Capítulo 6

Método de Operadores

Nos capítulos anteriores resolvemos os problemas de autovalores e autovetores de observáveis escrevendo explicitamente as equações matriciais ou diferenciais associadas. Mais ainda, obtivemos a solução (formal) da equação de Schrödinger dependente do tempo usando o método de separação de variáveis. Neste capítulo vamos mostrar que estes problemas podem ser resolvidos de outra maneira através da análise de propriedades dos operadores. Em particular, vamos obter o espectro de um oscilador harmônico unidimensional algebricamente sem termos que lidar com funções especiais. Além disso, mostraremos que a evolução temporal de um sistema quântico pode ser vista como a ação de um operador unitário sobre o estado inicial.

6.1 Solução do Oscilador Harmônico Unidimensional

Consideremos um oscilador harmônico unidimensional cuja hamiltoniana é dada por

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\,\mu\omega^2 x^2 \,, \tag{6.1}$$

onde p e x são respectivamente o momento linear e a posição da partícula, os quais satisfazem

$$[x, p] \;=\; i\hbar \,. \tag{6.2}$$

Na Mecânica Clássica podemos escrever a hamiltoniana (6.1) como o módulo de um número complexo

$$H = \hbar\omega \; a^\star a \quad \text{com} \tag{6.3}$$

$$a = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} \, x \, + \, i \, \frac{p}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}} \, , \tag{6.4}$$

onde fatorizamos o fator $\hbar\omega$ por conveniência. Visto que x e p não comutam, esta relação em Mecânica Quântica deve ser modificada para

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) , \tag{6.5}$$

com o hermitiano conjugado de a sendo dado por

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} \, x \, - \, i \, \frac{p}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}} \, . \tag{6.6}$$

O operador a ($a^\dagger$) é usualmente chamado de operador de aniquilação ou abaixamento (criação ou levantamento).

Podemos interpretar as equações (6.4) e (6.6) como uma troca das variáveis x e p por a e $a^\dagger$, sendo que a hamiltoniana do sistema é dada por (6.5) nas novas variáveis. Para completar esta substituição devemos calcular o comutador de a com $a^\dagger$, o qual é dado por

$$[a, a^\dagger] = 1 \, . \tag{6.7}$$

Note que nas novas variáveis há uma simplificação na relação de comutação, bem como na expressão da hamiltoniana do sistema. A partir desta última equação é simples mostrar que os operadores de aniquilação e criação também satisfazem

$$[a^\dagger a \; , \; a] = - a \, , \tag{6.8}$$

$$[a^\dagger a \; , \; a^\dagger] = a^\dagger \, . \tag{6.9}$$

6.1.1 Obtenção do espectro

Denotemos por $|\lambda\rangle$ um autoestado de H associado ao autovalor $\hbar\omega(\lambda + 1/2)$, *i.e.*

$$H \, |\lambda\rangle = \hbar\omega \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \, |\lambda\rangle \, , \tag{6.10}$$

onde já escrevemos convenientemente o autovalor. Tendo em vista a expressão da hamiltoniana (6.5) temos que

$$a^\dagger a \, |\lambda\rangle \;=\; \lambda \, |\lambda\rangle \; , \tag{6.11}$$

ou seja, $|\lambda\rangle$ também é autoestado de $a^\dagger a$. Resolvamos o último problema de autovalores. Para isso precisaremos dos seguintes fatos:

1. Visto que o módulo ao quadrado do vetor $a|\lambda\rangle$ é positivo ou nulo segue que
$$|\; a|\lambda\rangle \;|^2 \;=\; \langle\lambda|a^\dagger a|\lambda\rangle \;\geq\; 0 \; . \tag{6.12}$$

2. O operador de aniquilação aplicado ao autoestado $|\lambda\rangle$ é autoestado de $a^\dagger a$ com autovalor $\lambda - 1$. De fato,
$$a^\dagger a \, (a|\lambda\rangle) \;=\; a^\dagger a a \, |\lambda\rangle \;=\; a(a^\dagger a{-}1) \, |\lambda\rangle \;=\; (\lambda{-}1) \, (a|\lambda\rangle) \; , \tag{6.13}$$
onde utilizamos (6.7) e (6.11).

3. Analogamente, o operador de criação aplicado a $|\lambda\rangle$ é autovetor de $a^\dagger a$ com autovalor $\lambda + 1$.
$$a^\dagger a \; (a^\dagger|\lambda\rangle) \;=\; (\lambda + 1) \; (a^\dagger|\lambda\rangle) \; . \tag{6.14}$$

De (6.12) segue que $\lambda \geq 0$ visto que

$$\langle\lambda|a^\dagger a|\lambda\rangle \;=\; \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle \;\geq\; 0 \; . \tag{6.15}$$

Mais ainda, visto que o operador de aniquilação aplicado a um autoestado gera um outro com autovalor reduzido de uma unidade, podemos concluir de (6.15) e (6.13) que existe um autovalor mínimo $\lambda_{\min}$ tal que

$$a|\lambda_{\min}\rangle \;=\; 0 \; . \tag{6.16}$$

Por outro lado, calculando o produto escalar de $a|\lambda_{\min}\rangle$ consigo mesmo, temos que

$$\langle\lambda_{\min}|a^\dagger a|\lambda_{\min}\rangle \;=\; \lambda_{\min}\langle\lambda_{\min}|\lambda_{\min}\rangle \;=\; 0 \; . \tag{6.17}$$

Tendo em vista que $|\lambda_{\min}\rangle$ deve ter módulo não nulo, segue que $\lambda_{\min} = 0$. Logo, de (6.13) ou (6.14) segue que λ deve ser um inteiro não negativo. Com isso temos que os autovalores da Hamiltoniana do sistema são

$$\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad \text{com} \qquad n = 0,\; 1\;,\; 2, \cdots$$

6.1.2 Autovetores

Os autovetores de H podem ser determinados a partir do estado fundamental $|0\rangle$ e das relações (6.13) e (6.14). Por sua vez, este é obtido resolvendo-se

$$a|0\rangle \ = \ 0 \ . \tag{6.18}$$

Denotemos por $|n\rangle$ os autovetores normalizados, *i.e.* $\langle n|n\rangle = 1$. De (6.14) temos que

$$|n+1\rangle \ = \ c_{n+1} \ a^\dagger|n\rangle \ , \tag{6.19}$$

onde a constante c_{n+1} foi introduzida para garantir que a normalização do estado $n+1$ esteja correta. Para obter os c_{n+1} basta notar que

$$\begin{aligned} \langle n+1|n+1\rangle \ &= \ 1 \ , \\ &= \ |c_{n+1}|^2 \langle n|aa^\dagger|n\rangle \ , \\ &= \ |c_{n+1}|^2 \ (n+1) \ . \end{aligned}$$

Logo, escolhendo c_{n+1} real, temos que $c_{n+1} = 1/\sqrt{n+1}$ e

$$a^\dagger|n\rangle \ = \ \sqrt{n+1} \ |n+1\rangle \ . \tag{6.20}$$

Analogamente, podemos mostrar que

$$a|n\rangle \ = \ \sqrt{n} \ |n-1\rangle \ . \tag{6.21}$$

Assumindo que $|0\rangle$ é conhecido e que esteja propriamente normalizado, podemos usar (6.20) recursivamente para obter que

$$|n\rangle \ = \ \frac{1}{\sqrt{n!}} \ \left(a^\dagger\right)^n |0\rangle \ . \tag{6.22}$$

Note que até este ponto não necessitamos resolver nenhuma equação diferencial para ter informações sobre o sistema. Caso desejemos recuperar as expressões explícitas para as autofunções, além de determinar $|0\rangle$, basta notar que (6.18) na representação das coordenadas é dada por

$$a|0\rangle \ = \ 0 \quad \Longrightarrow \quad \left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} \ x + \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} \ \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi_0(x) \ = \ 0 \ , \tag{6.23}$$

onde ϕ_0 é a função de onda do estado fundamental. A solução desta equação é

$$\phi_0(x) \;=\; Ae^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}x^2} \;, \tag{6.24}$$

onde A é uma constante. Esta é a solução que foi obtida anteriormente. Para obter as funções de onda dos estados excitados basta determinar A para que este estado esteja normalizado e então aplicar (6.22).

É interessante notar que a solução (6.24) de (6.23) é única. Lembrando que provamos existir apenas um $\lambda_{\min}$ $(= 0)$, segue que todos os autoestados da Hamiltoniana são não degenerados.

6.2 Aplicação

O uso da solução obtida acima facilita muito uma série de cálculos já que muitas vezes não é necessário uso de funções especiais e suas propriedades. A título de exemplo, vamos calcular $\langle n|x|k\rangle$. Note que fazendo $n = k$ obtemos o valor esperado de x.

A idéia básica é expressar o operador x (p) em termos dos operadores de criação e aniquilação. A partir de (6.4) e (6.6) é fácil ver que

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left(a + a^\dagger\right) \;, \tag{6.25}$$

e também

$$p = i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}\left(a^\dagger - a\right) \;. \tag{6.26}$$

Feita esta substituição, utilizamos as relações (6.20) e (6.21), juntamente com o fato dos estados estarem normalizados $\langle n|k\rangle = \delta_{n,k}$, para calcular os elementos de matriz ou valores esperados desejados.

6.2.1 $\langle \mathbf{n}|\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle$

Utilizando (6.25) temos que

$$\langle n|x|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\langle n|a + a^\dagger|k\rangle \;. \tag{6.27}$$

Agora empregando (6.20) e (6.21) para calcular o resultado da ação dos operadores $a^\dagger$ e a respectivamente, temos que

$$\langle n|x|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left[\sqrt{k}\ \langle n|k-1\rangle + \sqrt{k+1}\ \langle n|k+1\rangle\right] . \tag{6.28}$$

Portanto,

$$\langle n|x|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left[\sqrt{k}\ \delta_{n,k-1} + \sqrt{k+1}\ \delta_{n,k+1}\right] . \tag{6.29}$$

No caso particular em que $n = k$, podemos ver desta expressão que o valor esperado de x no estado $|n\rangle$ é nulo, recuperando o resultado que obtivemos anteriormente.

6.2.2 Δx

Avaliemos agora Δx para um sistema que se encontra em um autoestado $|n\rangle$. Tendo em vista o resultado acima para o valor esperado de x, resta-nos calcular apenas o valor esperado de x^2.

$$\begin{aligned} \langle x^2\rangle = \langle n|x^2|n\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)\langle n|(a+a^\dagger)^2|n\rangle \\ &= \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)\langle n|aa + a^\dagger a^\dagger + aa^\dagger + a^\dagger a|n\rangle \end{aligned} \tag{6.30}$$

Utilizando agora os resultados (6.20) e (6.21) temos que

$$\langle x^2\rangle = \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)\left[\sqrt{n(n-1)}\langle n|n-2\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}\langle n|n+2\rangle + (2n+1)\langle n|n\rangle\right] , \tag{6.31}$$

logo, utilizando que os estados estão propriamente normalizados temos que

$$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{\mu\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right) \quad\Longrightarrow\quad \Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}\ \left(n+\frac{1}{2}\right)} . \tag{6.32}$$

Exercício: *Utilizando esta técnica, obtenha as seguintes quantidades*

$$\langle n|p|k\rangle \quad e \quad \langle n|p^2|k\rangle \ .$$

6.3 Exponenciando um operador

Uma ferramenta útil que utilizaremos bastante é a exponencial de um operador. Vejamos sua definição e métodos de cálculo. Se A é um operador em um espaço de Hilbert podemos definir o operador

$$e^{tA} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} A^n \ , \tag{6.33}$$

onde t é um número complexo. Note que e^{tA} é um operador linear já que a soma e o produto de operadores lineares também o é.

Evitando discutir a questão da convergência da soma infinita no lado direito de (6.33), pode-se demonstrar as seguintes propriedades:

$$e^{tA} e^{sA} = e^{(t+s)A} \ , \tag{6.34}$$

e

$$\frac{d}{dt} e^{tA} = A \ e^{tA} = e^{tA} A \ , \tag{6.35}$$

ou seja, o operador e^{tA} herda através de (6.33) propriedades análogas às da função e^{ta}, onde a é um número.

Há que se lembrar, porém, que e^{tA} é um operador o que por exemplo implica que em geral

$$e^{tA} e^{sB} \neq e^{sB+tA} \ , \tag{6.36}$$

$$e^{tA} e^{sB} \neq e^{sB} e^{tA} \ , \tag{6.37}$$

a menos que A e B comutem.

Se $A^\dagger$ for o operador hermitiano conjugado de A, então da definição segue $(e^{tA})^\dagger = e^{t^\star A^\dagger}$. De fato,

$$(e^{tA})^\dagger = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n A^n}{n!} \right)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{t^n A^n}{n!} \right)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t^*)^n (A^\dagger)^n}{n!} = e^{t^\star A^\dagger} \ .$$

Exemplo: sistema de dois níveis

Consideremos um sistema de dois níveis e o operador representado pela matriz de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad .$$

Aplicando a definição da exponencial de um operador para $\alpha\sigma_1$, onde α é uma constante, segue

$$e^{i\alpha\sigma_1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^n}{n!}\sigma_1^n \quad .$$

Para avaliarmos esta série devemos notar que o produto de um número par de σ_1's resulta na matriz identidade ao passo que o produto de um número ímpar destas matrizes tem como resultado σ_1. Logo, podemos escrever

$$e^{\alpha\sigma_1} = \left(\sum_{n \text{ par}} \frac{(i\alpha)^n}{n!} \right) \mathbb{1} + \left(\sum_{n \text{ ímpar}} \frac{(i\alpha)^n}{n!} \right) \sigma_1$$

Agora, tudo que resta fazer é reconhecer que a série par (ímpar) fornce o $\cos(\alpha)$ $(i \sin \alpha)$, resultado em

$$e^{\alpha\sigma_1} = \cos(\alpha)\ \mathbb{1} + i \sin(\alpha)\ \sigma_1 \quad . \tag{6.38}$$

Exemplo: translações espaciais

Podemos representar translações espaciais através da exponencial do operador momento linear. Para vermos mais facilmente este fato consideremos apenas uma dimensão espacial. O operador $\exp(ipa/\hbar)$ atuando em uma função conduz à mesma função mas deslocada de a:

$$e^{i\frac{pa}{\hbar}}\Psi(x) = e^{a\frac{\partial}{\partial x}}\Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\frac{d^n\Psi}{dx^n}a^n \quad . \tag{6.39}$$

Todavia, a última série acima nada mais é do que a série de Taylor de $\Psi(x+a)$ quando fazemos a expansão em torno do ponto x. Logo,

$$e^{i\frac{pa}{\hbar}}\Psi(x) = \Psi(x+a) \quad . \tag{6.40}$$

6.3.1 Como calcular e^{tA}

O cálculo da exponencial de A é possível, ao menos formalmente, devido ao seguinte fato fundamental: se $|\varphi\rangle$ é autovetor de A com autovalor a

$$A\,|\varphi\rangle \;=\; a\,|\varphi\rangle$$

então

$$\begin{aligned} A^2\,|\varphi\rangle &= a^2\,|\varphi\rangle\,, \\ \cdots &= \cdots \\ A^n\,|\varphi\rangle &= a^n\,|\varphi\rangle \end{aligned}$$

para todo n.[1] Portanto,

$$e^{At}|\varphi\rangle \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}A^n\,|\varphi\rangle \;=\; e^{ta}\,|\varphi\rangle \tag{6.41}$$

i.e. $|\varphi\rangle$ é autovetor de e^{tA} com autovalor e^{ta}.

Em particular, se A admitir uma base ortonormal de autovetores,

$$A\,|\varphi_n\rangle \;=\; a_n\,|\varphi_n\rangle \quad \text{com} \quad \langle\varphi_r|\varphi_n\rangle = \delta_{rn}\,, \tag{6.42}$$

por exemplo se A for hermitiano, então

$$e^{tA}\,|\varphi_n\rangle \;=\; e^{ta_n}\,|\varphi_n\rangle\,. \tag{6.43}$$

Portanto, se $|\psi\rangle$ é um vetor arbitrário podemos calcular $e^{tA}\,|\psi\rangle$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n|\varphi_n\rangle \quad \text{onde} \quad c_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle \\ e^{tA}\,|\psi\rangle &= \sum_n c_n e^{ta_n}|\varphi_n\rangle \end{aligned} \tag{6.44}$$

onde usamos a linearidade de e^{tA}.

[1] Por que?

6.4 O operador de evolução temporal

Obtenhamos uma solução formal da evolução temporal de sistema mostrando que esta pode ser representada por um operador linear atuando sobre a condição inicial. Para tanto consideremos o operador

$$U(t) = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \tag{6.45}$$

o qual satisfaz

$$i\hbar\frac{dU}{dt} \;=\; HU\;. \tag{6.46}$$

Portanto, o vetor

$$|\psi(t)\rangle \;=\; U(t)\;|\psi_0\rangle \tag{6.47}$$

satisfaz à equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial U}{\partial t}|\psi_0\rangle = HU|\psi_0\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{6.48}$$

com condição inicial

$$|\psi(t=0)\rangle = |\psi_0\rangle\;. \tag{6.49}$$

Para compreendermos melhor o significado da expressão (6.47) é conveniente utilizar o método de cálculo de U discutido na seção 6.3.1. Para tanto escrevemos,

$$H|\varphi_n\rangle \;=\; E_n|\varphi_n\rangle \quad \text{com} \quad \langle\varphi_r|\varphi_n\rangle = \delta_{rn} \tag{6.50}$$

i.e. $|\varphi_n\rangle$ são os autovetores normalizados de H. Logo, expandindo $|\psi_0\rangle$ na base de autoestados de H

$$|\psi_o\rangle = \sum c_n|\varphi_n\rangle$$

segue que

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}\;|\psi_0\rangle \\ &= \sum c_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\;|\varphi_n\rangle \end{aligned} \tag{6.51}$$

que é a nossa velha conhecida solução da equação de Schrödinger (6.48).

Como $H = H^\dagger$, *i.e.* H é hermitiano, podemos calcular

$$U^\dagger(t) \;=\; \left(e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}\right)^\dagger \;=\; e^{+\frac{iHt}{\hbar}} \;=\; U(-t)\ . \tag{6.52}$$

Portanto, o operador $U(t)$ é unitário, ou seja

$$U^\dagger(t)\ U(t) \;=\; U(t)\ U^\dagger(t) \;=\; I\ . \tag{6.53}$$

Uma conseqüência importante da unitariedade de U, é que a evolução temporal preserva a normalização dos estados, *i.e.* a probabilidade é conservada!

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle \;=\; \langle\psi_0|U^\dagger(t)U(t)|\psi_0\rangle \;=\; \langle\psi_0|\psi_0\rangle\ . \tag{6.54}$$

Exemplo: sistema de dois níveis

Consideremos um sistema de dois níveis cuja hamiltoniana é dada por

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & \Delta \\ \Delta & E_0 \end{pmatrix} \tag{6.55}$$

onde E_0 e Δ são reais. Note que podemos escrever esta hamiltoniana na forma

$$H = E_0\ \mathbb{1} + \Delta\ \sigma_1\ \ .$$

Uma vez que $\mathbb{1}$ e σ_1 comutam, temos que

$$e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} = e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}\mathbb{1}} \times e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}\sigma_1}\ \ . \tag{6.56}$$

Agora utilizando o resultado obtido anteriormente (6.38) temos que

$$U(t) = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} = e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} \times \left(\cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\mathbb{1} - i\sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\sigma_1\right)\ \ , \tag{6.57}$$

ou seja, o operador evolução temporal deste sistema é dado por

$$U(t) = e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} \times \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) & -i\sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) \\ -i\sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) & \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) \end{pmatrix}\ \ . \tag{6.58}$$