FFI 265: Exercícios (Lista 4)

Resumo de Mecânica Quântica

Postulados:

1. O **estado físico** de uma partícula é descrito pela função de onda (complexa) $\Psi(x,t)$, que corresponde a uma *amplitude de probabilidade*, de forma que a (densidade de) probabilidade de encontrar a partícula no ponto x no tempo t seja dada por $|\Psi(x,t)|^2$. As funções de onda pertencem ao espaço de Hilbert, que é um espaço vetorial completo com produto interno (produto escalar), dado para as funções $\Phi(x)$ e $\Psi(x)$ por $\int \Phi(x)^* \Psi(x)\, dx$. Além disso, impõe-se que estados físicos sejam funções "de quadrado integrável", para as quais pode-se tomar $\int |\Psi(x,t)|^2\, dx = 1$ (i.e. norma igual a 1).

2. **Medidas** de grandezas observáveis estão associadas a operadores lineares *hermitianos*[1] atuando no espaço de funções acima. Exemplos de operadores são: o momento P e a posição X, *definidos* por: $P\,\Psi(x) \equiv (\hbar/i)\,\partial\Psi/\partial x$ e $X\,\Psi(x) \equiv x\,\Psi(x)$. Os únicos resultados possíveis para uma medida do operador A são seus autovalores a_n. A probabilidade de uma medida de A fornecer o valor a_n é dada pelo módulo quadrado da *projeção* c_n do estado Ψ no autoestado $u_n(x)$ correspondente ao autovalor a_n, dada pelo produto escalar de $u_n(x)$ e $\Psi(x)$.

3. Após ser medido um autovalor a_n, ocorre o **colapso** da função de onda no estado u_n, ou no sub-espaço correspondente a a_n se esse autovalor for degenerado.

4. A **evolução** de Ψ é dada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(x,t) \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\Psi(x,t) \,+\, V(x)\,\Psi(x,t)\,,$$

equivalente a igualar a definição do operador hamiltoniano $H \equiv i\hbar\,\partial/\partial t$ à definição usual $H = P^2/2m + V(X)$, sendo P e X os operadores definidos acima.

[1] Para um operador A hermitiano vale $(A^T)^* \equiv A^\dagger = A$. As autofunções (ou autoestados) de tais operadores definem uma *base* no espaço de funções. Os autovalores são reais, e autofunções correspondentes a autovalores diferentes são ortogonais.

Notação de Dirac

Associamos o espaço de funções descrito acima ao espaço (vetorial) de *kets*. O ket $|\Psi\rangle$ é o vetor cujas componentes na representação das coordenadas são $\Psi(x)$. Analogamente, definimos os *bras*, no espaço de funcionais agindo nos kets. A ação do funcional definido pelo bra $\langle\Phi|$ sobre o ket $|\Psi\rangle$, a qual denotamos como $\langle\Phi|\Psi\rangle$, será o produto escalar entre as funções $\Phi(x)$ e $\Psi(x)$, i.e.

$$\langle\Phi|\Psi\rangle \;=\; \int \Phi(x)^* \, \Psi(x) \, dx \,.$$

[Para o estado físico temos $\langle\Psi|\Psi\rangle = \int |\Psi(x)|^2 dx = 1$.] Portanto, identificamos o bra $\langle\Phi|$ como o transposto conjugado do vetor definido pelo ket $|\Phi\rangle$. (Para cada ket há um bra.) Desta forma, as funções de onda têm uma interpretação geométrica natural. Em particular, as componentes $\Psi(x)$ são as projeções do ket $|\Psi\rangle$ na base de autoestados (autokets) $|x\rangle$ do operador X, dados por funções delta. De fato

$$\Psi(x) \;=\; \int \Psi(x') \, \delta(x' - x) \, dx' \;=\; \langle x|\Psi\rangle$$

se tomarmos $\langle x|x_0\rangle = \delta(x - x_0)$. Analogamente, a autofunção do operador P correspondente a autovalor p, i.e. a expressão do ket $|p\rangle$ na representação das coordenadas, será dada pela onda plana de momento p, que normalizamos e.g. como $|p\rangle = \exp(ipx/\hbar)/\sqrt{2\pi\hbar}$. Temos assim

$$\langle p|\Psi\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \, \Psi(x) \, dx \;=\; \widetilde{\Psi}(p) \,.$$

Em geral, a função de onda $\Psi(x)$ pode ser expandida na base de um operador A como $\Psi(x) \;=\; \sum_n c_n \, u_n(x)$, sendo $c_n = \int u_n(x)^* \, \Psi(x) \, dx$. (Segue diretamente supondo que as autofunções $u_n(x)$ formam uma base ortonormal.) Em notação bra-ket temos

$$|\Psi\rangle \;=\; \sum_n c_n \, |u_n\rangle \,, \qquad c_n \;=\; \langle u_n|\Psi\rangle \,.$$

Note que fica clara acima a completeza da base de A: $\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = \mathbb{1}$, sendo $|u_n\rangle\langle u_n|$ o *projetor* no ket $|u_n\rangle$. Em particular podemos escrever a *decomposição espectral* de A como

$$A \;=\; \sum a_n \, |u_n\rangle\langle u_n| \,.$$

Exercícios

1. Demonstre que um operador hermitiano só tem autovalores reais, e que seus autovalores diversos correspondem a autoestados ortogonais.

2. Verifique que as bases dos operadores X e P são completas, i.e. que

$$\int |x\rangle\langle x| \, dx \;=\; \int |p\rangle\langle p| \, dp \;=\; \mathbb{1}$$

(dica: verifique a ação dos operadores acima sobre um ket genérico $|\Psi\rangle$) e que seus autokets são ortonormalizados no sentido de Dirac, i.e. que $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$ e $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$. Esses autokets são normalizáveis?

3. Qual a expressão do operador X na base dos momentos? e quais as expressões de P e de suas autofunções nessa base?

4. Obtenha a relação de comutação entre os operadores X e P a partir de suas definições e de sua ação sobre o estado Ψ. Demonstre agora o "princípio da incerteza", i.e. mostre que o produto das flutuações desses operadores calculadas no ket $\psi\rangle$ (que representa o estado físico do sistema) satisfaz $\Delta X \Delta P \geq \hbar/2$. **Dica:** Defina o ket $|\phi\rangle \equiv (X + i\lambda P)|\psi\rangle$ (λ real) e imponha norma não-negativa para ele.

5. Calcule as relações de comutação entre as componentes do operador momento angular orbital $\mathbf{L} \equiv \mathbf{R} \times \mathbf{P}$, sendo $\mathbf{R}$ e $\mathbf{P}$ as versões tridimensionais de X e P acima. Calcule agora as relações de comutação das componentes de $\mathbf{L}$ com o operador $\mathbf{L}^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, associado ao módulo do momento angular.

6. Em mecânica quântica, o operador momento angular generalizado $\mathbf{J}$, *definido* pelas relações de comutação vistas acima para $\mathbf{L}$, possui as seguintes propriedades:

   - O operador $\mathbf{J^2}$ possui autovalores $\hbar^2 j(j+1)$ dados por $j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \ldots$.
   - O operador J_z possui autovalores $\hbar m$, com m dado (para cada j) por $m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$.

   Discuta as propriedades dos operadores levantamento e abaixamento $J_\pm$, definidos por
   $$J_\pm \;\equiv\; J_x \pm i J_y \,.$$
   Dica: note que os operadores $\mathbf{J}^2$ e J_z podem ser diagonalizados na mesma base (por quê?) e indique os estados dessa base como $|j\,m\rangle$. Considere agora as relações de comutação de J_+ e J_- com J_z e determine assim a ação de tais operadores sobre os autokets $|j\,m\rangle$.

7. Demonstre que as ações dos operadores $J_\pm$ nos autokets $|j\,m\rangle$ acima podem ser escritas como
   $$J_\pm|j\,m\rangle \;=\; \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\,|j\,m \pm 1\rangle \,.$$
   Dica: considere as expressões para os produtos de J_+ e J_- e veja como elas se reduzem a combinações dos operadores $\mathbf{J}^2$ e J_z, que são diagonais na base $|j\,m\rangle$.