F689 – Mecânica Quântica I

Segunda Aula de Exercícios

Thaís Victa Trevisan – thaistre@ifi.unicamp.br

Adaptação do exercício 1.23 do livro "*Modern Quantum Mechanics (second edition)*" – autores: J.J. Sakurai e Jim Napolitano

Considere um espaço de estado tridimensional, cuja base ortonormal é composta pelos *kets* $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$. As representações matriciais de dois operadores, A e B, nessa base são

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix}$$

com a e b reais.

(a) Calcule os autovalores e autovetores de B. Note que o espectro de A é degenerado. B também exibe um espectro degenerado?

(b) Mostre que A e B comutam.

(c) Encontre um novo conjunto de *kets* ortonormais que são autoestados simultâneos de A e B.

(d) Especifique os autovalores de A e B referentes a cada um desses novos *kets*. Os autoestados são unicamente determinados pelas duplas de autovalores?

(e) **Extra:** considere agora, além do operador A, outros dois C e D, cujas representações matriciais na base formada pelos *kets* $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$ são

$$C = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad D = \begin{pmatrix} d & 0 & 0 \\ 0 & -d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{pmatrix},$$

onde c e d são constantes reais. $\{A, C\}$ formam um C.C.O.C? E quanto a $\{A, D\}$? E $\{C, D\}$? E $\{A, B, C\}$?

Solução:

Comentários Gerais:

A base do espaço de estados dada pelo enunciado corresponde ao conjunto dos *kets*

$$\mathscr{B} = \{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\} \; . \tag{1}$$

Dizer que $\mathscr{B}$ é uma base ortonormal equivale a dizer que:

(i) $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = \langle 3|3\rangle = 1$

(ii) $\langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = \langle 1|3\rangle = \langle 3|1\rangle = \langle 2|3\rangle = \langle 3|2\rangle = 0$

Além disso, $\mathscr{B}$ é uma base completa, ou seja, seus elementos obedecem à relação de fechamento

$$\mathbb{1} = \sum_{j=1}^{3} \left| j \right\rangle \left\langle j \right| = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| \ . \tag{2}$$

Lembremo-nos de que os operadores podem ser representados como matrizes de dimensão $N \times N$, onde N corresponde à **dimensão do espaço de estados** em questão (no caso desse exercício, $N = 3$). Os elementos de matriz de um operador, digamos A, na base escolhida para o espaço de estados é, por sua vez, nada mais do que

$$A_{ij} = \left\langle i \left| A \right| j \right\rangle \ .$$

É importante notar que o índice i refere-se à linha da matriz, enquanto que j refere-se à coluna. Desse modo, A_{ij} corresponde ao número (que pode ser real ou complexo) que estará na i-ésima linha e j-ésima coluna da representação matricial do operador A. Isso posto, as representações matriciais dos operadores A e B, dados no enunciado, na base (1) são

$$A = \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \langle 1|A|3\rangle \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & \langle 2|A|3\rangle \\ \langle 3|A|1\rangle & \langle 3|A|2\rangle & \langle 3|A|3\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} \tag{3}$$

e

$$B = \begin{pmatrix} \langle 1|B|1\rangle & \langle 1|B|2\rangle & \langle 1|B|3\rangle \\ \langle 2|B|1\rangle & \langle 2|B|2\rangle & \langle 2|B|3\rangle \\ \langle 3|B|1\rangle & \langle 3|B|2\rangle & \langle 3|B|3\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} . \tag{4}$$

Item (a):

Para resolvermos o item (a), precisamos encontrar os autovalores e autovetores da matriz (4). Ou seja, temos que resolver a equação de autovaloes

$$\begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} , \tag{5}$$

onde $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$ corresponde(m) ao(s) autovetor(es) e λ ao(s) respectivo(s) autovalor(es) de B. Podemos reescrever (5) da seguinte maneira

$$\begin{pmatrix} b-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & -ib \\ 0 & ib & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = 0 , \tag{6}$$

ou, equivalentemente $[B - \lambda\mathbb{1}]\,\mathbf{v} = 0$.

Sabemos, da álgebra linear que (6) tem solução não trivial se

$$\det\begin{pmatrix} b-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & -ib \\ 0 & ib & -\lambda \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow (\lambda - b)^2\,(\lambda + b) = 0\,. \tag{7}$$

As raizes da **equação característica** $(\lambda - b)^2\,(\lambda + b) = 0$ nos dão os autovalores de B e, já que se trata de uma equação de terceiro grau, temos três autovalores, sendo dois deles degenerados:

$$\lambda_1 = \lambda_2 = b \quad \text{e} \quad \lambda_3 = -b\,.$$

Vamos, agora, calcular os autovetores para cada um dos autovalores:

1. **Para** $\lambda_3 = -b$

$$[B + b\mathbb{1}]\,\mathbf{v} = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} 2b & 0 & 0 \\ 0 & b & -ib \\ 0 & ib & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = 0\,.$$

Então, para encontrarmos as componentes v_1, v_2 e v_3 do autovetor relativo a λ_3, temos que resolver a o sistema linear

$$\begin{cases} 2bv_1 = 0 \\ bv_2 - ibv_3 = 0 \\ ibv_2 + bv_3 = 0 \end{cases}. \tag{8}$$

Note que as duas últimas equações do sistema (8) são **linearmente dependentes**. De (8), obtemos $v_1 = 0$ e $v_2 = iv_3$. Portanto

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = v_3\begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}$$

Exigindo que $\mathbf{v}$ seja normalizado, encontramos $v_3 = 1/\sqrt{2}$. Logo, para o autovalor $\lambda_3 = -b$, temos o autovetor $\mathbf{v} = \sqrt{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}$, ou, em termos dos kets da base (1)

$$\mathbf{v} = \sqrt{\frac{1}{2}}\,[i\,|2\rangle + |3\rangle]\,. \tag{9}$$

2. **Para** $\lambda_1 = \lambda_2 = b$

$$[B - b\mathbb{1}]\,\mathbf{w} = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -b & -ib \\ 0 & ib & -b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix} = 0\,.$$

Nesse, caso, temos apenas duas equações (que são linearmente dependentes) no sistema linear

$$\begin{cases} -bw_2 - ibw_3 = 0 \\ ibw_2 - bw_3 = 0 \end{cases}, \tag{10}$$

de modo que tanto w_1 quanto w_2 (ou w_3) ficam indeterminados. De (10), obtermos $w_3 = i w_2$. Logo:

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ i w_2 \end{pmatrix} = w_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + w_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}.$$

Note que $w_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $w_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}$ são ortogonais entre sí e também são ortogonais ao autovetor da equação (10). Assim,

$$\mathbf{w}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |1\rangle \tag{11}$$

e

$$\mathbf{w}^{(2)} = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[|2\rangle + i\, |3\rangle \right] \tag{12}$$

são os dois autovetores ortonormais relativos ao autovalor degenerado $\lambda_1 = \lambda_2 = b$.

Portanto, o espectro de B, assim como o de A é degenerado. Resumindo os resultados do item (a), os autovalores[1] e respectivos autoestados do operador B são:

$$\boxed{\begin{array}{ccc} b_1 = b & \longrightarrow & |b_1\rangle = |1\rangle \\ b_2 = b & \longrightarrow & |b_1\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[|2\rangle + i\, |3\rangle \right] \\ b_3 = -b & \longrightarrow & |b_3\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} \left[i\, |2\rangle + |3\rangle \right] \end{array}}.$$

Item (b):

- Calculando AB:

$$AB = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ab & 0 & 0 \\ 0 & 0 & iab \\ 0 & -iab & 0 \end{pmatrix}.$$

- Calculando BA:

$$BA = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ab & 0 & 0 \\ 0 & 0 & iab \\ 0 & -iab & 0 \end{pmatrix}.$$

Logo

$$\boxed{AB = BA \Rightarrow [A, B] = 0 \Rightarrow \text{A e B comutam!!}}$$

Item (c)

[1] Importante: mudei a notação que estava utilizando até o momento: chamei $\lambda_1 = b_1$, $\lambda_2 = b_2$ e $\lambda_3 = b_3$.

Note que o operador A já é diagonal na base $\mathscr{B}$, eq. (1). Então, seus autovalores e autoestados são:

$$\boxed{\begin{array}{ccc} a_1 = a & \longrightarrow & |a_1\rangle = |1\rangle \\ a_2 = -a & \longrightarrow & |a_1\rangle = |2\rangle \\ a_3 = -a & \longrightarrow & |a_3\rangle = |3\rangle \end{array}} \, .$$

Importante: como a_2 e a_3 são autovalores degenerados de A, qualquer combinação linear dos *kets* $|a_2\rangle$ e $|a_3\rangle$ continuam sendo autoestados de A com autovalor $-a$. Vejamos:

$$A\big(\alpha\,|a_2\rangle + \beta\,|a_3\rangle\big) = \alpha A\,|a_2\rangle + \beta A\,|a_3\rangle = -a\big(\alpha\,|a_2\rangle + \beta\,|a_2\rangle\big) \, .$$

Em particular, podemos tomar as combinações lineares $\sqrt{\frac{1}{2}}\,[\,|2\rangle + i\,|3\rangle]$ e $\sqrt{\frac{1}{2}}\,[i\,|2\rangle + |3\rangle]$. Portanto,

$$|u_1\rangle \equiv |1\rangle \, , \tag{13}$$

$$|u_2\rangle \equiv \sqrt{\frac{1}{2}}\,[\,|2\rangle + i\,|3\rangle] \tag{14}$$

e

$$|u_3\rangle \equiv \sqrt{\frac{1}{2}}\,[i\,|2\rangle + |3\rangle] \tag{15}$$

são autovetores comuns a A e B. Ou seja, na base formada pelos *kets* $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$ e $|u_3\rangle$, tanto A quanto B são diagonais.

Item (d):

No item anterior mostramos que (13), (14) e (15) são autovetores comuns a A e B. Esses *kets* são relativos aos seguintes autovalores de A e B:

Autovalores de A	autovalores de B		autoestados
a	b	$\longrightarrow$	$\vert u_1\rangle = \vert 1\rangle \equiv \vert a,b\rangle$
$-a$	b	$\longrightarrow$	$\vert u_2\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\,[\,\vert 2\rangle + i\,\vert 3\rangle] \equiv \vert -a,b\rangle$
$-a$	$-b$	$\longrightarrow$	$\vert u_3\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\,[i\,\vert 2\rangle + \vert 3\rangle] \equiv \vert -a,-b\rangle$

Portanto, cada possível dupla de autovalores de A e B determina unicamente um autoestado comum desses operadores: por exemplo, o único estado relacionado aos autovalores $-a$ e b é $\sqrt{\frac{1}{2}}\,[\,|2\rangle + i\,|3\rangle]$. Uma vez que os operadores A e B apresentam uma base comum que os diagonaliza e seus autoestados em comum são unicamente determinados pelas duplas de autovalores, A e B formam um **Conjunto Completo de Observáveis que Comutam (C.C.O.C)!**

Item (e):

Os operadores A, C e D já são diagonais na base (1). Seus autoestados em comum e respectivos autovalores são:

Autovalores de A	autovalores de C	autovalores de D		autoestados
a	c	d	$\longrightarrow$	$\vert 1\rangle \equiv \vert a,c,d\rangle$
$-a$	c	$-d$	$\longrightarrow$	$\vert 2\rangle \equiv \vert -a,c,-d\rangle$
$-a$	c	d	$\longrightarrow$	$\vert 3\rangle \equiv \vert -a,c,d\rangle$

.

Note que as duplas de autovalores de A e C não determinam, univocamente, os autoestados em comum, pois à dupla $(-a,c)$ estão relacionados tanto os estados $|2\rangle$ quanto $|3\rangle$. Então, A e C não formam um C.C.O.C. Similarmente, $\{C,D\}$ também não é C.C.O.C. Já as duplas de autovalores de A e D e o trio de autovalores de A, C e D determinam unicamente os autoestados em comum desses operadores, o que implica que tanto $\{A,D\}$ quanto $\{A,C,D\}$ são C.C.O.C.