Mecânica Quântica 12/03/2015

Na aula passada, aprofundamos nossos estudos sobre o conceito de operadores em Mecânica Quântica. O operador hamiltoniano $\mathbb{H}$, cujos autovalores são as energias E_k $(k=0,1,\ldots)$, possui um papel ímpar na evolução temporal dos estados físicos $|\psi(t)\rangle$ de sistemas quânticos. Para ser preciso, como visto na última aula, a equação que rege essa dinâmica é

$$\imath\hbar\left[\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle\right]=\mathbb{H}|\psi(t)\rangle. \tag{1}$$

A equação acima é conhecida como equação de Schrödinger. Hoje não vamos nos divertir com sua resolução formal, apenas desenvolver e explorar algumas ferramentas que, eventualmente, serão de grande serventia. Vejamos algumas de suas propriedades.

Observe o lado direito da eq. (1). O operador hamiltoniano atua sobre o vetor $|\psi(t)\rangle$. De acordo com o conteúdo das aulas passadas, sabemos que operadores atuam sobre vetores. O resultado da operação são outros vetores pertencentes ao mesmo espaço vetorial (no caso da Mecânica Quântica, espaço de Hilbert). Em particular, dado um operador $\mathbb{O}$, existe um conjunto de vetores especiais $|\varphi_k\rangle$ $(k=0,1,\ldots)$, denominados autovetores, que satisfazem

$$\mathbb{O}|\varphi_k\rangle=\lambda_k|\varphi_k\rangle. \tag{2}$$

Os números complexos λ_k são os autovalores. Para cada autovetor $|\varphi_k\rangle$ existe um autovalor λ_k. Note que a atuação do operador $\mathbb{O}$ sobre seu k-ésimo autovetor $|\varphi_k\rangle$ resulta no mesmo autovetor multiplicado escalarmente pelo seu respectivo autovalor. Por conveniência, assumimos que os autovetores já foram devidamente normalizados.

Se o operador $\mathbb{O}$ fôr hermitiano, $\mathbb{O}=\mathbb{O}^\dagger$, seus autovetores são também ortogonais entre si,

$$\langle\varphi_j|\varphi_k\rangle=\delta_{jk}, \tag{3}$$

e seus autovalores são reais $\lambda_k\in\mathbb{R}$. Como em Física medidas geralmente são reais, geralmente os operadores relevantes são hermitianos. Neste caso, temos

$$\langle\varphi_j|\mathbb{O}|\,\varphi_k\rangle=\lambda_j\,\delta_{jk}. \tag{4}$$

1 Autovalores e autovetores: 2 níveis

No que segue, considere um sistema formado por um único átomo e que possui dois estados físicos distintos, $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Para deixar o problema mais emocionante, vamos assumir que o estado $|0\rangle$ representa o átomo em seu estado de mínima energia, E_0, enquanto o estado $|1\rangle$ possui energia $E_1>E_0$, conforme mostra a figura abaixo.

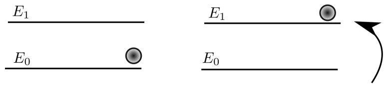

Figura 1. Nosso *toy model*. Sistema de dois níveis. Estado de menor energia é representado pelo nível E_0. Em a)), para baixíssimas temperaturas e um único átomo, a gravura ilustra a comportamento esperado do sistema. Em b), o físico experimental ilumina o sistema.

a) Para deixar o problema mais concreto, associe o modelo de dois níveis descrito acima com algum sistema físico de seu conhecimento. Se necessário, considere aproximações. Justifique sua resposta.

b) Como dissemos no enunciado, cada nível possui sua respectiva energia. Cada nível pode então ser associado a um vetor. A dimensão do espaço em questão é 2. Represente através de colunas os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$.

c) Mostre a representação matricial do operador hamiltoniano.

d) Uma vez entendido o sistema, temos uma idéia brilhante: que tal iluminar o átomo com luzes de diversos comprimentos de onda λ, um de cada vez? Medimos a intensidade da luz gerada e a intensidade da luz após a interação com o átomo. O que pode acontecer e com quantos comprimentos de onda? Qual condição λ deve satisfazer?

e) O fenômeno acima é descrito pelo operador $\mathbb{a}^\dagger$. Como descrevê-lo na representação matricial? Ele é hermitiano?

f) Considere que um físico experimental consegue fazer com que o átomo, agora no estado excitado, emita toda a luz absorvida. Descreva o operador $\mathbb{a}$ associado com essa transformação. Justifique.

g) Encontre os autovalores e autovetores do operador $\mathbb{H}_1 = \hbar\omega(\mathbb{a} + \mathbb{a}^\dagger)$.

2 Exercícios

a) Considere um sistema físico composto por três estados, $|-1\rangle$, $|0\rangle$ e $|+1\rangle$. No espaço de Hilbert definido por esses vetores, definimos o operador $\mathbb{J}_x$. Por hora, vamos nos contentar com suas propriedades. Ao longo do curso, veremos suas propriedades mais detalhadamente. Dada a ação de $\mathbb{J}_x$ sobre os estados $|-1\rangle$, $|0\rangle$ e $|+1\rangle$, construa sua representação matricial.

$$\mathbb{J}_x|-1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}|0\rangle, \tag{5}$$

$$\mathbb{J}_x|0\rangle = \hbar\frac{|+1\rangle + |-1\rangle}{\sqrt{2}}, \tag{6}$$

$$\mathbb{J}_x|+1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}|0\rangle. \tag{7}$$

Encontre seus autovalores e autovetores. Calcule o traço de $\mathbb{J}_x$ e de $\mathbb{J}_x^2$. Generalize para qualquer função analítica $f(\mathbb{J}_x)$.

b) Considere os operadores

$$\sigma_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{8}$$

$$\sigma_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{9}$$

$$\sigma_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\imath \\ \imath & 0 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Como se sabe, o produto matricial não é comutativo, isto é, $AB \neq BA$. Mostre que

$$\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = \imath\hbar\sigma_z. \tag{11}$$

Em seguida, calcule os autovalores e autovetores de cada operador. Mostre que os autovalores poderiam ter sido obtidos a partir do traço. Calcule $\exp(\imath\beta\sigma_x)$ na base dos autovetores do operador σ_z. Realize o procedimento anterior agora na base dos autovetores de σ_x.

c) Prove que operadores hermitianos possuem apenas autovalores reais e que seus autovetores são ortogonais. Exemplifique. É possível construir operadores hermitianos a partir de operadores não hermitianos?