Resolução da Lista 3 de Mecânica Quântica I (F689, Turma B)

Pedro Rangel Caetano*

Universidade Estadual de Campinas, 10. semestre de 2017

Sumário

2
4
4
5
9
13
15
18
19
21
22
24
27

^{*}Email: p.r.caetano@gmail.com

1. (Bransdeen and Joachian, página 260)

Seja o conjunto de operadores: são operadores lineares? e caso sejam são operadores hermitianos?

- (A) $\hat{A}_1 \Psi(x) = (\Psi(x))^2$
- (B) $\hat{A}_2 \Psi(x) = \frac{d}{dx} \Psi(x)$
- (C) $\hat{A}_3 \Psi(x) = \int_0^x \Psi(x') dx'$
- (D) $\hat{A}_4 \Psi(x) = x^2 \Psi(x)$
- (E) $\hat{A}_5 \Psi(x) = \sin \Psi(x)$
- (F) $\hat{A}_6 \Psi(x) = \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x)$
- (G) $\hat{A}_7 \Psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \Psi(x)$
- (H)

$$\hat{A}_8 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

(I)

$$\hat{A}_9 = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

(J) $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{R}} \times \hat{\vec{P}}$, onde $\hat{\vec{R}}$ é o operador vetor posição e $\hat{\vec{P}}$ é o operador vetor momento.

Resolução:

(A) Não é linear:

$$\hat{A}_{1}(a\Psi_{1}(x) + b\Psi_{2}(x)) = (a\Psi_{1}(x) + b\Psi_{2}(x))^{2} \neq a\hat{A}_{1}\Psi_{1}(x) + b\hat{A}_{1}\Psi_{2}(x)$$

(B) É linear pois a derivada é linear. Não é hermitiano (é anti-hermitiano):

$$\begin{split} \left\langle \varphi \right| \hat{A}_2 \left| \Psi \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x) \frac{d}{dx} \Psi(x) \\ &= \left. \varphi^*(x) \Psi(x) \right|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x) \frac{d}{dx} \varphi^*(x) \\ &= - \left(\left\langle \Psi \right| \hat{A}_2 \left| \Psi \right\rangle \right)^* \end{split}$$

(o termo de bordo se anula pois para que o produto interno $\langle \Phi | \Psi \rangle$ convirja o integrando deve tender a zero em $\pm \infty$).

(C) É linear, pois a integral é linear. Não é hermitiano: este operador é o inverso de \hat{A}_2 , pelo teorema fundamental do cálculo, portanto \hat{A}_3 é hermitiano se e somente se \hat{A}_2 o for.

2

(D) É linear, pois a multiplicação é distributiva. É hermitiano:

$$\begin{split} \langle \varphi | \, \hat{A}_4 \, | \Psi \rangle &= \int dx \varphi^*(x) x^2 \Psi(x) \\ &= \left(\int dx \Psi^*(x) x^2 \varphi(x) \right)^* \\ &= \left(\langle \Psi | \, \hat{A}_4 \, | \Psi \rangle \right)^* \end{split}$$

- (E) Não é linear, pois $sin(a + b) \neq sin(a) + sin(b)$.
- (F) É linear, novamente pois derivadas n-ésimas são lineares. É hermitiano:

$$\begin{split} \left\langle \varphi \right| \hat{A}_6 \left| \Psi \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) \\ &= \left. \varphi^* \frac{d\varphi^*}{dx} \right|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\varphi^*(x)}{dx} \frac{d\Psi(x)}{dx} \\ &= -\frac{d\varphi}{dx} \frac{d\Psi}{dx} \bigg|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d^2 \varphi^*(x)}{dx^2} \Psi(x) \\ &= \left(\left\langle \Psi \right| \hat{A}_6 \left| \varphi \right\rangle \right)^* \end{split}$$

(novamente os termos de bordo se anulam pois as funções devem ser de quadrado integrável).

(G) É linear, pois derivadas são lineares. É hermitiano: basta notar que $\hat{A}_7 = -i\hbar\hat{A}_2$, portanto

 $\hat{A}_7^\dagger = i\hbar\hat{A}_2^\dagger = -i\hbar\hat{A}_2 = \hat{A}_7^\dagger$

(H) É linear, pois multiplicação de matrizes é distributiva. Não é hermitiana, pois

$$\hat{A}_8^{\dagger} = \begin{pmatrix} 1^* & 1^* \\ 0^* & 1^* \end{pmatrix}^{\mathsf{T}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \neq \hat{A}_8$$

(I) Novamente é linear pois multiplicação de matrizes é distributiva. É hermitiana, pois

$$\hat{A}_9^\dagger = egin{pmatrix} 1^* & i^* \ -i^* & 1^* \end{pmatrix}^\mathsf{T} = egin{pmatrix} 1 & i \ -i & 1 \end{pmatrix} = \hat{A}_9$$

(J) Fazendo a identificação

$$1 \rightarrow x$$
 $2 \rightarrow y$ $3 \rightarrow z$

Temos

$$\hat{\vec{L}} = \sum \epsilon_{ijk} \hat{x_i} \hat{p_j} e_k,$$

onde ε_{ijk} denota o símbolo de Levi-Civita. A linearidade é consequência da linearidade dos operadores posição e momento (pois composições de operadores lineares são lineares). Para a hermiticidade temos, usando que os operadores posição e momento são hermitianos:

$$\hat{\vec{L}}^{\dagger} = \sum \varepsilon_{ijk} \left(\hat{x_i} \hat{p_j} \right)^{\dagger} e_k = \sum \varepsilon_{ijk} \hat{p_j}^{\dagger} \hat{x_i}^{\dagger} e_k = \sum \varepsilon_{ijk} \hat{x_i} \hat{p_j} e_k = \hat{\vec{L}}$$

(onde comutamos x_i e p_j pois estes operadores falham em comutar somente caso i = j, e neste caso $\varepsilon_{iik} = 0$.)

2. Mostre que a ação de dois operadores e B pode ser representada em forma matricial da seguinte forma: $(AB)_{mn} = \sum_p A_{mp} B_{pn}$.

Resolução: Sendo $|u_i\rangle$ uma base do espaço, temos

$$A_{ij} = \left\langle u_i \right| \hat{A} \left| u_j \right\rangle$$

Usando a identidade

$$\sum_{i}\left|u_{i}\right\rangle \left\langle u_{i}\right|=\hat{1}$$

Temos

$$\begin{split} (AB)_{mn} &= \left\langle u_m \right| (AB) \left| u_n \right\rangle \\ &= \sum_p \left\langle u_m \right| A \left| u_p \right\rangle \left\langle u_p \right| B \left| u_n \right\rangle \\ &= \sum_p A_{mp} B_{pn} \end{split}$$

- 3. Seja o projetor $\hat{P}_n = |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$, onde $|\varphi_n\rangle$ são os vetores normalizados de uma base no espaço de Hilbert.
 - (A) Mostre que é um operador hermitiano.
 - (B) O nome projetor vem do fato da propriedade $\hat{P}_{n}^{2}=\hat{P}_{n}.$ Mostre essa propriedade.
 - (C) Calcule os autovalores e autovetores.

Resolução:

(A) Basta notar que

$$\hat{P}_{n}^{\dagger}=\left(\left|\varphi_{n}\right\rangle \left\langle \varphi_{n}\right|\right)^{\dagger}=\left|\varphi_{n}\right\rangle \left\langle \varphi_{n}\right|=\hat{P}_{n}$$

(B) Temos, lembrando que $|\varphi_n\rangle$ é normalizado e portanto $\langle \varphi_n|\varphi_n\rangle=1$:

$$\begin{split} \hat{P}_{n}^{2} &= \hat{P}_{n} \hat{P}_{n} \\ &= \left| \varphi_{n} \right\rangle \left\langle \varphi_{n} \middle| \varphi_{n} \right\rangle \left\langle \varphi_{n} \middle| \\ &= \left| \varphi_{n} \right\rangle \left\langle \varphi_{n} \middle| \\ &= \hat{P}_{n} \end{split}$$

(C) O problema de autovalores para o operador \hat{P}_n é escrito

$$\hat{P}_n \left| \Psi_i \right\rangle = \lambda_i \left| \Psi_i \right\rangle$$

Como os vetores $|\varphi_k\rangle$ formam uma base normalizada do espaço, vale a identidade

$$\sum_{k}\left|\varphi_{k}\right\rangle \left\langle \varphi_{k}\right|=\boldsymbol{\hat{1}}$$

Portanto, assumindo que a base é ortonormal

$$\begin{split} \sum_{k} P_{n} \left| \varphi_{k} \right\rangle \left\langle \varphi_{k} | \Psi_{i} \right\rangle &= \sum_{k} \lambda_{i} \left| \varphi_{k} \right\rangle \left\langle \varphi_{k} | \Psi_{i} \right\rangle \\ \sum_{k} \left\langle \varphi_{k} | \Psi_{i} \right\rangle \left| \varphi_{n} \right\rangle \left\langle \varphi_{n} | \varphi_{k} \right\rangle &= \sum_{k} \lambda_{i} \left\langle \varphi_{k} | \Psi_{i} \right\rangle \left| \varphi_{k} \right\rangle \\ \sum_{k} \delta_{nk} \left\langle \varphi_{k} | \Psi_{i} \right\rangle \left| \varphi_{k} \right\rangle &= \sum_{k} \lambda_{i} \left\langle \varphi_{k} | \Psi_{i} \right\rangle \left| \varphi_{k} \right\rangle \end{split}$$

Como os $|\phi_k\rangle$ são linearmente independentes devemos ter, para todo k,

$$(\lambda_i - \delta_{nk}) \langle \phi_k | \Psi_i \rangle = 0$$

Desmembrando esta equação nos casos k = n e $k \neq n$ temos

$$\begin{cases} (\lambda_i - 1) \langle \varphi_k | \Psi_i \rangle = 0 & \text{se } k = n \\ \lambda_i \langle \varphi_k | \Psi_i \rangle = 0 & \text{se } k \neq n \end{cases}$$

Analisando as equações anteriores, notamos que há apenas dois valores possíveis para λ_i : $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_1 = 1$ (para todos os outros valores as equações acima implicam $\langle \varphi_k | \Psi_i \rangle = 0$ para todo k; como $|\Psi_i \rangle = \sum_k \langle \varphi_k | \Psi_i \rangle | \varphi_k \rangle$ isto implicaria $|\Psi_i \rangle = 0$).

• $\lambda_0=0$: Neste caso a segunda equação é satisfeita para quaisquer valores de $\langle \varphi_k | \Psi_0 \rangle$. A primeira equação, entretanto, exige que $\langle \varphi_n | \Psi_0 \rangle = 0$. Concluímos então que os autovetores são todos da forma

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{k \neq n} c_k |\phi_k\rangle$$

sendo c_k arbitrário.

• $\lambda_1 = 1$: Neste caso a primeira equação é automaticamente satisfeita, portanto $\langle \varphi_n | \Psi_1 \rangle$ pode assumir qualquer valor. A segunda equação, porém, exige que $\langle \varphi_k | \Psi_1 \rangle = 0$ para todo $k \neq n$. Os autovetores são então da forma

$$|\Psi_1\rangle = c_n |\phi_n\rangle$$

para c_n arbitrário.

4. Um Hamiltoniano é dado por

$$H = c^2 \begin{pmatrix} m_{\mu} & m \\ m & m_{\tau} \end{pmatrix} \tag{1}$$

onde m, m_{μ} e m_{τ} são números reais e os vetores da base são dados por

$$|\nu_{\mu}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |\nu_{\tau}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- (A) Ache os autovalores e autovetores deste Hamiltoniano.
- (B) Assuma que no instante t=0, o sistema está no estado $|\Psi(t=0)\rangle=|\nu_{\mu}\rangle$. Então o sistema no instante t estará no estado $|\Psi(t)\rangle$, determine este estado. Qual é a probabilidade de o sistema estar no estado $|\nu_{\tau}\rangle$ no instante t? Esta probabilidade está relacionado com o Prêmio Nobel de 2015, pela descoberta da oscilação dos neutrinos. Ciência Hoje de Dezembro de 2015: Metamorfose Fantasmagórica
- (C) A matrix H (1) é Hermitiana? Se sim use a propriedade que pode ser diagonalizada por uma matriz unitária escrita na forma:

$$U = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \tag{2}$$

Mostre que esta matriz é unitária: $U^{-1} = U^{\dagger}$. Diagonalize a matriz H por esta transformação unitária e ache o valor do ângulo θ que diagonaliza esta matriz H. Como podemos achar os autovetores de H usando este procedimento?

Resolução:

(A) O polinômio característico do Hamiltoniano é

$$p(E) = c^2 \left[(m_{\mu} - E)(m_{\tau} - E) - m^2 \right] = E^2 - (m_{\tau} + m_{\mu})E + m_{\mu}m_{\tau} - m^2$$

As raízes deste polinômio são

$$\begin{split} E_{\pm}/c^2 &= \frac{m_{\mu} + m_{\tau}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(m_{\tau} + m_{\mu})^2 - 4m_{\mu}m_{\tau} + 4m^2} \\ &= \overline{m} \pm m \sqrt{\left(\frac{m_{\tau} - m_{\mu}}{2m}\right)^2 + 1} \\ &= \overline{m} \pm m \sqrt{\left(\frac{\Delta m}{2m}\right)^2 + 1} \\ &= \overline{m} \pm m \sqrt{\cot^2 2\theta + 1} \\ &= \overline{m} \pm \frac{m}{\sin 2\theta} \end{split}$$

onde definimos

$$\overline{m} = \frac{m_{\mu} + m_{\tau}}{2} \qquad \Delta m = m_{\tau} - m_{\mu} \qquad \theta = \frac{1}{2} \cot^{-1} \frac{\Delta m}{2m}$$

O autovetor associado ao autovalor E+ satisfaz

$$\begin{split} c^2 \begin{pmatrix} m_\mu & m \\ m & m_\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E_+ \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} m_\mu & m \\ m & m_\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \left(\overline{m} + \frac{m}{\sin 2\theta} \right) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\ \Rightarrow m_\mu \alpha + m\beta = \left(\overline{m} + \frac{m}{\sin 2\theta} \right) \alpha \\ \begin{pmatrix} m_\mu - \frac{m_\mu + m_\tau}{2} - \frac{m}{\sin 2\theta} \right) \alpha + m\beta = 0 \\ -\left(\frac{\Delta m}{2m} - \frac{1}{\sin 2\theta} \right) \alpha + \beta = 0 \\ -\left(\frac{\cos 2\theta}{\sin 2\theta} \sin 2\theta + 1 \right) \alpha + \sin 2\theta \beta = 0 \\ -\left(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta + 1 \right) \alpha + 2\sin \theta \cos \theta \beta = 0 \\ -2\cos^2 \theta \alpha + 2\sin \theta \cos \theta \beta = 0 \\ -\cos \theta \alpha + \sin \theta \beta = 0 \end{split}$$

O autovetor associado ao autovalor E+ pode então ser escrito como

$$|\nu_{+}\rangle = \sin\theta |\nu_{\mu}\rangle + \cos\theta |\nu_{\tau}\rangle$$

Lembrando que autovetores associados a autovalores distintos são sempre ortogonais podemos agora imediatamente escrever o autovetor associado a E_

$$|\nu_{-}\rangle = -\cos\theta |\nu_{\mu}\rangle + \sin\theta |\nu_{\tau}\rangle$$

(B) Primeiramente vamos escrever $|\nu_{\mu}\rangle$ e $|\nu_{\tau}\rangle$ na base de autoestados de H:

$$\begin{split} |\nu_{\mu}\rangle &= \langle \nu_{+}|\nu_{\mu}\rangle + \langle \nu_{-}|\nu_{\mu}\rangle \\ &= \sin\theta\,|\nu_{+}\rangle - \cos\theta\,|\nu_{-}\rangle \end{split}$$

$$\begin{split} |\nu_{\tau}\rangle &= \langle \nu_{+}|\nu_{\tau}\rangle + \langle \nu_{-}|\nu_{\tau}\rangle \\ &= \cos\theta \, |\nu_{+}\rangle + \sin\theta \, |\nu_{-}\rangle \end{split}$$

Notamos agora que a evolução temporal dos ket's $|\nu_{\pm}\rangle$ é obtida multiplicando-os por $\exp(-iE_{\pm}t/\hbar)$. Temos então para $|\Psi(t)\rangle$:

$$\begin{split} |\Psi(t)\rangle &= \sin\theta e^{-i\frac{E_{+}}{\hbar}t} |\nu_{+}\rangle - \cos\theta e^{-i\frac{E_{+}}{\hbar}t} |\nu_{-}\rangle \\ &= e^{-\frac{i\pi c^{2}t}{\hbar}} \left(\sin\theta e^{-\frac{i\pi c^{2}t}{\hbar\sin2\theta}} |\nu_{+}\rangle - \cos\theta e^{\frac{i\pi c^{2}t}{\hbar\sin2\theta}} |\nu_{-}\rangle \right) \end{split}$$

A probabilidade de o sistema estar no estado $|v_{\tau}\rangle$ no instante t é dada pelo valor

 $|\langle \nu_{\tau} | \Psi(t) \rangle|^2$. Calculando

$$\begin{split} \langle \nu_\tau | \Psi(t) \rangle &= e^{-\frac{i \overline{m} c^2 t}{\hbar}} \left(\sin \theta e^{-\frac{i m c^2 t}{\hbar \sin 2\theta}} \left\langle \nu_\tau | \nu_+ \right\rangle - \cos \theta e^{\frac{i m c^2 t}{\hbar \sin 2\theta}} \left\langle \nu_\tau | \nu_- \right\rangle \right) \\ &= e^{-\frac{i \overline{m} c^2 t}{\hbar}} \left(\sin \theta \cos \theta e^{-\frac{i m c^2 t}{\hbar \sin 2\theta}} - \sin \theta \cos \theta e^{\frac{i m c^2 t}{\hbar \sin 2\theta}} \right) \\ &= e^{-\frac{i \overline{m} c^2 t}{\hbar}} \sin 2\theta i \frac{1}{2i} \left(e^{-\frac{i m c^2 t}{\hbar \sin 2\theta}} - e^{\frac{i m c^2 t}{\hbar \sin 2\theta}} \right) \\ &= -i e^{-\frac{i \overline{m} c^2 t}{\hbar}} \sin 2\theta \sin \left(\frac{m c^2 \hbar}{\sin 2\theta} t \right) \end{split}$$

A probabilidade desejada é, portanto

$$p = \sin^2 2\theta \cdot \sin^2 \left(\frac{mc^2\hbar}{\sin 2\theta} t \right).$$

(C) Sim, a matriz H é hermitiana:

$$\mathsf{H}^\dagger = c^2 egin{pmatrix} \mathfrak{m}^* & \mathfrak{m}^* \\ \mathfrak{m}^* & \mathfrak{m}^*_{ au} \end{pmatrix}^\mathsf{T} = c^2 egin{pmatrix} \mathfrak{m}_{\mu} & \mathfrak{m} \\ \mathfrak{m} & \mathfrak{m}_{ au} \end{pmatrix} = \mathsf{H}$$

A matriz de rotação U é unitária:

$$\begin{split} UU^\dagger &= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2\theta + \sin^2\theta & -\sin\theta\cos\theta + \sin\theta\cos\theta \\ -\sin\theta\cos\theta + \sin\theta\cos\theta & \sin^2\theta + \cos^2\theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{split}$$

Podemos então diagonalizar H na forma

$$\begin{split} U^\dagger H U &= c^2 \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_\mu & m \\ m & m_\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \\ &= c^2 \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_\mu\cos\theta - m\sin\theta & m_\mu\sin\theta + m\cos\theta \\ m\cos\theta - m_\tau\sin\theta & m\sin\theta + m_\tau\cos\theta \end{pmatrix} \\ &= c^2 \begin{pmatrix} m_\mu\cos^2\theta - m\sin2\theta + m_\tau\sin^2\theta & m\cos2\theta - \frac{m_\tau - m_\mu}{2}\sin2\theta \\ m\cos2\theta - \frac{m_\tau - m_\mu}{2}\sin2\theta & m_\mu\sin^2\theta + m\sin2\theta + m_\tau\cos^2\theta \end{pmatrix} \end{split}$$

Para que a última matriz seja diagonal é preciso que as entradas não diagonais se anulem. Temos, então

$$m\cos 2\theta - \frac{\Delta m}{2}\sin 2\theta = 0$$

$$\cot 2\theta = \frac{\Delta m}{2m}$$

$$\theta = \frac{1}{2}\cot^{-1}\left(\frac{\Delta m}{2m}\right)$$

Para encontrar os autovetores de H usando este método, basta notar que os vetores coluna

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

são autovetores da matriz $U^{\dagger}HU$, cujo autovalor associado é a entrada correspondente na diagonal da matriz. Nestas condições,

$$u\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\qquad u\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

serão autovetores de H, como pode ser provado multiplicando o problema de autovalores para $U^{\dagger}HU$ por U. Consequentemente, **os autovetores de** H **correspondem às colunas de** U.

5. O Hamiltoniano de um sistema de três níveis é representado pela matriz

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

e tem dois observáveis A e B representados por

$$\hat{A} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

e

$$\hat{B} = \mu \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

onde ω , λ e μ são reais positivos.

- (A) Os operadores A e B são operadores lineares? São hermitianos?
- (B) Encontre os autovalores e autovetores normalizados de H, A e B.
- (C) Quais são os valores possíveis das quantidades H, A e B?
- (D) Ache os comutadores entre H, A e B.
- (E) Suponha que o sistema começa no estado

$$|\psi(t=0)\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0\\0 \end{pmatrix}$$

que é um estado normalizado. Encontre os valores esperados de H, A e B em t.

(F) Qual é o estado $|\psi(t)\rangle$? Se você medir a energia no tempo t que valores você pode ter? Qual é a probabilidade de obter cada um desses valores?

9

Resolução:

(A) Sim, são lineares pois a multiplicação de matrizes por vetores é distributiva. Também são hermitianos: basta notar que a transposta conjugada de A e B é idêntica aos próprios:

$$A^{\dagger} = \lambda^* \begin{pmatrix} 0^* & 1^* & 0^* \\ 1^* & 0^* & 0^* \\ 0^* & 0^* & 2^* \end{pmatrix}^{\mathsf{T}} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = A$$

$$B^{\dagger} = \mu^* \begin{pmatrix} 2^* & 0^* & 0^* \\ 0^* & 0^* & 1^* \\ 0^* & 1^* & 0^* \end{pmatrix}^{\mathsf{T}} = \lambda \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = B$$

(B) Como H é diagonal, por inspeção concluímos que seus autovalores são $E_1 = \hbar \omega$ e $E_2 = E_3 = 2\hbar \omega$, e seus autovetores associados são $\left|\Psi_H^{(1)}\right> = |1\rangle$, $\left|\Psi_H^{(2)}\right> = |2\rangle$ e $\left|\Psi_H^{(3)}\right> = |3\rangle$.

Para A temos o polinômio característico

$$p_A(\xi) = \lambda \begin{vmatrix} -\xi & 1 & 0 \\ 1 & -\xi & 0 \\ 0 & 0 & 2 - \xi \end{vmatrix} = \lambda(\xi^2 - 1)(2 - \xi)$$

Os autovalores de A são portanto

$$\lambda_A^{(1)} = -\lambda \qquad \lambda_A^{(2)} = \lambda \qquad \lambda_A^{(3)} = 2\lambda.$$

Como A é diagonal por blocos podemos estudar os autovetores de cada bloco separadamente. No bloco superior temos os autovetores associados aos autovalores $\lambda_A^{(1)} = -\lambda \ e \ \lambda_A^{(2)} = \lambda$:

$$\begin{pmatrix} 0 & \lambda \\ \lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ b \end{pmatrix} = \pm \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ b \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \pm \lambda \alpha \\ \pm \lambda b \end{pmatrix}$$
$$\Rightarrow b = \pm \alpha$$

Escolhemos então os autovetores

$$\left|\Psi_{A}^{(1)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|1\right\rangle - \left|2\right\rangle\right) \qquad \left|\Psi_{A}^{(2)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|1\right\rangle + \left|2\right\rangle\right)$$

Já ao bloco inferior está associado o autovetor

$$\left|\Psi_{A}^{(3)}\right\rangle = \left|3\right\rangle.$$

Para B por sua vez, temos o polinômio característico

$$p_{B}(\xi) = \mu \begin{vmatrix} 2 - \xi & 0 & 0 \\ 0 & -\xi & 1 \\ 0 & 1 & -\xi \end{vmatrix} = \mu(2 - \xi)(\xi^{2} - 1)$$

Os autovalores de B são, então

$$\lambda_B^{(1)} = -\mu \qquad \lambda_B^{(2)} = \mu \qquad \lambda_B^{(3)} = 2\mu. \label{eq:lambda_B}$$

Novamente vamos analisar os autovalores por blocos. O primeiro bloco é trivial, e o autovetor, associado ao autovalor 2µ, é

$$\left|\Psi_{\rm B}^{(3)}\right\rangle = \left|1\right\rangle$$

O outro bloco é quase idêntico ao bloco já analisado para a matriz A. Escolhemos então os autovetores

$$\left|\Psi_{\mathrm{B}}^{(1)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|2\right\rangle - \left|3\right\rangle\right) \qquad \left|\Psi_{\mathrm{B}}^{(2)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|2\right\rangle + \left|3\right\rangle\right).$$

- (C) Os valores possíveis para um observável são os autovalores do mesmo. Os valores possíveis para H são, portanto, $\hbar\omega$ e $2\hbar\omega$; os de A são $-\lambda$, λ e 2λ e os de B são $-\mu$, μ e 2μ .
- (D) Temos

$$\begin{split} [H,A] &= \hbar \omega \lambda \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \\ &= \hbar \omega \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \\ &= \hbar \omega \lambda \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{split}$$

$$\begin{split} [H,B] &= \hbar \omega \mu \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \\ &= \hbar \omega \mu \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{split}$$

$$\begin{split} [A,B] &= \lambda \mu \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \\ &= \lambda \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \lambda \mu \begin{pmatrix} 0 & -2 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ -1 & 2 & 0 \end{pmatrix} \end{split}$$

(E) Temos para o valor esperado de H, $\langle H \rangle_{\psi}$:

$$\begin{split} \langle H \rangle_{\Psi} &= \hbar \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \hbar \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \hbar \omega \end{split}$$

Já para o valor esperado de A:

$$\begin{split} \langle A \rangle_{\Psi} &= \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= 0 \end{split}$$

E, por fim, para o valor esperado de B:

$$\begin{split} \langle B \rangle_{\Psi} &= \mu \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \mu \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= 2\mu \end{split}$$

(F) Como $|\Psi(t=0)\rangle$ é autovetor de H com autovalor $\hbar\omega$ o sistema está em um estado estacionário. Temos então $|\Psi(t)\rangle=e^{-i\omega t}|1\rangle$, e o único valor possível para uma medida futura da energia é $\hbar\omega$, com probabilidade 1.

6. Seja um espaço de Hilbert de três dimensões com uma base ortonormal $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \alpha |1\rangle + b |2\rangle + c |3\rangle$$
 $|\phi\rangle = b |1\rangle + \alpha |2\rangle$

- (A) Calcule $\langle \Psi |$, $\langle \varphi |$. Compute $\langle \Psi | \varphi \rangle$ e $\langle \varphi | \Psi \rangle$.
- (B) Expresse $|\Psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ como vetores coluna e recalcule.
- (C) Calcule $A = |\Psi\rangle\langle\phi|$. Encontre a representação 3x3 deste operador.
- (D) Calcule $Q = |\Psi\rangle \langle \Psi| + |\phi\rangle \langle \phi|$. Este operador é hermitiano? Mostre que tem um autovalor nulo.

Resolução:

(A) Para conjugar uma expressão, trocamos todos os bra's por ket's e todos os números complexos por seus conjugados. Temos então

$$\langle \Psi | = \mathfrak{a}^* \langle 1 | + \mathfrak{b}^* \langle 2 | + \mathfrak{c}^* \langle 3 | \qquad \langle \varphi | = \mathfrak{b}^* \langle 1 | + \mathfrak{a}^* \langle 2 |$$

Portanto

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = (\alpha^* \langle 1| + b^* \langle 2| + c^* \langle 3|) (b | 1 \rangle + \alpha | 2 \rangle)$$
$$= \alpha^* b + b^* \alpha$$

e

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = (b^* \langle 1| + a^* \langle 2|) (a | 1 \rangle + b | 2 \rangle + c | 3 \rangle)$$

= $b^* a + a^* b$

(B) Temos

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \qquad |\phi\rangle = \begin{pmatrix} b \\ a \\ 0 \end{pmatrix}$$

Neste caso, a operação de conjugação consiste em transpor as matrizes ou vetores envolvidos e conjugar os números complexos. Temos então

$$\langle \Psi | = \begin{pmatrix} \mathfrak{a}^* & \mathfrak{b}^* & \mathfrak{c}^* \end{pmatrix} \qquad \langle \varphi | = \begin{pmatrix} \mathfrak{b}^* & \mathfrak{a}^* & \mathfrak{0} \end{pmatrix}$$

Portanto

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \begin{pmatrix} a^* & b^* & c^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$= a^*b + b^*a$$

e

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \begin{pmatrix} b^* & a^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

$$= b^* a + a^* b$$

(C) Temos

$$\begin{split} A &= |\Psi\rangle \left\langle \varphi \right| \\ &= \left(\alpha \left| 1 \right\rangle + b \left| 2 \right\rangle + c \left| 3 \right\rangle\right) \left(b^* \left\langle 1 \right| + \alpha^* \left\langle 2 \right|\right) \\ &= ab^* \left| 1 \right\rangle \left\langle 1 \right| + a\alpha^* \left| 1 \right\rangle \left\langle 2 \right| + bb^* \left| 2 \right\rangle \left\langle 1 \right| + b\alpha^* \left| 2 \right\rangle \left\langle 2 \right| + cb^* \left| 3 \right\rangle \left\langle 1 \right| + c\alpha^* \left| 3 \right\rangle \left\langle 2 \right| \end{split}$$

A representação 3x3 é dada por

$$A = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b^* & a^* & 0 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} ab^* & aa^* & 0 \\ bb^* & ba^* & 0 \\ cb^* & ca^* & 0 \end{pmatrix}$$

(D) Podemos calcular o conjugado hermitiano de Q utilizando as regras usuais: basta inverter a ordem das expressões, trocar bra's por ket's, ket's por bra's e números complexos por seus conjugados. Temos então para Q[†]:

$$Q^{\dagger} = \left(\left| \Psi \right\rangle \left\langle \Psi \right| + \left| \varphi \right\rangle \left\langle \varphi \right| \right)^{\dagger} = \left| \Psi \right\rangle \left\langle \Psi \right| + \left| \varphi \right\rangle \left\langle \varphi \right| = Q$$

Portanto Q é hermitiano.

Para o autovalor nulo, note que um autovetor com autovalor nulo de um operador é simplesmente um vetor do núcleo do operador (ou seja, um vetor que atuado pelo operador é levado ao vetor nulo). Para mostrar que Q possui um autovalor nulo basta portanto mostrar que existe um vetor $|\xi\rangle$ tal que

$$Q |\xi\rangle = \langle \Psi | \xi \rangle | \Psi \rangle + \langle \varphi | \xi \rangle | \varphi \rangle = 0.$$

Analisando a expressão anterior, podemos buscar $|\xi\rangle$ simultaneamente ortogonal a $|\Psi\rangle$ e $|\phi\rangle$, de forma que $\langle\Psi|\xi\rangle=\langle\phi|\xi\rangle=0$. Se estivéssemos em \mathbb{R}^3 esta tarefa seria fácil: bastaria realizar o produto vetorial. Podemos porém definir um produto vetorial complexo da seguinte forma:

$$|\xi\rangle = (\alpha |1\rangle + b |2\rangle + c |3\rangle) \times (b |1\rangle + \alpha |2\rangle + 0 |3\rangle \equiv \begin{vmatrix} |1\rangle & |2\rangle & |3\rangle \\ \alpha^* & b^* & c^* \\ b^* & \alpha^* & 0 \end{vmatrix}$$
$$= -\alpha^* c^* |1\rangle + b^* c^* |2\rangle + (\alpha^{*2} - c^{*2}) |3\rangle$$

Então

$$\langle \Psi | \xi \rangle = \begin{pmatrix} \alpha^* & b^* & c^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\alpha^* c^* \\ b^* c^* \\ \alpha^{*2} - c^{*2} \end{pmatrix} = -\alpha^{*2} c^* + b^{*2} c^* - (\alpha^{*2} - c^{*2}) c^* = 0$$

e

$$\langle \Phi | \xi \rangle = \begin{pmatrix} b^* & a^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -a^*c^* \\ b^*c^* \\ a^{*2} - c^{*2} \end{pmatrix} = -a^*b^*c^* + a^*b^*c^* = 0$$

Segue então imediatamente que $|\xi\rangle$ é autovetor de Q com autovalor nulo. Alternativamente, é possível encontrar a representação 3x3 de Q,

$$Q = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & ab^* + ba^* & ac^* \\ ab^* + ab^* & |a|^2 + |b|^2 & bc^* \\ a^*c & b^*c & |c|^2 \end{pmatrix}$$

E mostrar que $\lambda = 0$ é raiz do polinômio característico

$$p(\lambda) = \begin{vmatrix} |a|^2 + |b|^2 - \lambda & ab^* + ba^* & ac^* \\ ab^* + ab^* & |a|^2 + |b|^2 - \lambda & bc^* \\ a^*c & b^*c & |c|^2 - \lambda \end{vmatrix}$$

7. Sejam dois operadores A e B:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2i \\ 0 & -2i & 1 \end{pmatrix}$$

descritos na base ortonormal $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$.

- (A) Mostre que A e B são operadores hermitianos.
- (B) Mostre que A e B comutam.
- (C) Ache os autovalores e autovetores de A e B.
- (D) Ache uma base comum para A e B. Mostre a forma de A e B nesta base comum.

Resolução:

(A) Tomando as transpostas conjugadas de A e B temos

$$A^{\dagger} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = A \qquad B^{\dagger} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & (-2i)^* \\ 0 & (2i)^* & 1 \end{pmatrix} = B$$

(B) Temos

$$[A, B] = AB - BA$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2i \\ 0 & -2i & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2i \\ 0 & -2i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4i \\ 0 & -4i & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2i \\ 0 & -4i & 2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(C) Da forma de A é imediato que os autovalores são

$$\lambda_A^{(1)} = 1$$
 $\lambda_A^{(2)} = \lambda_A^{(3)} = 2$

(note que o autovalor 2 é duplamente degenerado) com os respectivos autovetores

$$\left|\nu_{A}^{(1)}\right\rangle = \left|1\right\rangle \qquad \left|\nu_{A}^{(2)}\right\rangle = \left|2\right\rangle \qquad \left|\nu_{A}^{(3)}\right\rangle = \left|3\right\rangle$$

Já para B, temos o polinômio característico

$$p_{B}(\lambda) = \begin{vmatrix} 3 - \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \lambda & 2i \\ 0 & -2i & 1 - \lambda \end{vmatrix} = (3 - \lambda)((1 - \lambda)^{2} - 4)$$

que possui como raízes

$$\lambda_{B}^{(1)} = -1$$
 $\lambda_{B}^{(2)} = \lambda_{B}^{(3)} = 3$

Para o autovetor associado ao primeiro autovalor temos

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2i \\ 0 & -2i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} 3\alpha \\ \beta + 2i\gamma \\ \gamma - 2i\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha \\ -\beta \\ -\gamma \end{pmatrix}$$
$$\Rightarrow \begin{cases} 3\alpha & = -\alpha \\ \beta + 2i\gamma & = -\beta \\ \gamma - 2i\beta & = -\gamma \end{cases}$$

O sistema obtido pode ser satisfeito tomando (já levando em conta a normalização)

$$\begin{cases} \alpha &= 0 \\ \beta &= \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \gamma &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

e obtemos portanto o autovetor

$$\left| v_{B}^{(1)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i \left| 2 \right\rangle - \left| 3 \right\rangle \right)$$

Já para o outro autovalor, observe que a matriz B se decompõe em dois blocos: o bloco superior, composto apenas pelo número 3, e o bloco inferior, formado por uma matriz 2x2. Um dos autovetores é o associado ao primeiro bloco, $\left|v_{\rm B}^{(2)}\right\rangle = |1\rangle$, e o outro é o autovetor associado à matriz 2x2:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2i \\ -2i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3\alpha \\ 3\beta \end{pmatrix}$$
$$\Rightarrow \begin{cases} \alpha + 2i\beta & = 3\alpha \\ \beta - 2i\alpha & = 3\beta \end{cases}$$

Uma solução, já levando em conta a normalização, do sistema anterior é $\alpha = \frac{i}{\sqrt{2}}$ e $\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$, portanto obtemos o autovetor

$$\left|\nu_{\mathrm{B}}^{(3)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(i\left|2\right\rangle + \left|3\right\rangle\right)$$

Em suma, os autovalores de A são

$$\lambda_A^{(1)} = 1$$
 $\lambda_A^{(2)} = \lambda_A^{(3)} = 3$

com os autovetores associados

$$\left|\nu_{A}^{(1)}\right\rangle = \left|1\right\rangle \qquad \left|\nu_{A}^{(2)}\right\rangle = \left|2\right\rangle \qquad \left|\nu_{A}^{(3)}\right\rangle = \left|3\right\rangle$$

enquanto os autovalores de B são

$$\lambda_B^{(1)} = -1 \qquad \lambda_B^{(2)} = \lambda_B^{(3)} = 3$$

com os autovetores associados

$$\left|\nu_{B}^{(1)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(i\left|2\right\rangle - \left|3\right\rangle\right) \qquad \left|\nu_{B}^{(2)}\right\rangle = \left|1\right\rangle \qquad \left|\nu_{B}^{(3)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(i\left|2\right\rangle + \left|3\right\rangle\right).$$

(D) Precisamos encontrar 3 vetores linearmente independentes que sejam simultaneamente autovetores de A e B. É imediato que $\left|v_A^{(1)}\right> = \left|v_B^{(2)}\right> = |1\rangle$ deve ser um destes vetores. Para os restantes, note que $\left|v_A^{(2)}\right>$ e $\left|v_A^{(3)}\right>$ são autovetores de A com o mesmo autovalor ($\lambda_A^{(2)} = \lambda_A^{(3)} = 2$), logo combinações lineares destes são também autovetores de A com autovalor 2. Como $\left|v_B^{(1)}\right>$ e $\left|v_B^{(2)}\right>$ são combinações lineares dos vetores citados é claro que são autovetores de A. O conjunto $\left\{\left|v_B^{(1)}\right>,\left|v_B^{(2)}\right>,\left|v_B^{(3)}\right>\right\}$ é portanto formado por vetores LI que são simultaneamente autovetores de A (com autovalores 2, 1 e 2, respectivamente) e de B (com autovalores -1, 3 e 3, respectivamente).

Para escrever os operadores nesta nova base, note que se $\{|\nu_i\rangle\}$ e $\{|u_i\rangle\}$ são bases ortogonais de um espaço vetorial e A é um operador cuja matriz na base $\{|\nu_i\rangle\}$ é a_{ij} temos

$$\begin{split} A &= \sum a_{ij} \left| \nu_i \right\rangle \left\langle \nu_j \right| \\ &= \sum a_{ij} \left| u_l \right\rangle \left\langle u_l \middle| \nu_i \right\rangle \left\langle \nu_j \middle| u_m \right\rangle \left\langle u_m \middle| \\ &= \sum \left\langle u_l \middle| \nu_i \right\rangle a_{ij} \left\langle \nu_j \middle| u_m \right\rangle \left| u_l \right\rangle \left\langle u_m \middle| \\ \end{split}$$

Definindo a matriz de mudança de base M como $\mathfrak{m}_{ij}=\langle \nu_i \big| \mathfrak{u}_j \rangle$ a representação de A na base $\{|\mathfrak{u}_i\rangle\}$ é dada pelo produto $M^\dagger AM$. No caso em questão, a matriz de mudança de base é dada por

$$M = \begin{pmatrix} \left\langle 1 \middle| \nu_B^{(1)} \right\rangle & \left\langle 1 \middle| \nu_B^{(2)} \right\rangle & \left\langle 1 \middle| \nu_B^{(3)} \right\rangle \\ \left\langle 2 \middle| \nu_B^{(1)} \right\rangle & \left\langle 2 \middle| \nu_B^{(2)} \right\rangle & \left\langle 2 \middle| \nu_B^{(3)} \right\rangle \\ \left\langle 3 \middle| \nu_B^{(1)} \right\rangle & \left\langle 3 \middle| \nu_B^{(2)} \right\rangle & \left\langle 3 \middle| \nu_B^{(3)} \right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

(basta escrever os vetores da nova base, escritos na base antiga, como as colunas da matriz). Sendo à e B̃ as representações de A e B na nova base temos

$$\begin{split} \tilde{A} &= M^{\dagger}AM \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{2}i & 0 & \sqrt{2}i \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \end{split}$$

e

$$\begin{split} \tilde{B} &= M^{\dagger}BM \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2i \\ 0 & -2i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}i & 0 & \frac{3}{\sqrt{2}}i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{3}{\sqrt{2}}i \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \end{split}$$

Alternativamente, basta argumentar que, como sabemos que

$$\begin{split} A\left|\nu_{B}^{(1)}\right\rangle &= 2\left|\nu_{B}^{(1)}\right\rangle &\qquad A\left|\nu_{B}^{(2)}\right\rangle = 1\left|\nu_{B}^{(2)}\right\rangle &\qquad A\left|\nu_{B}^{(3)}\right\rangle = 2\left|\nu_{B}^{(3)}\right\rangle \\ B\left|\nu_{B}^{(1)}\right\rangle &= -1\cdot\left|\nu_{B}^{(1)}\right\rangle &\qquad B\left|\nu_{B}^{(2)}\right\rangle = 3\left|\nu_{B}^{(2)}\right\rangle &\qquad B\left|\nu_{B}^{(3)}\right\rangle = 3\left|\nu_{B}^{(3)}\right\rangle \end{split}$$

as matrizes de A e B na base comum devem ser $\tilde{A} = diag(2, 1, 2)$ e $\tilde{B} = diag(-1, 3, 3)$.

8. Propriedades da função Delta de Dirac:

$$\int_{a}^{b} dx f(x) \delta(x - x_0) = \begin{cases} f(x_0) & \text{se } a < x_0 < b \\ 0 & \text{se } x_0 < a \text{ ou } x_0 > b \end{cases}$$

- (A) Prove que $\delta(g(x)) = \sum_i \frac{1}{g'(x_i)} \delta(x x_i)$ onde $g'(x_i) \equiv \frac{dg}{dx_i} \Big|_{x_i}$ onde x_i são as raízes de $g(x_i) = 0$ se $a < x_i < b$.
- (B) $\int_a^b dx f(x) \delta'(x x_0) = -f'(x_0)$ se $a < x_0 < b$.

Resolução:

(A) Seja x_i uma raiz qualquer de g(x), e suponha que $g'(x_i) \neq 0$. Existem então a_i e b_i tais que $x_i \in (a_i, b_i)$ e g restrita a (a_i, b_i) é injetiva. Note que isso implica que x_i é a única raiz de g(x) neste intervalo. Além disso, fazendo a mudança de variáveis x' = g(x) temos:

$$\begin{split} \int_{a_i}^{b_i} f(g(x))\delta(g(x))dx &= \int_{g^{-1}(a_i)}^{g^{-1}(b_i)} f(x')\delta(x') \frac{dx'}{g'(x)} \\ &= \frac{f(g(x_i))}{g'(x_i)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(g(x)) \frac{\delta(x - x_i)}{g'(x_i)} dx \end{split}$$

Suponha agora que $g'(x_i) \neq 0$ para todas as raízes x_i . Temos então

$$\begin{split} \int_{-\infty}^{\infty} f(g(x))\delta(g(x)) &= \sum_{i} \int_{a_{i}}^{b_{i}} f(g(x))\delta(g(x))dx \\ &= \sum_{i} \int_{-\infty}^{\infty} f(g(x)) \frac{\delta(x - x_{i})}{g'(x_{i})} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(g(x)) \left(\sum_{i} \frac{\delta(x - x_{i})}{g'(x_{i})} \right) dx \end{split}$$

Daí concluímos que

$$\delta(g(x)) = \sum_{i} \frac{\delta(x - x_{i})}{g'(x_{i})}$$

(B) Utilizando integração por partes temos

$$\int_a^b dx f(x) \delta'(x - x_0) = f(x) \delta(x - x_0) \Big|_a^b - \int_a^b dx f'(x) \delta(x - x_0)$$
$$= -f'(x_0).$$

9. Dados os operadores contínuos, operador posição $\hat{\vec{R}}=(\hat{X},\hat{Y},\hat{Z})$ e operador momento $\hat{\vec{P}}=(\hat{P_x},\hat{P_y},\hat{P_z})$ que satisfazem as equações de autovalores:

$$\begin{split} \hat{X} | r \rangle &= x | r \rangle & \qquad \hat{P_x} | p \rangle = p_x | p \rangle \\ \hat{Y} | r \rangle &= y | r \rangle & \qquad \hat{P_y} | p \rangle = p_y | p \rangle \\ \hat{Z} | r \rangle &= z | r \rangle & \qquad \hat{P_z} | p \rangle = p_z | p \rangle \end{split}$$

Admita que estes operadores estão definidos em todo o espaço vetorial: $(-\infty, \infty)$.

- (A) Mostre que os operadores \hat{X} e $\hat{P_x}$ são hermitianos.
- (B) Calcule os comutadores $[X, P_x]$ e $[Y, P_x]$.
- (C) Com esta informação os operadores \hat{X} , \hat{Y} , $\hat{P_x}$ são um conjunto completo de observáveis que comuta (C. C. O. C)? Justifique a sua resposta.
- (D) Dada a equação de autovalores de $\hat{P_x}$, $\hat{P_x}|p\rangle = p_x|p\rangle$, ache os autovetores deste sistema na representação de posição x. É dado que a matriz de mudança de base de momento $|p\rangle$ para a base de posição $|r\rangle$ é $\langle r|p\rangle = \nu_{\vec{p}}^*((\vec{r}) = \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$.

Resolução:

(A) O conjugado hermitiano de um operador A é definido de forma que

$$\langle \Phi | A | \Psi \rangle = \left(\langle \Psi | A^{\dagger} | \Phi \rangle \right)^*$$

Escrevendo esta condição para o operador X na representação da posição temos

$$\langle \Phi | X | \Psi \rangle = \int d^3 r \Phi^*(r) x \Psi(r)$$
$$= \left(\int d^3 r \Psi^*(r) x \Phi(r) \right)^*$$
$$= (\langle \Psi | X | \Phi \rangle)^*$$

logo \hat{X} é hermitiano. Analogamente, escrevendo $\langle \Phi | \, \hat{P}_x \, | \Psi \rangle$ na representação do momento temos

$$\begin{split} \left\langle \Phi \right| \hat{P}_{x} \left| \Psi \right\rangle &= \int d^{3}p \Phi^{*}(p) p_{x} \Psi(p) \\ &= \left(\int d^{3}p \Psi^{*}(p) p_{x} \Phi(p) \right)^{*} \\ &= \left(\left\langle \Psi \right| \hat{P}_{x} \left| \Phi \right\rangle \right)^{*}. \end{split}$$

Logo P_x também é hermitiano.

(B) Aplicando o comutador em $|\Psi\rangle$ e fazendo as contas na representação da posição temos

$$\begin{split} \left\langle \mathbf{r} \right| \left[\mathbf{X}, \mathbf{P}_{\mathbf{x}} \right] \left| \Psi \right\rangle &= \left\langle \mathbf{r} \right| \mathbf{X} \mathbf{P}_{\mathbf{x}} - \mathbf{P}_{\mathbf{x}} \mathbf{X} \left| \Psi \right\rangle \\ &= \mathbf{x} \left\langle \mathbf{r} \right| \mathbf{P}_{\mathbf{x}} \left| \Psi \right\rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{x}} \left\langle \mathbf{r} \right| \mathbf{X} \left| \Psi \right\rangle \\ &= \mathbf{x} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{x}} \left\langle \mathbf{r} \middle| \Psi \right\rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{x}} \left(\mathbf{x} \left\langle \mathbf{r} \middle| \Psi \right\rangle \right) \\ &= \mathbf{x} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\mathbf{x}} \left\langle \mathbf{r} \middle| \Psi \right\rangle - \frac{\hbar}{i} \left\langle \mathbf{r} \middle| \Psi \right\rangle - \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \frac{d}{d\mathbf{x}} \left\langle \mathbf{r} \middle| \Psi \right\rangle \\ &= -\frac{\hbar}{i} \left\langle \mathbf{r} \middle| \Psi \right\rangle \\ &= \left\langle \mathbf{r} \middle| i \hbar \middle| \Psi \right\rangle \end{split}$$

Obtemos portanto

$$[X, P_x] = i\hbar$$

Analogamente para $[Y, P_x]$ temos

$$\begin{split} \left\langle \mathbf{r} \right| \left[\mathbf{Y}, \mathbf{P}_{\mathbf{x}} \right] \left| \mathbf{\Psi} \right\rangle &= \left\langle \mathbf{r} \right| \mathbf{Y} \mathbf{P}_{\mathbf{x}} - \mathbf{P}_{\mathbf{x}} \mathbf{Y} \left| \mathbf{\Psi} \right\rangle \\ &= \mathbf{y} \left\langle \mathbf{r} \right| \mathbf{P}_{\mathbf{x}} \left| \mathbf{\Psi} \right\rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d} \mathbf{x}} \left\langle \mathbf{r} \right| \mathbf{Y} \left| \mathbf{\Psi} \right\rangle \\ &= \mathbf{y} \frac{\hbar}{i} \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d} \mathbf{x}} \left\langle \mathbf{r} \middle| \mathbf{\Psi} \right\rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d} \mathbf{x}} \left(\mathbf{y} \left\langle \mathbf{r} \middle| \mathbf{\Psi} \right\rangle \right) \\ &= \mathbf{0} \end{split}$$

Portanto:

$$[Y, P_x] = 0.$$

- (C) Não, pois como $[X, P_x] = i\hbar \neq 0$, nem todos os observáveis em questão comutam.
- (D) Escrevendo o problema de autovalores de \hat{P}_{χ} na representação da posição temos, definindo $\langle r|p\rangle=\nu_{\vec{p}}(x,y,z)$:

$$\langle r| P_{x} | p \rangle = p_{x} \langle r| p \rangle$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \nu_{\vec{p}}(x, y, z) = p_{x} \nu_{\vec{p}}(x, y, z)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \nu_{\vec{p}}(x, y, z) = \frac{i p_{x}}{\hbar} \nu_{\vec{p}}(x, y, z)$$

$$\Rightarrow \nu_{\vec{p}}(x, y, z) = \exp\left(\frac{i p_{x} x}{\hbar}\right) f(y, z)$$

Procedendo analogamente com os operadores \hat{P}_y e \hat{P}_z obtemos

$$\nu_{\vec{p}}(x,y,z) = \exp\left(\frac{ip_yy}{\hbar}\right)f(x,z) \qquad \nu_{\vec{p}}(x,y,z) = \exp\left(\frac{ip_zz}{\hbar}\right)f(x,y)$$

A solução final é, portanto

$$v_{\vec{p}}(x,y,z) = A \exp\left(\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}\right)$$

10. Seja o operador momento angular em coordenadas esféricas

$$\hat{\mathsf{L}}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \phi}$$

onde ϕ é a coordenada no sistema de coordenadas esféricas com valor entre 0 e 2π .

(A) Quais são as condições para que $\hat{L_z}$ seja hermitiano?

Resolução:

(A) A condição de hermiticidade é

$$\langle \Psi | L_z | \Phi \rangle = \langle \Phi | L_z | \Psi \rangle^*$$

Escrevendo estes produtos internos na representação da posição usando coordenadas esféricas

$$\int_0^\infty r^2 dr \int_{-\pi}^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Psi^*(-i\hbar) \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = \left(\int_0^\infty r^2 dr \int_{-\pi}^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Phi^*(-i\hbar) \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right)^*$$

Para que isto seja satisfeito basta que

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \Psi^*(-i\hbar) \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = \left(\int_0^{2\pi} d\varphi \Phi^*(-i\hbar) \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right)^*$$

Aplicando integração por partes observamos que para esta realção ser satisfeita devemos ter

$$\int_{0}^{2\pi} \Phi^{*}(-i\hbar) \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} = (i\hbar \Phi \Psi^{*}) \Big|_{\phi=0}^{2\pi} - \int_{0}^{2\pi} d\phi \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} (i\hbar) \Psi^{*}$$

$$\Rightarrow \Phi(r, \theta, 2\pi) \Psi(r, \theta, 2\pi) - \Phi(r, \theta, 0) \Psi(r, \theta, 0) = 0$$

Basta portanto que as funções de onda estejam bem definidas, i.e., que $\Psi(r, \theta, 2\pi) = \Psi(r, \theta, 0)$.

Bransdeen and Joachian, página 260:

- 11. Seja uma partícula de massa m em 1 dimensão espacial, sob a ação do Hamiltoniano $H = \frac{p_X^2}{2m}$.
 - (A) Mostre que os autovalores do Hamiltoniano H são duplamente degenerados.
 - (B) Mostre que a degenerescência pode ser removida por considerar autovetores de H e de p_x .
 - (C) No caso do poço do potencial infinito as soluções são autovetores de H e de p_x ? Se não, como podemos escrever a solução para ser um autovetor de H e de p_x .

Resolução:

(A) O problema de autovalores para o Hamiltoniano neste caso é

$$\frac{p_x^2}{2m} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

Na representação da posição esta equação lê-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\langle x|\Psi\rangle = E\langle x||\Psi\rangle$$
$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x)$$

As soluções desta equação são combinações lineares das soluções linearmente independentes

$$|\Psi_{+}\rangle = \int dx \exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)|x\rangle$$
 $|\Psi_{-}\rangle = \int dx \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)|x\rangle$

Cada autovalor E do problema possui portanto um autoespaço de dimensão dois associado, logo os autovalores do Hamiltoniano são duplamente degenerados.

(B) O problema de autovalores para p_x na representação do momento é

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|\Psi\rangle = p_x\langle x|\Psi\rangle$$

O único autovetor associado ao autovalor p_x é, então

$$|\Psi\rangle = \int dx exp\left(\frac{ip_x x}{\hbar}\right) |x\rangle$$

É fácil perceber que para cada E as duas soluções LI que obtemos anteriormente correspondem aos autovetores do momento com autovalores $+\sqrt{2mE}$ e $-\sqrt{2mE}$. Logo a cada par de autovalores (p_x, E) do momento e do Hamiltoniano, respectivamente, satisfazendo $p_x^2 = 2mE$ está associado um subespaço de autovetores de dimensão 1, portanto a degerescência é removida.

(C) Naturalmente todas as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo são autovetores de H: esta equação é exatamente o problema de autovalores do Hamiltoniano escrito na representação da posição. As soluções do poço infinito escritas como senos,

$$\Psi_{n}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

no entanto, não são autovetores de p_x :

$$\begin{split} \left\langle x\right|\hat{p}_{x}\left|\Psi_{n}\right\rangle &=\frac{\hbar}{i}\frac{d\Psi_{n}}{dx}\\ &=\frac{\hbar}{i}\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{n\pi}{a}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\\ &\neq p_{x}\left\langle x|\Psi_{n}\right\rangle \end{split}$$

Entretanto, vimos no Problema 12 da Lista 1 que as soluções do poço infinito também podem ser escritas como combinação linear das soluções

$$\Psi_n^+(x) = e^{ik_nx} \qquad \Psi_n^-(x) = e^{-ik_nx}$$

onde $k_n = n\pi/\alpha$ e $E_n = (\hbar k_n)^2/2m$. Estas soluções sim são autovetores do operador momento com autovalor $\pm \hbar k_n$ (e do Hamiltoniano com autovalor $(\hbar k_n)^2/2m$):

$$\begin{split} \left\langle x\right|\hat{p}_{n}\left|\Psi_{n}^{\pm}\right\rangle &=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}e^{\pm ik_{n}x}\\ &=\pm\frac{\hbar}{i}(ik_{n})e^{\pm ik_{n}x}\\ &=\pm\hbar k_{n}\left\langle x\middle|\Psi_{n}^{\pm}\right\rangle \end{split}$$

12. Seja o oscilador harmônico unidimensional, e o estado fundamental do sistema é $|0\rangle$. Seja o Hamiltoniano dado por

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x^2 + (m\omega x)^2 \right) = \hbar \omega (N + 1/2)$$

Onde $\langle x|0\rangle\equiv \psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ é a função de onda do estado fundamental. N é o operador número com propriedades

$$\begin{split} N &= a_+ a_- \\ E_n &= \hbar \omega \left(n + 1/2 \right) \qquad n = 0, 1, ... \\ a_\pm &= \frac{1}{\sqrt{2 \hbar m \omega}} \left(\mp i p_x + m \omega x \right) \\ [a_-, a_+] &= 1 \\ [N, a_\pm] &= \pm a_\pm \\ a_+ \left| n \right> &= \sqrt{n+1} \left| n + 1 \right> \end{split}$$

- (A) Ache a expressão do estado $|n\rangle$ em termos de operadores escada a_+ e a_- e do estado fundamental do sistema $|0\rangle$.
- (B) Escreve a equação diferencial da função de onda do estado fundamental $\langle r|0\rangle$ e ache a solução $\phi_0(x)$. Não é necessário determinar a constante de normalização.
- (C) O Hamiltoniano de um sistema em uma dimensão tem a forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{K\hat{x}^2}{2} + \frac{e\Phi_0\hat{x}}{a}$$

onde K, e, Φ_0 e a são constantes positivas. Ache os autovalores e autovetores deste sistema.

Resolução:

(A) Basta agir com o operador a_+ n vezes:

$$\alpha_{+}^{n}\left|0\right\rangle =\sqrt{n!}\left|n\right\rangle$$

Portanto

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a_+^n |0\rangle$$
.

(B) Por definição o estado fundamental deve satisfazer à relação

$$a_{-}|0\rangle=0$$

Escrevendo o operador a_ na representação da posição temos

$$\begin{aligned} \left\langle x\right| a_{-} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(i \left\langle x\right| \hat{p}_{x} + m\omega \left\langle x\right| \hat{x} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} \left\langle x\right| + m\omega x \left\langle x\right| \right) \end{aligned}$$

Portanto

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{d}{dx} \langle x|0 \rangle + m\omega x \langle x|0 \rangle \right) = 0$$

A função de onda do estado fundamental $\psi_0(x)$ é dada por $\langle x|0\rangle$, portanto obtemos a equação diferencial

$$\frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x} = -\frac{\mathrm{m}\omega}{\hbar}x\psi_0$$

Dividindo por ψ_0 e lembrando da derivada logarítmica temos

$$\frac{d}{dx}\log(\psi_0) = -\frac{m\omega}{\hbar}x$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{8\pi^2\hbar}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

A solução é portanto uma gaussiana centrada na origem, com desvio padrão $\sqrt{2\hbar/(m\omega)}$.

(C) Primeiramente vejamos o significado deste Hamiltoniano. Trata-se de um sistema com energia potencial

$$V = \frac{Kx^2}{2} + \frac{e\Phi_0x}{\alpha}$$

O primeiro termo é o potencial de um oscilador harmônico. O segundo fornece uma força $F = -\nabla \left(\frac{e\Phi_0 x}{a}\right) = -\frac{e\Phi_0}{a}\hat{i}$, logo este sistema é um oscilador harmônico submetido a uma força constante. Classicamente, obtemos uma equação diferencial da forma

$$\ddot{\mathbf{x}} = -\frac{\mathbf{K}}{\mathbf{m}}\mathbf{x} - \frac{e\Phi_0}{\mathbf{m}a}$$

que pode ser facilmente resolvida fazendo uma mudança de variáveis $x' = x + \frac{e\Phi_0}{K\alpha}$, de onde obtemos a equação do oscilador harmônico. Isto é intuitivo: um sistema massa mola submetido à força peso, por exemplo, oscila com exatamente a mesma frequência, com seu ponto de equilíbrio deslocado para baixo. Adaptando este

processo ao caso quântico, tentamos uma mudança de variáveis que faça o termo linear desaparecer do Hamiltoniano (pagando o preço de adicionar uma constante ao mesmo). Completando o quadrado, temos

$$\begin{split} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{K}{2} \left(x^2 + \frac{2e\Phi_0 x}{Ka} + \left(\frac{e\Phi_0}{Ka} \right)^2 - \left(\frac{e\Phi_0}{Ka} \right)^2 \right) \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{K}{2} \left(x + \frac{e\Phi_0}{Ka} \right)^2 - \frac{e^2\Phi_0^2}{2Ka^2} \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{K\tilde{x}}{2} - \frac{e^2\Phi_0^2}{2Ka^2} \\ &= H_{OH} - \Delta E \end{split}$$

onde definimos $\tilde{x}=x+\frac{e\Phi_0}{K\alpha}$, $H_{O.H.}=p^2/2m+K\tilde{x}^2/2$ (o Hamiltoniano do oscilador harmônico) e $\Delta E=e^2\Phi_0^2/(2K\alpha^2)$.

O problema de autovalores para este Hamiltoniano nos fornece, então

$$\begin{split} H \left| \Psi \right\rangle &= E \left| \Psi \right\rangle \\ \left(H_{O.H.} - \Delta E \right) \left| \Psi \right\rangle &= E \left| \Psi \right\rangle \\ H_{O.H.} \left| \Psi \right\rangle &= \left(E + \Delta E \right) \left| \Psi \right\rangle \\ H_{O.H.} \left| \Psi \right\rangle &= \tilde{E} \left| \Psi \right\rangle \end{split}$$

Note que a última expressão é precisamente o problema de autovalores para o oscilador harmônico. Já sabemos portanto suas soluções:

$$\begin{split} \tilde{E}_n &= \hbar \omega (n + 1/2) \\ |n\rangle &= \frac{\tilde{\alpha}_+^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \,. \end{split}$$

Onde

$$\begin{split} \tilde{a}_{+} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-i \tilde{p}_{x} + m\omega \tilde{x} \right) \\ \langle \tilde{x} | 0 \rangle &= \left(\frac{m\omega}{8\pi^{2}\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} \tilde{x}^{2}}. \end{split}$$

Os autovalores e autovetores do oscilador harmônico com força constante são, então

$$\begin{split} E_n &= \hbar \omega (n+1/2) + \frac{e^2 \Phi_0^2}{2 K \alpha^2} \\ |n\rangle &= \frac{\tilde{\alpha}_+^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \,. \end{split}$$

- 13. Responda as questões justificando se a sentença está correta ou não:
 - (A) Operadores hermitianos tem autovalores que podem ser reais ou imaginários
 - (B) Se o sistema está no autovetor de um operador Q, então o valor esperado de um operador Q' será independente do tempo se Q e Q' comutam.
 - (C) O autovetor de qualquer operador não é um estado estacionário.
 - (D) Se você faz uma medida de uma quantidade observável Q de um sistema de forma repetida e quase instantânea então você espera obter o mesmo valor em cada medida.
 - (E) Uma partícula está submetida a um potencial de oscilador harmônico. Se a partícula está num estado de autoestado do operador momento então o valor esperado do operador Q não depende do tempo.
 - (F) Uma partícula está submetida a um potencial de oscilador harmônico. Se a partícula está num estado de autoestado do operador energia então o valor esperado do operador Q depende do tempo.
 - (G) Se dois operadores A e A' comutam então eles sempre são representados por matrizes diagonais.
 - (H) O desvio padrão do valor esperado de um operador A que é hermitiano é não nulo.

Resolução:

(A) Falso. Os autovalores de um operador hermitiano A são sempre reais, pois, já que dados $|\Psi\rangle$ e $|\Phi\rangle$ vale

$$\langle \Phi | A | \Psi \rangle = (\langle \Psi | A | \Phi \rangle)^*$$

é claro que se $|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$ é autovetor de A, i.e., $A|\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle$ temos

$$\lambda \langle \Psi | \Psi \rangle = \lambda^* \langle \Psi | \Psi \rangle$$
$$\Rightarrow \lambda = \lambda^*.$$

(B) Falso. A evolução temporal do valor esperado de um operador obedece à relação

$$\frac{d}{dt} \left\langle Q \right\rangle_{\Psi} = \frac{i}{\hbar} \left\langle [H, Q] \right\rangle_{\Psi} + \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle_{\Psi}$$

Basta que Q' não comute com H, ou dependa explicitamente do tempo, para que a derivada do valor esperado não se anule.

(C) Falso. Autovetores do operador Hamiltoniano são estados estacionários, já que a equação de Schrödinger independente do tempo é exatamente o problema de autovalores para este operador. Há porém, naturalmente, operadores cujos autoestados não são estacionários: autoestados do operador momento para o oscilador harmônico, por exemplo, não são estacionários - o valor esperado da posição depende do tempo.

- (D) Verdadeiro.
- (E) Falso. Se Q = \hat{x} , por exemplo, temos $[H,x]=-i\hat{p_x}\hbar/m$. Num autoestado $|\Psi\rangle$ com momento p temos então

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle x \rangle_{\Psi} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{\mathrm{i} p \hbar}{\mathrm{m}} = -\frac{\mathrm{p}}{\mathrm{m}}$$

- que pode ser diferente de 0.
- (F) *Falso*. O valor esperado da energia, por exemplo, não depende do tempo nesta situação.
- (G) Falso. Eles serão representados por matrizes diagonais numa base de autovetores comuns a ambos; em quaisquer outras bases isto não ocorrerá.
- (H) *Falso.* O desvio padrão do valor esperado da energia num estado estacionário é nulo, por exemplo.