Determinando autoestados de um operador Hamiltoniano

Victor Lins, Arthur Otoni, Artur Libanio e Micaele Vitória

Tutor: Danilo Ferreira

27 de janeiro de 2021

Resumo

Resumo

Sobre a Escola de Verão do ICTP-SAIFR

Durante a escola fomos tutorados pelo professor Danilo Ferreira, que nos ministrou aulas acerca da mecânica quântica moderna de forma simples e didática, sem perder profundidade. Aqui solucionamos um problema que nos foi apresentado visando colocar em prática de forma desafiadora os conhecimentos obtidos em aula.

Experimento da Dupla Fenda e suas implicações

Experimento da Dupla Fenda e suas implicações

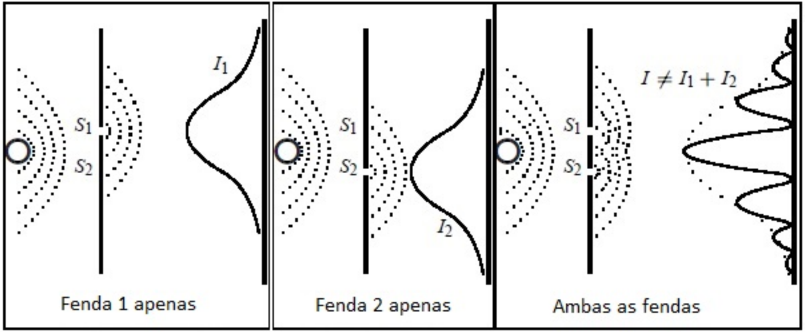

Figura: visualizando o experimento.

Vetores de Estado

Vetores de Estado

Definição

São ferramentas matemáticas muito utilizadas na mecânica quântica que representam algum estado em particular do sistema. O físico teórico Paul Dirac nos introduziu a notação bra-ket via vetores de estado, representados da maneira a seguir.

Vetores de Estado

Definição

São ferramentas matemáticas muito utilizadas na mecânica quântica que representam algum estado em particular do sistema. O físico teórico Paul Dirac nos introduziu a notação bra-ket via vetores de estado, representados da maneira a seguir.

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{bmatrix} \langle\lambda| = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

Principais postulados da Mecânica Quântica

Principais postulados da Mecânica Quântica

Princípio da Superposição

Dado dois estados admissíveis de um sistema quântico, então a soma desses dois estados também é um estado admissível do sistema.

Principais postulados da Mecânica Quântica

Princípio da Superposição

Dado dois estados admissíveis de um sistema quântico, então a soma desses dois estados também é um estado admissível do sistema.

Observáveis

Toda grandeza física mensurável (observável) Q *é descrita por um operador auto-adjunto* $\hat{Q}$ *agindo no espaço de Hilbert.*

Principais postulados da Mecânica Quântica

Princípio da Superposição

Dado dois estados admissíveis de um sistema quântico, então a soma desses dois estados também é um estado admissível do sistema.

Observáveis

Toda grandeza física mensurável (observável) Q é descrita por um operador auto-adjunto $\hat{Q}$ agindo no espaço de Hilbert.

Equação de Schrödinger

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Enunciado do problema

Enunciado do problema

O operador Hamiltoniano para um sistema de dois estados é dado por

$$\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

Enunciado do problema

O operador Hamiltoniano para um sistema de dois estados é dado por

$$\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

onde a é um número com dimensões de energia. Ache os autovalores e os correspondentes autovetores de energia (como combinações lineares de $|1\rangle$ e $|2\rangle$).

Enunciado do problema

O operador Hamiltoniano para um sistema de dois estados é dado por

$$\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

onde a é um número com dimensões de energia. Ache os autovalores e os correspondentes autovetores de energia (como combinações lineares de $|1\rangle$ e $|2\rangle$).

Adote:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Equação característica da Álgebra Linear

Equação característica da Álgebra Linear

Para encontrar os autovalores e os respectivos autovetores de $\hat{H}$, precisamos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo, isto é:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{1}$$

Equação característica da Álgebra Linear

Para encontrar os autovalores e os respectivos autovetores de $\hat{H}$, precisamos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo, isto é:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{1}$$

onde $\hat{H}$ é o operador Hamiltoniano, E representa os seus autovalores e $|\psi\rangle$ seus autovetores. Visando resolver essa equação, calcularemos primeiro o operador $\hat{H}$.

Determinando o operador Hamiltoniano

Determinando o operador Hamiltoniano

Dado que $\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$ e adotando as matrizes supracitadas para os vetores base $|1\rangle$ e $|2\rangle$, calculamos $\hat{H}$ através da seguinte operação matricial:

$$\hat{H} = a\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\right]$$

Determinando o operador Hamiltoniano

Dado que $\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$ e adotando as matrizes supracitadas para os vetores base $|1\rangle$ e $|2\rangle$, calculamos $\hat{H}$ através da seguinte operação matricial:

$$\hat{H} = a\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\right]$$

$$\therefore \hat{H} = \begin{pmatrix}a & a\\ a & -a\end{pmatrix} \tag{2}$$

Determinando o operador Hamiltoniano

Dado que $\hat{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$ e adotando as matrizes supracitadas para os vetores base $|1\rangle$ e $|2\rangle$, calculamos $\hat{H}$ através da seguinte operação matricial:

$$\hat{H} = a\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\right]$$

$$\therefore \hat{H} = \begin{pmatrix}a & a\\ a & -a\end{pmatrix} \tag{2}$$

Uma vez determinado quem é $\hat{H}$, podemos subtrair $E|\psi\rangle$ dos dois lados da equação (1), a fim de solucioná-la.

Encontrando os autovalores de $\hat{H}$

Encontrando os autovalores de $\hat{H}$

Colocando $|\psi\rangle$ em evidência, temos:

$$(\hat{H} - E \cdot \hat{I})|\psi\rangle = |0\rangle \tag{3}$$

onde $\hat{I}$ é a matriz identidade da mesma ordem que $\hat{H}$, ou seja, 2x2.

Encontrando os autovalores de $\hat{H}$

Colocando $|\psi\rangle$ em evidência, temos:

$$(\hat{H} - E \cdot \hat{I})|\psi\rangle = |0\rangle \tag{3}$$

onde $\hat{I}$ é a matriz identidade da mesma ordem que $\hat{H}$, ou seja, 2x2.
Notoriamente, $E \cdot \hat{I}$ é dado por:

$$\begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} \tag{4}$$

Encontrando os autovalores de $\hat{H}$

Colocando $|\psi\rangle$ em evidência, temos:

$$(\hat{H} - E \cdot \hat{I})|\psi\rangle = |0\rangle \tag{3}$$

onde $\hat{I}$ é a matriz identidade da mesma ordem que $\hat{H}$, ou seja, 2x2.
Notoriamente, $E \cdot \hat{I}$ é dado por:

$$\begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} \tag{4}$$

Visando obter o polinômio característico (cujas raízes são os autovalores de $\hat{H}$), igualamos $\det(\hat{H} - E \cdot \hat{I})$ a zero:

$$\begin{vmatrix} a - E & a \\ a & -a - E \end{vmatrix} = -(a - E)(a + E) - a^2 = 0 \therefore E = \pm a\sqrt{2} \tag{5}$$

Encontrando os autovalores de $\hat{H}$

Colocando $|\psi\rangle$ em evidência, temos:

$$(\hat{H} - E \cdot \hat{I})|\psi\rangle = |0\rangle \tag{3}$$

onde $\hat{I}$ é a matriz identidade da mesma ordem que $\hat{H}$, ou seja, 2x2.
Notoriamente, $E \cdot \hat{I}$ é dado por:

$$\begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} \tag{4}$$

Visando obter o polinômio característico (cujas raízes são os autovalores de $\hat{H}$), igualamos $\det(\hat{H} - E \cdot \hat{I})$ a zero:

$$\begin{vmatrix} a - E & a \\ a & -a - E \end{vmatrix} = -(a - E)(a + E) - a^2 = 0 \therefore E = \pm a\sqrt{2} \tag{5}$$

Portanto, os dois autovalores de $\hat{H}$ são $a\sqrt{2}$ e $-a\sqrt{2}$.

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Cada autovalor se relaciona com um autovetor respectivo. Como $\hat{H}$ age em ambos os vetores de estado (kets), eles precisam ser necessariamente da seguinte forma:

$$|\psi_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, |\psi_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} \tag{6}$$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Cada autovalor se relaciona com um autovetor respectivo. Como $\hat{H}$ age em ambos os vetores de estado (kets), eles precisam ser necessariamente da seguinte forma:

$$|\psi_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, |\psi_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} \tag{6}$$

Usando as equações em (6), os autovalores em (5) e a equação característica em (1), podemos calcular os autovetores.

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Cada autovalor se relaciona com um autovetor respectivo. Como $\hat{H}$ age em ambos os vetores de estado (kets), eles precisam ser necessariamente da seguinte forma:

$$|\psi_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, |\psi_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} \tag{6}$$

Usando as equações em (6), os autovalores em (5) e a equação característica em (1), podemos calcular os autovetores.
Definindo que o autovetor $|\psi_1\rangle$ relaciona-se com o autovalor $E_1 = a\sqrt{2}$, temos:

$$\hat{H}|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle \implies \begin{pmatrix} a & a \\ a & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = a\sqrt{2} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Resolvendo o produto matricial e igualando as matrizes termo a termo, obtemos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} a\phi_1 + a\phi_2 = a\phi_1\sqrt{2} \\ a\phi_1 - a\phi_2 = a\phi_2\sqrt{2} \end{cases} \implies \phi_2 = \phi_1 \cdot (\sqrt{2} - 1)$$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Resolvendo o produto matricial e igualando as matrizes termo a termo, obtemos o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} a\phi_1 + a\phi_2 = a\phi_1\sqrt{2} \\ a\phi_1 - a\phi_2 = a\phi_2\sqrt{2} \end{cases} \implies \phi_2 = \phi_1 \cdot (\sqrt{2} - 1)$$

Isso significa que existem infinitas representações do ket $|\psi_1\rangle$ que satisfazem essa equação característica, do tipo:

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_1(\sqrt{2} - 1) \end{pmatrix} \forall \phi_1 \in \mathbb{C}$$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Analogamente,

$$\hat{H}|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle \implies \begin{pmatrix} a & a \\ a & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = -a\sqrt{2} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}$$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Analogamente,

$$\hat{H}|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle \implies \begin{pmatrix} a & a \\ a & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = -a\sqrt{2} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}$$

Mais uma vez, resolvendo o produto matricial e igualando os termos, temos:

$$\begin{cases} a\lambda_1 + a\lambda_2 = -a\lambda_1\sqrt{2} \\ a\lambda_1 - a\lambda_2 = -a\lambda_2\sqrt{2} \end{cases} \implies \lambda_2 = -\lambda_1(\sqrt{2}+1)$$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Analogamente,

$$\hat{H}|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle \implies \begin{pmatrix} a & a \\ a & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = -a\sqrt{2} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}$$

Mais uma vez, resolvendo o produto matricial e igualando os termos, temos:

$$\begin{cases} a\lambda_1 + a\lambda_2 = -a\lambda_1\sqrt{2} \\ a\lambda_1 - a\lambda_2 = -a\lambda_2\sqrt{2} \end{cases} \implies \lambda_2 = -\lambda_1(\sqrt{2}+1)$$

Dessa forma, temos que

$$|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ -\lambda_1(\sqrt{2}+1) \end{pmatrix}, \forall \lambda_1 \in \mathbb{C}.$$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Encontrando os autovetores de $\hat{H}$

Escrevendo os autovetores como uma combinação linear dos vetores de base $|1\rangle$ e $|2\rangle$, temos:

$$|\psi_1\rangle = \phi_1|1\rangle + (\sqrt{2}-1)\phi_1|2\rangle$$
$$|\psi_2\rangle = \lambda_1|1\rangle + (\sqrt{2}+1)\lambda_1|2\rangle$$

Finalização

Finalização

Precisamos, agora, determinar as dependências ϕ_1 e λ_1 dos referidos autovetores. Para isso, aplicaremos a condição de normalização da mecânica quântica, i.e.:

$$|\psi|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Finalização

Precisamos, agora, determinar as dependências ϕ_1 e λ_1 dos referidos autovetores. Para isso, aplicaremos a condição de normalização da mecânica quântica, i.e.:

$$|\psi|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Correspondência dual (bra-ket)

Sabendo que $\langle\psi|\psi\rangle$ nada mais é do que o produto interno do ket $|\psi\rangle$ com seu correspondente dual, o bra $\langle\psi|$, determinamos quem são os correspondentes dos autovetores $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ para então aplicarmos a condição de normalização para cada.

Finalização

Finalização

Utilizando a propriedade de que o correspondente dual de $a|\psi\rangle$ é $\langle\psi|a^*$, temos:

$$|\psi_1\rangle = \phi_1|1\rangle + (\sqrt{2}-1)\phi_1|2\rangle \iff \langle\psi_1| = \langle 1|\phi_1^* + \langle 2|\phi_1^*(\sqrt{2}-1)$$
$$|\psi_2\rangle = \lambda_1|1\rangle + (\sqrt{2}+1)\lambda_1|2\rangle \iff \langle\psi_2| = \langle 1|\lambda_1^* + \langle 2|\lambda_1^*(\sqrt{2}+1)$$

Finalização

Utilizando a propriedade de que o correspondente dual de $a|\psi\rangle$ é $\langle\psi|a^*$, temos:

$$|\psi_1\rangle = \phi_1|1\rangle + (\sqrt{2}-1)\phi_1|2\rangle \iff \langle\psi_1| = \langle 1|\phi_1^* + \langle 2|\phi_1^*(\sqrt{2}-1)$$

$$|\psi_2\rangle = \lambda_1|1\rangle + (\sqrt{2}+1)\lambda_1|2\rangle \iff \langle\psi_2| = \langle 1|\lambda_1^* + \langle 2|\lambda_1^*(\sqrt{2}+1)$$

Calculando o produto interno para o primeiro autovetor, conseguimos:

$$\langle\psi_1|\psi_1\rangle = (\langle 1|\phi_1^* + \langle 2|\phi_1^*(\sqrt{2}-1))(\phi_1|1\rangle + (\sqrt{2}-1)\phi_1|2\rangle) = 1$$

$$= |\phi_1|^2 + |\phi_1|^2(\sqrt{2}-1)^2 = 1 \therefore \phi_1 = \sqrt{\frac{1}{2(2-\sqrt{2})}}$$

Finalização

Finalização

Analogamente para o segundo autovetor, temos:

$$\langle\psi_2|\psi_2\rangle = ((\langle 1|\lambda_1^* + \langle 2|\lambda_1^*(\sqrt{2}+1))(\lambda_1|1\rangle + (\sqrt{2}+1)\lambda_1|2\rangle) = 1$$

$$= |\lambda_1|^2 + |\lambda_1|^2(\sqrt{2}+1)^2 = 1 \therefore \lambda_1 = \sqrt{\frac{1}{2(2+\sqrt{2})}}$$

Por fim, os autovalores de $\hat{H}$ são $E = \{a\sqrt{2}, -a\sqrt{2}\}$ e os autovetores são

$$|\psi_1\rangle = \frac{|1\rangle + (\sqrt{2}-1)|2\rangle}{\sqrt{2(2-\sqrt{2})}} \iff E = a\sqrt{2}$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{|1\rangle + (\sqrt{2}+1)|2\rangle}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \iff E = -a\sqrt{2}$$

Finalização

Finalização

Conclusão

Percebemos que os únicos resultados possíveis para a medição da energia do sistema são os autovalores encontrados, e os estados admissíveis para o sistema são os associados autovetores.