Monitoria Mecânica Quântica

(Dated: 20 de março de 2015)

Ao longo da última semana, abordamos a representação dos estados quânticos $|\psi\rangle$ na base das posições $|\vec{r}\rangle$. Este exercício tem por objetivo a familiarização com esta base e com operadores que atuam sobre o espaço de Hilbert por ela definido. Por simplicidade, iremos trabalhar apenas com uma dimensão espacial, ao longo do eixo z.

Considere a região espacial definida conforme ilustra a Figura 1. Cada ponto, representa uma possível posição do espaço real na qual um único elétron pode se encontrar (carga e). Esses pontos ao longo da reta são especiais e recebem o nome de sítios. Cada sítio possui um índice $k = -1, 0, 1$. A distância entre sítios vizinhos é $a = 100\,\mathrm{nm}$ de modo que qualquer posição z pode ser expressa como $z = ka$. Naturalmente, a posição espacial z é um bom número para descrever o estado eletrônico. Uma maneira conveniente de escrever o estado $|\psi\rangle$ é da seguinte maneira:

$$|\psi\rangle = \psi_a|z = a\rangle + \psi_0|z = 0\rangle + \psi_{-a}|z = -a\rangle. \tag{1}$$

Os números $\psi_z \in \mathbb{C}$ são nada mais do que coeficientes da combinação linear dos vetores de base mas são muito mais conhecidos como funções de onda $\psi(z)$.

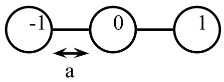

Figura 1. Sistema composto por um elétron e sítios, numerados de $k = -1, 0, 1$, que distam entre si por $a = 100\,\mathrm{nm}$.

Exercício 1 Espaço discreto

Sobre o sistema descrito acima, responda:

i. Dado o operador $\mathbb{Z}$ tal que $\mathbb{Z}|z\rangle = z|z\rangle$, calcule $\langle z'|\mathbb{Z}|\psi\rangle$ e $\langle z'|\mathbb{Z}^2|\psi\rangle$.

ii. Calcule o valor esperado $\langle\psi|\mathbb{Z}|\psi\rangle$ e interprete seu resultado. Idem para $\langle\psi|\mathbb{Z}^2|\psi\rangle$. A partir destes resultados, calcule $\langle\psi|f(\mathbb{Z})|\psi\rangle$, onde $f(z) = \mathrm{e}^{i\beta z}$.

iii. Assumindo que todas as condições experimentais sejam idênticas nas posições $z = -a$ e $z = a$, o que se pode deduzir sobre os coeficientes ψ_z? Quais as consequências destas deduções para os valores esperados calculados no item anterior?

Exercício 2 Operador paridade

Neste exercício definimos um operador muito usado não só na mecânica quântica como diversas áreas do conhecimento como química, bioquímica, cristalografia, etc: o operador paridade Π. A ação do operador Π sobre as coordenadas do vetor posição é bastante simples:

$$\Pi|z\rangle = |-z\rangle. \tag{2}$$

a) Quais são os possíveis autovalores de Π^2?

b) A partir do item anterior, quais os autovalores de Π?

c) Autovalores são sempre úteis pois servem como índices para caracterizar um dado estado quântico. Assim, podemos utilizar os autovalores de Π, em conjunto com o os autovalores do operador posição, para caracterizar estados quânticos e suas respectivas funções de onda. Defina uma notação conveniente para descrever os estados quânticos e que carregue ambos autovalores.

d) Encontre os autovetores de Π e explique seu significado físico. Note que intuitivamente, até mesmo em teorias clássicas, sempre utilizamos o conceito de paridade. Aqui apenas a utilizamos de maneira explícita.

Exercício 3 Operador hamiltoniano I

Dado o operador hamiltoniano

$$\mathbb{H} = \gamma\mathbb{Z}^n, \tag{3}$$

onde n é um inteiro $n = 0, 1, 2, \ldots$, responda:

a) Qual a unidade de γ?

b) Qual a paridade dos autoestados de $\mathbb{H}$? Calcule $[\Pi, \mathbb{H}]$ para alguns valores de n e então generalize.

c) Calcule as autoenergias e autoestados de $\mathbb{H}$.

Exercício 4 Operador hamiltoniano II

Pare este exercício considere o operador hamiltoniano

$$\mathbb{H} = \gamma_1\mathbb{Z} + \gamma_2\mathbb{Z}^2. \tag{4}$$

a) Qual as unidades de γ_1 e γ_2?

b) Qual a paridade dos autoestados de $\mathbb{H}$? Calcule $[\Pi, \mathbb{H}]$. É possível utilizar os autovalores e autofunções de $\mathbb{P}$ neste caso? Justifique.

c) Calcule as autoenergias e autoestados de $\mathbb{H}$.

Exercício 5 Operador hamiltoniano III

Considere o operador hamiltoniano

$$\mathbb{H} = \gamma\Pi. \tag{5}$$

a) Qual a unidade de γ?

b) Descreva fisicamente a ação do operador $\mathbb{H}$ sobre o elétron nesta rede.

c) Calcule os autoestados $|\varphi_{-1}\rangle$, $|\varphi_0\rangle$ e $|\varphi_1\rangle$ de $\mathbb{H}$.

d) Suponha que $|\psi(t)\rangle$ represente o elétron. Certamente este estado é uma combinação linear

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{k=-1}^{1} \psi_k(t)|\varphi_k\rangle, \tag{6}$$

tal que

$$\mathbb{H}|\psi(t)\rangle = \sum_k \psi_k(t)E_k|\varphi_k\rangle = \sum_{k=-1}^{1} [-(\hbar/i)(\partial/\partial t)\psi_k(t)]|\varphi_k\rangle, \tag{7}$$

de onde se conclui

$$\psi_k(t) = \mathrm{e}^{-\imath E_k t/\hbar}\psi_k(t = 0). \tag{8}$$

Se um físico experimental injeta o elétron sempre no sítio $k = 1$ em $z = a$, então qual a distribuição espacial eletrônica esperada da rede, em $t = 0$?

e) Mostre que, de acordo com o item anterior, o estado inicial do elétron é uma combinação linear de autoestados do operador $\mathbb{H}$. (Por outro lado, é um autovetor do operador posição). Calcule a energia do sistema no tempo $t = 0$: $\langle E(t=0)\rangle = \langle\psi(0)|\mathbb{H}|\psi(0)\rangle$.

f) Após um intervalo de tempo t, realiza-se nova medição de posição $\langle z(t)\rangle$ e energia $\langle E(t)\rangle$. O que se deve esperar?

g) Determine o desvio padrão σ na posição. O desvio para a posição é determinado por $\sigma = \sqrt{\langle z^2\rangle - \langle z\rangle^2}$.

Exercício 6 Desafio I

Suponha que o sistema elétron+sítios encontre-se confinado no interior de um capacitor plano de placas paralelas de área A e densidade de carga positiva σ, separadas por uma distância d, ao longo do eixo z. Considere a seguinte expressão para o operador momento $\mathbb{P}$:

$$\mathbb{P}|z\rangle = \left(\frac{-i\hbar}{a}\right)(|z+a\rangle - |z-a\rangle). \tag{9}$$

Essa expressão é válida para o centro mas não nas bordas. Modifique-a para contabilizar o contorno.

a) Qual o hamiltoniano $\mathbb{H}$ do sistema? Qual sua dimensão?

b) Calcule $[\mathbb{V}, \Pi]$.

c) Calcule todos os autoestados e autovalores e indique o estado de menor energia, também conhecido como estado fundamental.

Exercício 7 Desafio II

O sistema elétron+sítio do exercício anterior encontre-se sob ação de um potencial $\mathbb{V} = m_e\omega^2\mathbb{Z}^2/2$.

a) Encontre seus autoestados e respectivas autoenergias.

b) Verifique a paridade dos autoestados.

c) Qual o estado fundamental? Estado fundamental é aquele de menor energia.

Exercício 8 Espaço de momenta

Ainda considerando o espaço discreto do exercício, definimos o seguinte vetor $|q\rangle$ na base das posições:

$$|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\sum_{z=-a}^{a} \mathrm{e}^{\imath qz/\hbar}|z\rangle. \tag{10}$$

A normalização $\sqrt{3}$ foi escolhida pois a dimensão deste espaço é 3. Claramente, $|q\rangle$ lembra uma série de Fourier.

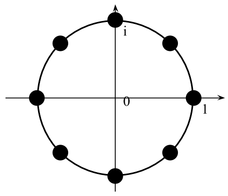

Figura 2. Raízes da unidade no plano complexo.

a) Como o argumento da exponencial deve ser sempre adimensional, qual a unidade de q? Qual a conclusão que se pode obter?
b) A Figura 2 ilustra as possíveis raízes da unidade no plano complexo, $\sqrt[n]{1} = \sqrt[n]{\mathrm{e}^{2\imath\pi}}$. Calcule a soma de todas as raízes. Determine os possíveis valores de q para o sistema físico considerado.
c) Mostre que $\langle q|q'\rangle = \delta_{q,q'}$.
d) Aplique o operador de momento $\mathbb{P} = (\hbar/i)\partial/\partial z$ (representado na base das posições) no estado $|q\rangle$. Qual a conclusão?
e) Generalize para um conjunto de n pontos.

Exercício 9 Espaço contínuo

Considere agora que existem infinitos sítios sobre o mesmo segmento de reta de comprimento total $L = 200\,\mathrm{nm}$, de modo que a distância entre os sítios $a \to 0$. Temos então um contínuo. Esse é nada mais que o espaço unidimensional. A combinação linear que descreve o elétron é agora expressa como

$$|\psi\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} d\,z\psi(z)|z\rangle. \tag{11}$$

Repita todos os itens dos exercícios 1 a 8. Anote as dificuldades encontradas, particularmente sobre o valor das dimensões e normalizações.

Exercício 10 Neste exercício, estudaremos um fenômeno muito interessante que ocorre em MQ: a superposição.

Tome um próton de carga $|e|$ e spin 1/2. Uma base conveniente para descrevê-lo é na base $|\downarrow\rangle_z$ e $|\uparrow\rangle_z$. O índice z serve para lembrar que definimos a projeção do spin ao longo da direção z, que pode ser, por exemplo, a direção de um campo magnético. Nesta base, verifica-se $S_z|\uparrow\rangle = (\hbar/2)|\uparrow\rangle$ enquanto $S_z|\downarrow\rangle = -(\hbar/2)|\downarrow\rangle$.

De acordo com a equação de Schroendinger, a evolução de um estado $|\psi(t)\rangle$ para sistemas conservativos é dada de seguinte maneira:

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\imath E_1 t/\hbar}\psi_1|\varphi_1\rangle + \mathrm{e}^{\imath E_2 t/\hbar}\psi_2|\varphi_2\rangle$$

Sob ação de um campo magnético $\overrightarrow{B_0} = B_0\hat{z}$, seu hamiltoniano é

$$\mathbb{H} = -\mu S_z B_0. \tag{12}$$

a) Determine os autovalores do operador hamiltoniano.
b) Um físico experimental aplica um campo magnético $\vec{B}_1 = B_1\hat{x}$ ($B_1 \gg B_0$)no sistema e em $t = 0$ este campo é desligado, restando somente o campo longitudinal $\vec{B}_0$. Devido a esse procedimento, pode-se dizer que o estado inicial é

$$|\psi(0)\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{13}$$

Determine o estado após um intervalo de tempo t. Calcule a energia média e sua variância. Faça o mesmo para a magnetização.