F 689 - Turma A
Aula de exercícios nº1 - PAD

UNICAMP, 5 de setembro de 2017

Considere uma função f de uma variável x. Em um certo domínio, dizemos que f pode ser expressa em uma série de potências

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n. \tag{1}$$

Agora considere um operador A arbitrário. Definindo $A^2 = A.A$, podemos criar uma série de potências de A, tal qual a expressão (1), ou seja,

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n, \tag{2}$$

onde A^n é o operador A multiplicado n vezes. Assim, pode-se definir o operador exponencial de A, de tal maneira que

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} = I + A + \frac{A^2}{2!} + ... + \frac{A^n}{n!} + ... \ , \tag{3}$$

onde I é a matriz identidade.

Questão 1 - A matriz σ_x é definida por

$$\sigma_x \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Prove a relação $e^{i\alpha\sigma_x} = I\cos\alpha + i\sigma_x \sin\alpha$, onde I é matriz identidade 2×2.

SOLUÇÃO: A matriz $i\alpha\sigma_x$ pode ser escrita como

$$i\alpha\sigma_x \equiv \begin{bmatrix} 0 & i\alpha \\ i\alpha & 0 \end{bmatrix}.$$

Usando a definição (3) da função exponencial, vamos calcular $e^{i\alpha\sigma_x}$ termo à termo:

$$(i\alpha\sigma_x)^2 = \begin{bmatrix} 0 & i\alpha \\ i\alpha & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & i\alpha \\ i\alpha & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\alpha^2 & 0 \\ 0 & -\alpha^2 \end{bmatrix} = -\alpha^2 I$$

$$(i\alpha\sigma_x)^3 = -\alpha^2 I \begin{bmatrix} 0 & i\alpha \\ i\alpha & 0 \end{bmatrix} = -i\alpha^3\sigma_x$$

$$(i\alpha\sigma_x)^4 = -i\alpha^3\sigma_x \begin{bmatrix} 0 & i\alpha \\ i\alpha & 0 \end{bmatrix} = \alpha^4\sigma_x^2 = \alpha^4 I.$$

Assim, podemos dizer intuitivamente que $(i\alpha\sigma_x)^{2n} = (i\alpha)^{2n} I$, com $n = 0,\, 1,\, 2, \ldots$. Para os termos ímpares, $(i\alpha\sigma_x)^{2n+1} = (i\alpha)^{2n+1}\sigma_x$, com $n = 0,\, 1,\, 2, \ldots$. Dessa maneira vamos reescrever (3) como

$$e^{i\alpha\sigma_x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha\sigma_x)^n}{n!} = I + i\alpha\sigma_x - \frac{1}{2!}\alpha^2 I - \frac{1}{3!} i\alpha^3\sigma_x + \frac{1}{4!}\alpha^4 I + \frac{1}{5!} i\alpha^5\sigma_x - \ldots =$$

$$= \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} - \ldots\right) I + \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} - \ldots\right) i\sigma_x =$$

$$= I \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{(2n)!}\right) + i\sigma_x \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n+1}}{(2n+1)!}\right) =$$

$$= I \cos\alpha + i\sigma_x \sin\alpha \quad \blacksquare,$$

já que os termos entre parênteses correspondem às séries de $\cos\alpha$ e $\sin\alpha$, respectivamente.

Por que é importante definirmos uma função de um operador? Assim podemos representar qualquer operador em termos de operadores mais simples e, consequentemente, autovalores mais simples. Veja: considere $|\varphi_a\rangle$ um autovetor do operador A com autovalor a. Assim sendo,

$$A|\varphi_a\rangle = a|\varphi_a\rangle \quad \Rightarrow \quad A^n|\varphi_a\rangle = a^n|\varphi_a\rangle.$$

Como $F(A)$ pode ser expressa em uma série tal como em (2), então

$$\left(I + A + \frac{A^2}{2!} + \ldots + \frac{A^n}{n!} + \ldots\right)|\varphi_a\rangle = \left(1 + a + \frac{a^2}{2!} + \ldots + \frac{a^n}{n!} + \ldots\right)|\varphi_a\rangle$$

$$F(A)|\varphi_a\rangle = F(a)|\varphi_a\rangle. \tag{4}$$

Agora considere uma função potencial $V(X)$. Vamos usar a propriedade (4) para demonstrar a equivalência do operador Hamiltoniano com a função Hamiltoniana na equação de Schrödinger. Seja $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. A Hamiltoniana clássica é escrita com a soma de um termo cinético e de outro potencial, sendo assim escrevemos

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{P^2}{2m} + V(X)\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{5}$$

Aplicando o $\langle x|$ em ambos os lados de (5), temos

$$\frac{1}{2m}\left\langle x\,|\,P^2\,|\,\psi\right\rangle + \left\langle x\,|\,V(X)\,|\,\psi\right\rangle = E\left\langle x\,|\,\psi\right\rangle$$

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2\left\langle x\,|\,\psi\right\rangle + V(x)\left\langle x\,|\,\psi\right\rangle = E\left\langle x\,|\,\psi\right\rangle,$$

já que, por (4), $\langle x|\,V(X) = V(x)\,\langle x|$. Então,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

que corresponde, justamente, à equação de Schrödinger independente do tempo, demonstrando a equivalência entre os espaços $\mathcal{F}_x$ e $\mathcal{E}_x$, como já era de se esperar.

Questão 2 - Considere o operador Hamiltoniano H de uma partícula unidimensional definido por

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X),$$

onde X e P satisfazem a relação $[X,\,P] = i\hbar$. Os autovetores de H são denotados como $H\,|\varphi_n\rangle = E_n\,|\varphi_n\rangle$, onde n é uma base discreta. Mostre que

$$\left\langle \varphi_n\,|\,P\,|\,\varphi_{n'}\right\rangle = \alpha\left\langle \varphi_n\,|\,X\,|\,\varphi_{n'}\right\rangle,$$

onde α é um coeficiente que depende da diferença entre E_n e $E_{n'}$.

SOLUÇÃO: Vamos determinar o comutador$[X,\,H]$. Usando propriedades de comutadores,

$$[X,\,H] = \frac{1}{2m}\left[X,\,P^2\right] + [X,\,V(X)] = \frac{1}{2m}\left[X,\,P^2\right],$$

pois $[X,\,V(X)] = 0$. Continuando,

$$[X,\,H] = \frac{1}{2m}\left[X,\,P^2\right] = \frac{1}{2m}[X,\,P]\,P + \frac{P}{2m}[X,\,P] = \frac{i\hbar}{m}P.$$

Aplicando os kets e bras da base de autovetores,

$$\langle\varphi_n|\,\frac{i\hbar}{m}P\,|\varphi_{n'}\rangle = \langle\varphi_n|\,[X,\,H]\,|\varphi_{n'}\rangle$$

$$\langle\varphi_n|\,P\,|\varphi_{n'}\rangle = -\frac{im}{\hbar}\langle\varphi_n|\,XH - HX\,|\varphi_{n'}\rangle = -\frac{im}{\hbar}\left(\langle\varphi_n|\,XH\,|\varphi_{n'}\rangle - \langle\varphi_n|\,HX\,|\varphi_{n'}\rangle\right)$$

$$-\frac{im}{\hbar}\left(\langle\varphi_n|\,XE_{n'}\,|\varphi_{n'}\rangle - \langle\varphi_n|\,E_nX\,|\varphi_{n'}\rangle\right) = \frac{im}{\hbar}\left(E_n - E_{n'}\right)\langle\varphi_n|\,X\,|\varphi_{n'}\rangle.$$