Determine o espectro de energia e os autoestados do operador hamiltoniano unidimensional

$$\mathbb{H} = \frac{\mathbb{p}^2}{2m} + V_0 \cos(k_0 \mathbb{z}). \tag{1}$$

Resposta 1 Para este problema, é suficiente expandir o ket $|\psi\rangle$ na base $|k\rangle$,

$$|\psi\rangle = \int dk\, \psi(k)|k\rangle. \tag{2}$$

Naturalmente, há apenas um único número quântico a ser considerado: k. A equação de autovalor $\mathbb{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ fornece

$$\mathbb{H}|\psi\rangle = \int dk\, \psi(k) \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 \cos(k_0 \mathbb{z})\right] |k\rangle. \tag{3}$$

A ação do operador potencial é conhecida somente na base das posições, $\mathbb{z}|z\rangle = z|z\rangle$, de maneira que devemos introduzir a relação de completeza, como exemplificado a seguir:

$$V_0 \cos(k_0 \mathbb{z}) \mathbb{1}|k\rangle = \int dz V_0 \cos(k_0 z)|z\rangle\langle z|k\rangle. \tag{4}$$

Claro, a completeza nada mais é do que uma mudança de base. Na equação (4), realizamos uma mudança de base e para retornar à base original basta introduzir a completeza novamente:

$$\int dz V_0 \cos(k_0 z) \mathbb{1}|z\rangle\langle z|k\rangle = \int dz dk'\, V_0 \cos(k_0 z)\langle k'|z\rangle\langle z|k\rangle|k'\rangle. \tag{5}$$

Observe que já é possível realizar a integração de z,

$$\begin{aligned} &\int dz dk'\, V_0 cos(k_0 z)\langle k'|z\rangle\langle z|k\rangle|k'\rangle = \\ &\frac{V_0}{2\pi} \int dk' dz \left(\frac{1}{2}\right) [\mathrm{e}^{i(k'-k-k_0)z} + \mathrm{e}^{i(k'-k+k_0)z}]|k'\rangle = \\ &= \frac{V_0}{2} \int dk' [\delta(k' - (k+k_0)) + \delta(k' - (k-k_0))]|k'\rangle = \\ &= \frac{V_0}{2}(|k+k_0\rangle + |k-k_0\rangle). \end{aligned} \tag{6}$$

Da expressão acima, concluimos que a ação do operador potencial $V_0 \cos(k_0 \mathbb{z})$ conecta o estado de momento k para os estados de momento $k \pm k_0$.

A substituição deste resultado na equação (3) produz

$$\mathbb{H}|\psi\rangle = \int dk\, \psi(k) \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m}|k\rangle + \frac{V_0}{2}|k-k_0\rangle + \frac{V_0}{2}|k+k_0\rangle\right]. \tag{7}$$

A determinação exata das autoenergias e autofunções depende, agora, das características físicas do sistema em questão. Se o sistema possuir um número reduzido de estados de momento (dimensões físicas reduzidas, por exemplo, comparáveis ao espaçamento interatômico), então torna-se necessário encontrar a base que diagonalize a equação (7). Para sistemas com invariância translacional (por exemplo periódicos ou muito extensos), a solução é muito mais simples.

a) *Sistema invariante por translações*

Neste caso, observe que a função de onda no espaço k, $\psi(k)$, pode ser transladada. Isto permite reescrever a equação (7),

$$\begin{aligned} &\mathbb{H}|\psi\rangle = \\ &= \int dk \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(k) + \frac{V_0}{2}(\psi(k+k_0) + \psi(k-k_0))\right] |k\rangle. \end{aligned} \tag{8}$$

Ora, mas se como a função de onda é contínua,

$$\psi(k+\delta k) = \psi(k) + \delta k \left(\frac{d\psi}{dk}\right) + \frac{\delta k^2}{2}\left(\frac{d\psi}{dk}\right)^2 + \dots \tag{9}$$

Para sistemas invariantes por translação, há periodicidade espacial das propriedades físicas. Por exemplo, a cada 20nm há um átomo de carbono e, portanto, a função de onda carrega em si a periodicidade do potencial devido ao C. Aqui, a periodicidade é escrita da seguinte maneira:

$$\psi(k) = \frac{u(a)}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{ika}, \tag{10}$$

onde a é o período espacial e $u(a)$ é uma função que depende somento do período a. Substituido (10) em (9),

$$\psi(k+\delta k) = \left[1 + ia\delta k - \frac{a^2 \delta k^2}{2} + \dots\right] \psi(k). \tag{11}$$

Por fim, substituindo o resultado (11) em (8),

$$\mathbb{H}|\psi\rangle = \int dk \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 \cos(k_0 a)\right] \psi(k)|k\rangle, \tag{12}$$

ou seja, as autoenergias são

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 \cos(k_0 a). \tag{13}$$

b) *Sistema finito*

Para sistemas finitos, não é possível garantir a invariância por translação e nem a disponibilidade de todos os possíveis estado de momento. Isso é razoável posto que o conjunto de vetores de onda disponíveis depende diretamente das dimensões físicas do espaço considerado. A implicação da finitude espacial é que a soma $\sum_{k'} \delta(k' - k \pm k_0)|k'\rangle$ pode ser nula caso o índice k' não contemple $k \pm k_0$, como acontece na equação (6).

Como exemplo, considere o caso particular onde existem somente 2 estados de momento disponíveis, $k_1 = k_0$ e $k_2 = 2k_0$. A representação matricial do operador $\mathbb{H}$ fica

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} -\hbar^2 k_1^2/2m & V_0/2 \\ V_0/2 & -\hbar^2 k_2^2/2m \end{pmatrix}, \tag{14}$$

cujas autoenergias $E_\pm$ e respectivos autoestados $|\pm\rangle$ são

$$E_\pm = -\frac{\hbar^2(k_1^2 + k_2^2)}{2m} \pm \sqrt{\left(\frac{V_0}{2}\right)^2 + \left[\frac{\hbar^2(k_1^2 - k_2^2)}{2m}\right]^2}, \tag{15}$$

$$|\pm\rangle = \frac{|k_1\rangle \pm |k_2\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{16}$$