture de Heisenberg

$$\frac{d\hat{B}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{H}\hat{B} e^{-i\hat{H}t/\hbar} - \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{B}\hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$\frac{d\hat{B}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{B}(t)]$$

Exemplo: Oscilador Harmônico

$$A(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} A e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$A^\dagger(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} A^\dagger e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$[A(t), A^\dagger(t)] = 1$$

$$[\hat{H}, A(t)] = \hbar\omega A(t)$$

$$[\hat{H}, A^\dagger(t)] = -\hbar\omega A^\dagger(t)$$

$$\frac{dA(t)}{dt} = -i\omega A(t)$$

$$\frac{dA^\dagger(t)}{dt} = i\omega A^\dagger(t)$$

Exemplo: Oscilador Harmônico

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0)\cos\omega t - m\omega\hat{x}(0)\sin\omega t$$

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0)\cos\omega t - \frac{\hat{p}(0)}{m\omega}\hat{x}(0)\sin\omega t$$