PGF5001 - MECÂNICA QUÂNTICA I (2010)
Resolução Comentada da Lista de Problemas 3
Eduardo T. D. Matsushita

1. Numa rotação de um ângulo β em torno de um eixo com direção $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x}\cos\beta + (1 - \cos\beta)(\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\mathbf{n} + \sin\beta(\mathbf{n}\times\mathbf{x})$$

ou

$$\mathbf{x}' = R_{\mathbf{n}}(\beta)\mathbf{x},$$

com $R_{\mathbf{n}}(\beta)$ sendo a matriz de rotação. É possível verificar que a forma explícita dos elementos da matriz R é dada por:

$$R_{jk} = \cos\beta\;\delta_{jk} + (1 - \cos\beta)n_j n_k - \sin\beta\sum_l \epsilon_{jkl}n_l,$$

onde ϵ_{jkl} é o símbolo de Levi-Civita: ± 1 conforme (j, k, l) seja uma permutação par ou ímpar de $(1, 2, 3)$ e 0 caso haja repetição de índices.

(a) Para a direção $\mathbf{n}_{y'} = (-\sin\alpha, \cos\alpha, 0)$ resulta:

$$\boxed{R_{\mathbf{n}_{y'}} = \begin{pmatrix} \sin^2\alpha + \cos^2\alpha\cos\beta & -\sin\alpha\cos\alpha(1-\cos\beta) & \cos\alpha\sin\beta \\ -\sin\alpha\cos\alpha(1-\cos\beta) & \cos^2\alpha + \sin^2\alpha\cos\beta & \sin\alpha\sin\beta \\ -\cos\alpha\sin\beta & -\sin\alpha\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix}.} \tag{1}$$

(b) Vamos mostrar que a rotação $R_{\mathbf{n}_{y'}}$ é equivalente a uma sequência de **rotações de Euler** da forma:

$$R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha).$$

Para isto calcularemos explicitamente o produto de matrizes. Uma vez que:

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R_y(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix}$$

e

$$R_z^{-1}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

a última obtida utilizando o fato que $R_z^{-1}(\alpha) = R_z^T(\alpha)$, do cálculo explícito do produto das matrizes segue que

$$\boxed{R_{\mathbf{n}_{y'}} = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha).} \tag{2}$$

2. Vamos considerar uma partícula de spin 1/2 no estado $|z,+\rangle$, auto-estado de $\hat{S}_z$ com autovalor $\frac{\hbar}{2}$,

$$\hat{S}_z|z,+\rangle = \frac{\hbar}{2}|z,+\rangle.$$

(a) Se efetuarmos uma rotação de um ângulo β em torno do eixo Oy, o estado rodado é obtido de:

$$|z,+;\beta\rangle = \hat{\mathcal{D}}_y(\beta)|z,+\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{e}_y\beta}|z,+\rangle.$$

No formalismo de Pauli (duas componentes), a matriz de rotação de um ângulo β em torno da direção $\mathbf{e}_y$ para uma partícula de spin 1/2 é dada por

$$\mathcal{D}_y(\beta) = \cos\frac{\beta}{2}1 - i\sigma_y\sin\frac{\beta}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}.$$

Assim, em linguagem espinorial, os coeficientes da expansão do vetor de estado rodado na base formada pelos auto-estados de $\hat{S}_z$ são obtidos de:

$$\begin{pmatrix} \langle z,+|z,+;\beta\rangle \\ \langle z,-|z,+;\beta\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix},$$

e portanto:

$$\boxed{|z,+;\beta\rangle = \cos\frac{\beta}{2}|z,+\rangle + \sin\frac{\beta}{2}|z,-\rangle.} \quad (3)$$

(b) Queremos mostrar que o estado rodado, $|z,+;\beta\rangle$ é um auto-estado do operador $\hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{n}$ com $\mathbf{n} = \sin\beta\ \mathbf{e}_x + \cos\beta\ \mathbf{e}_z$. Vimos que

$$|z,+;\beta\rangle = \hat{\mathcal{D}}_y(\beta)|z,+\rangle.$$

Levando em conta que o vetor $|z,+\rangle$ é o auto-estado do operador $\hat{S}_z$ com autovalor $\frac{\hbar}{2}$ e que $\hat{\mathcal{D}}_y^\dagger(\beta)\hat{\mathcal{D}}_y(\beta) = \hat{1}$, podemos reescrever o estado rodado da forma:

$$|z,+;\beta\rangle = \frac{2}{\hbar}\hat{\mathcal{D}}_y(\beta)\hat{S}_z|z,+\rangle = \frac{2}{\hbar}\hat{\mathcal{D}}_y(\beta)\hat{S}_z\hat{\mathcal{D}}_y^\dagger(\beta)\hat{\mathcal{D}}_y(\beta)|z,+\rangle,$$

ou seja,

$$\hat{\mathcal{D}}_y(\beta)\hat{S}_z\hat{\mathcal{D}}_y^\dagger(\beta)\ |z,+;\beta\rangle = \frac{\hbar}{2}|z,+;\beta\rangle.$$

A última equação mostra que $|z,+;\beta\rangle$ é um auto-estado do operador $\hat{\mathcal{D}}_y(\beta)\hat{S}_z\hat{\mathcal{D}}_y^\dagger(\beta)$ com autovalor igual a $\frac{\hbar}{2}$. Levando em conta que o operador $\hat{\mathbf{S}}$ se transforma como um vetor (operador vetorial),

$$\hat{\mathcal{D}}^\dagger(R)\hat{S}_k\hat{\mathcal{D}}(R) = \sum_l R_{kl}\hat{S}_l,$$

com R_{kl} sendo um elemento da matriz de rotação de um ângulo β em torno da direção Oy, segue que a forma explícita de $\hat{\mathcal{D}}_y(\beta)\hat{S}_z\hat{\mathcal{D}}_y^\dagger(\beta)$ é:

$$\hat{\mathcal{D}}_y(\beta)\hat{S}_z\hat{\mathcal{D}}_y^\dagger(\beta) = \hat{S}_x \sin\beta + \hat{S}_z \cos\beta = \hat{\mathbf{S}} \cdot (\sin\beta, 0, \cos\beta) \equiv \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n},$$

nos permitindo concluir que

$$\boxed{\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}|z,+;\beta\rangle = \frac{\hbar}{2}|z,+;\beta\rangle \;\text{ com }\; \mathbf{n} = \sin\beta\; \mathbf{e}_x + \cos\beta\; \mathbf{e}_z.} \tag{4}$$

Assim, verificamos que $|z,+;\beta\rangle$ é um autovetor do operador $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}$, $\mathbf{n} = \sin\beta\; \mathbf{e}_x + \cos\beta\; \mathbf{e}_z$, com autovalor igual a $\frac{\hbar}{2}$.

(c) Vamos supor que a partícula se encontre no estado rodado. A probabilidade de numa medida de $\hat{S}_x$ encontrarmos o valor $\frac{\hbar}{2}$ é obtido de:

$$P\left(S_x = \frac{\hbar}{2}, \beta\right) = |\langle x,+|z,+;\beta\rangle|^2,$$

onde

$$|x,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z,+\rangle + |z,-\rangle) \to \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

é o auto-estado de $\hat{S}_x$ com autovalor igual a $\frac{\hbar}{2}$. Nessas condições:

$$P\left(S_x = \frac{\hbar}{2}, \beta\right) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}(1 + \sin\beta).$$

Logo:

$$\boxed{P\left(S_x = \frac{\hbar}{2}, \beta\right) = \frac{1}{2}(1 + \sin\beta).} \tag{5}$$

A probabilidade é máxima quando

$$\boxed{\beta = \frac{\pi}{2},} \tag{6}$$

ou seja, quando o estado rodado é o próprio auto-estado de $\hat{S}_x$ com autovalor $\frac{\hbar}{2}$.

(d) Queremos calcular o valor médio das medidas de $\hat{\mathbf{S}}$ no estado não-rodado e rodado.

- Valor médio de $\hat{\mathbf{S}}$ no estado não-rodado, $|z,+\rangle$:

$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle = \langle \hat{S}_x \rangle \mathbf{e}_x + \langle \hat{S}_y \rangle \mathbf{e}_y + \langle \hat{S}_z \rangle \mathbf{e}_z.$$

Explicitamente:

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\langle \hat{S}_y \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

e

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}.$$

Portanto,

$$\boxed{\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle = \frac{\hbar}{2} \mathbf{e}_z.} \tag{7}$$

- Valor médio de $\hat{\mathbf{S}}$ no estado rodado, $|z, +; \beta\rangle$:

$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_R = \langle \hat{S}_x \rangle_R \mathbf{e}_x + \langle \hat{S}_y \rangle_R \mathbf{e}_y + \langle \hat{S}_z \rangle_R \mathbf{e}_z.$$

Explicitamente:

$$\langle \hat{S}_x \rangle_R = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sin\beta,$$

$$\langle \hat{S}_y \rangle_R = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} = 0$$

e

$$\langle \hat{S}_z \rangle_R = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cos\beta.$$

Portanto,

$$\boxed{\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_R = \frac{\hbar}{2} \sin\beta \; \mathbf{e}_x + \frac{\hbar}{2} \cos\beta \; \mathbf{e}_z.} \tag{8}$$

Note que os valores médios de $\hat{\mathbf{S}}$ nos estados rodado e não-rodado estão relacionados diretamente através da rotação de um ângulo β em torno do eixo Oy,

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \sin\beta \\ 0 \\ \frac{\hbar}{2} \cos\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix},$$

ou seja,

$$\boxed{\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_R = R_y(\beta) \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle.} \tag{9}$$

3. Vamos considerar um sistema formado por duas partículas com momentos angulares $j_1 = j_2 = 1$.

   (a) Uma vez que os possíveis valores do momento angular total, j, são tais que $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$, para esse sistema segue que:

$$\boxed{j = 0, 1, 2.} \tag{10}$$

(b) O espaço dos vetores de estado para o sistema composto é o produto tensorial dos espaços de vetores de estado de cada partícula. Nessas condições, se $\{|j_1, m_1\rangle\}$ e $\{|j_2, m_2\rangle\}$ são, respectivamente, as bases de cada um dos espaços de vetores de estado, a base do espaço produto tensorial será

$$\{|j_1, m_1\rangle_1 \otimes |j_2, m_2\rangle_2\}.$$

Note que a dimensão do espaço produto tensorial é igual a $(2j_1+1)(2j_2+1)$. Assim, em termos dos vetores da base produto tensorial, os auto-estados do momento angular total e da sua projeção na direção Oz, $|j, m\rangle$, podem ser escritos da forma:

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} \mathcal{C}^{j_1\ j_2\ j}_{m_1\ m_2\ m} |j_1, m_1\rangle_1 \otimes |j_2, m_2\rangle_2,$$

onde $\mathcal{C}^{j_1\ j_2\ j}_{m_1\ m_2\ m}$ são os **coeficientes de Clebsh-Gordan**, com $m = m_1 + m_2$.

i. Queremos construir o auto-estado com $j = 2$ e $m = 1$. Um modo fácil de obtermos diretamente o auto-estado $|2, 1\rangle$ é a da aplicação do operador $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \hat{J}_{2-}$ sobre o estado $|2, 2\rangle = |1, 1\rangle_1 \otimes |1, 1\rangle_2$, ou seja,

$$\hat{J}_-|2, 2\rangle = \hat{J}_{1-}|1, 1\rangle_1 \otimes |1, 1\rangle_2 + |1, 1\rangle_1 \otimes \hat{J}_{2-}|1, 1\rangle_2.$$

Utilizando a identidade:

$$\hat{J}_-|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle,$$

resulta

$$\boxed{|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle_1 \otimes |1, 0\rangle_2 + |1, 0\rangle_1 \otimes |1, 1\rangle_2).} \tag{11}$$

ii. Agora queremos construir o auto-estado com $j = 1$ e $m = 1$. Uma vez que devemos ter $m = m_1 + m_2$, segue que o estado $|1, 1\rangle$ é uma combinação linear de apenas dois vetores da base produto tensorial, ou seja,

$$|1, 1\rangle = A|1, 1\rangle_1 \otimes |1, 0\rangle_2 + B|1, 0\rangle_1 \otimes |1, 1\rangle_2.$$

Devemos então determinar os coeficientes A e B. Entretanto, esse estado deve ser ortogonal a $|2, 1\rangle$, $\langle 2, 1|1, 1\rangle = 0$, e normalizado, $\langle 1, 1|1, 1\rangle = 1$. Dessas condições, seguem, respectivamente,

$$\begin{cases} A + B = 0 \\ |A|^2 + |B|^2 = 1 \end{cases}$$

onde a escolha da fase foi feita de modo que

$$A = -B = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Logo:

$$\boxed{|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle_1 \otimes |1,0\rangle_2 - |1,0\rangle_1 \otimes |1,1\rangle_2).} \tag{12}$$

(c) Se o sistema está no estado $|1,1\rangle$ a probabilidade de encontrarmos as partículas com $m_1 = 0$ e $m_2 = 1$ é

$$P = |({}_1\langle 1,0| \otimes \ {}_2\langle 1,1|)|1,1\rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

Portanto:

$$\boxed{P = \frac{1}{2}.} \tag{13}$$

4. Vamos considerar um sistema composto por duas partículas de spin 1/2 no estado singleto:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z,+\rangle_1 \otimes |z,-\rangle_2 - |z,-\rangle_1 \otimes |z,+\rangle_2).$$

Sejam O_1 e O_2 dois observadores que medem as componentes do spin da partícula 1 e 2, respectivamente.

(a) A probabilidade de numa medida de $\hat{S}_z(1)$ pelo observador O_1 acharmos um valor igual a $\frac{\hbar}{2}$ é dada por:

$$P\left(S_z(1) = \frac{\hbar}{2}\right) = |({}_1\langle z,+| \otimes_2\langle z,+|)|\psi\rangle|^2 + |({}_1\langle z,+| \otimes_2\langle z,-|)|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

Logo

$$\boxed{P\left(S_z(1) = \frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2}.} \tag{14}$$

(b) A probabilidade de numa medida de $\hat{S}_x(1)$ realizada pelo observador O_1 encontrarmos o valor $\frac{\hbar}{2}$ é dada por:

$$P\left(S_x(1) = \frac{\hbar}{2}\right) = |({}_1\langle x,+| \otimes_2\langle z,+|)|\psi\rangle|^2 + |({}_1\langle x,+| \otimes_2\langle z,-|)|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

Logo

$$\boxed{P\left(S_x(1) = \frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2}.} \tag{15}$$

(c)
- Se o observador O_1 mediu $S_z(1) = \frac{\hbar}{2}$, pelo princípio do colapso da função de onda, o estado do sistema composto logo após a medida será

  $$|\psi'\rangle = (|z,+\rangle_1 \otimes |z,+\rangle_2)({}_1\langle z,+| \otimes_2\langle z,+|)|\psi\rangle + (|z,+\rangle_1 \otimes |z,-\rangle_2)({}_1\langle z,+| \otimes_2\langle z,-|)|\psi\rangle,$$

  da qual segue

  $$\boxed{|\psi'\rangle = |z,+\rangle_1 \otimes |z,-\rangle_2.} \tag{16}$$

- Por outro lado, se o observador O_1 mede $S_x(1) = \frac{\hbar}{2}$, o estado do sistema logo após a medida passa a ser

  $$|\psi'\rangle = (|x,+\rangle_1 \otimes |z,+\rangle_2)({}_1\langle x,+| \otimes_2 \langle z,+|)|\psi\rangle + (|x,+\rangle_1 \otimes |z,-\rangle_2)({}_1\langle x,+| \otimes_2 \langle z,-|)|\psi\rangle,$$

  da qual segue

  $$\boxed{|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x,+\rangle_1 \otimes |z,+\rangle_2 - |x,+\rangle_1 \otimes |z,-\rangle_2).} \tag{17}$$

Observação: Como vimos anteriormente, os vetores que compõem a base no espaço produto tensorial são obtidos tomando o produto tensorial entre os vetores da base associado ao subsistema 1 com os vetores da base associada ao subsistema 2. Entretanto, as bases escolhidas nos subsistemas não precisam pertencer ao mesmo observável físico. Por exemplo, acima nos deparamos com uma base produto tensorial na qual o base do primeiro subsistema é formada pelos auto-estados de $\hat{S}_x$ enquanto que do segundo é formada pelos auto-estados de $\hat{S}_z$.

(d) Aqui temos um problema de medidas sucessivas. Numa medida de $\hat{S}_z(2)$, a probabilidade do observador O_2 obter o valor $\frac{\hbar}{2}$ é dada por:

$$P\left(\hat{S}_z(2) = \frac{\hbar}{2}\right) = |({}_1\langle z,+| \otimes_2 \langle z,+|)|\psi\rangle|^2 + |({}_1\langle z,-| \otimes_2 \langle z,+|)|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}.$$

Logo após a medida o estado do sistema composto será:

$$|\psi'\rangle = (|z,+\rangle_1 \otimes |z,+\rangle_2)({}_1\langle z,+| \otimes_2 \langle z,+|)|\psi\rangle + (|z,-\rangle_1 \otimes |z,+\rangle_2)({}_1\langle z,-| \otimes_2 \langle z,+|)|\psi\rangle,$$

ou mais especificamente

$$|\psi'\rangle = |z,-\rangle_1 \otimes |z,+\rangle_2.$$

i. Assim, a partir desse estado, a probabilidade de numa medida de $\hat{S}_z(1)$ o observador O_1 obter o valor $\frac{\hbar}{2}$ é:

$$P\left(\hat{S}_z(1) = \frac{\hbar}{2}\right) = |({}_1\langle z,+| \otimes_2 \langle z,+|)|\psi'\rangle|^2 + |({}_1\langle z,+| \otimes_2 \langle z,-|)|\psi'\rangle|^2 = 0,$$

de modo que a probabilidade da medida sucessiva é:

$$\boxed{P\left(\hat{S}_z(2) = \frac{\hbar}{2}\right) P\left(\hat{S}_z(1) = \frac{\hbar}{2}\right) = 0.} \tag{18}$$

ii. Por outro lado, a partir do estado do sistema após a medida de O_2 a probabilidade de O_1 obter $\hat{S}_x(1) = \frac{\hbar}{2}$ é:

$$P\left(\hat{S}_x(1) = \frac{\hbar}{2}\right) = |({}_1\langle x,+| \otimes_2 \langle z,+|)|\psi'\rangle|^2 + |({}_1\langle x,+| \otimes_2 \langle z,-|)|\psi'\rangle|^2 = \frac{1}{2},$$

de modo que a probabilidade da medida sucessiva é:

$$\boxed{P\left(\hat{S}_z(2) = \frac{\hbar}{2}\right) P\left(\hat{S}_x(1) = \frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{4}.} \tag{19}$$

(e) O fato de O_2 medir $S_z(2) = \frac{\hbar}{2}$ interfere nas medidas posteriores de O_1 e essa é uma característica intrínseca de um sistema emaranhado no qual os dois subsistemas não são independentes.

5. Vamos considerar uma partícula de spin 3/2 cuja dinâmica é descrita pela hamiltoniana

$$\hat{H} = A(3\hat{S}_z^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) + B(\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2).$$

(a) Para determinar os níveis de energia e os estado estacionários do sistema vamos diagonalizar a matriz que representa a hamiltoniana $\hat{H}$ na base formada pelos auto-estados simultâneos de $\hat{\mathbf{S}}^2$ e $\hat{S}_z$: $\{|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle\}$. Note que um elemento de matriz, $\langle s,m'|\hat{H}|s,m\rangle$, da representação do operador $\hat{H}$ tem a forma:

$$\begin{aligned}\langle s,m'|\hat{H}|s,m\rangle &= (3m^2 - s(s+1))A\hbar^2\delta_{m',m} \\ &+ B\hbar^2\sqrt{(s-m)\,(s+m+1)\,(s-m-1)\,(s+m+2)}\delta_{m',m+2} \\ &+ B\hbar^2\sqrt{(s+m)\,(s-m+1)\,(s+m-1)\,(s-m+2)}\delta_{m',m-2}.\end{aligned}$$

Tomando $s = \frac{3}{2}$ e $m = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$, a forma explícita dessa matriz é dada por:

$$H = \hbar^2 \begin{pmatrix} 3A & 2\sqrt{3}B & 0 & 0 \\ 2\sqrt{3}B & -3A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3A & 2\sqrt{3}B \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3}B & 3A \end{pmatrix},$$

que é diagonal em blocos de dimensão 2×2. Observe que os dois blocos diferem apenas por uma permutação dos elementos da diagonal principal e como consequência os espectros de autovalores de ambos os blocos são idênticos. Diagonalizando cada bloco identificamos dois autovalores:

$$\boxed{E_\pm = \pm\hbar^2\sqrt{9A^2 + 12B^2},}$$

ambos duplamente degenerados. Os dois vetores de estado linearmente independentes associados ao autovalor E_+ são:

$$|E_+\rangle = \frac{1}{N_-}(2\sqrt{3}B|3/2,3/2\rangle + (\sqrt{9A^2+12B^2} - 3A)|3/2,-1/2\rangle)$$

e

$$|E_+\rangle = \frac{1}{N_+}(2\sqrt{3}B|3/2,-3/2\rangle + (\sqrt{9A^2+12B^2} + 3A)|3/2,1/2\rangle),$$

enquanto que os dois vetores de estado associados ao autovalor E_- são:

$$|E_-\rangle = \frac{1}{N_+}(2\sqrt{3}B|3/2,3/2\rangle - (\sqrt{9A^2+12B^2}+3A)|3/2,-1/2\rangle)$$

e

$$|E_-\rangle = \frac{1}{N_-}(2\sqrt{3}B|3/2,-3/2\rangle - (\sqrt{9A^2+12B^2}-3A)|3/2,1/2\rangle),$$

onde $N_\pm$ são as constantes de normalização dadas explicitamente por:

$$N_\pm = \sqrt{2\sqrt{9A^2+12B^2}(\sqrt{9A^2+12B^2}\pm 3A)}.$$

(b) A diagonalização mostrou a existência de dois níveis de energia duplamente degenerados. Vamos determinar aqui um conjunto completo de observáveis compatíveis, ou seja, vamos determinar os observáveis que comutam com a hamiltoniana tais que os autovalores associados definem de modo unívoco os autovetores simultâneos. Podemos mostrar que a hamiltoniana é invariante por uma rotação de π em torno do eixo Oz. De fato, uma vez que

$$\hat{\mathcal{D}}_z^\dagger(\pi)\hat{S}_x\hat{\mathcal{D}}_z(\pi) = -\hat{S}_x, \quad \hat{\mathcal{D}}_z^\dagger(\pi)\hat{S}_y\hat{\mathcal{D}}_z(\pi) = -\hat{S}_y, \quad \hat{\mathcal{D}}_z^\dagger(\pi)\hat{S}_z\hat{\mathcal{D}}_z(\pi) = \hat{S}_z,$$

e explorando o fato que a hamiltoniana é uma forma quadrática dos operadores de spin, facilmente verificamos que

$$\hat{\mathcal{D}}_z^\dagger(\pi)\hat{H}\hat{\mathcal{D}}_z(\pi) = \hat{H} \Rightarrow [\hat{H},\hat{\mathcal{D}}_z(\pi)] = 0.$$

A partir do operador de rotação $\hat{\mathcal{D}}_z(\pi)$ podemos definir o operador:

$$\boxed{\hat{\Pi} = i\hat{\mathcal{D}}_z(\pi),} \tag{20}$$

que atua como um **operador paridade**:

- $\hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi}$ (hermiteano):

$$\hat{\Pi}^\dagger = -ie^{\frac{i}{\hbar}\pi\hat{S}_z} = -ie^{\frac{i}{\hbar}(2\pi-\pi)\hat{S}_z} = ie^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{S}_z} = \hat{\Pi},$$

  onde utilizamos o fato de que $\hat{\mathcal{D}}_z(2\pi) = -\hat{1}$ e
- $\hat{\Pi}^2 = \hat{1}$:

$$\hat{\Pi}^2 = -\hat{\mathcal{D}}_z(2\pi) = \hat{1}.$$

Levando em conta que as ações do operador paridade sobre os vetores da base são da forma

$$\hat{\Pi}|3/2,\pm 3/2\rangle = \mp|3/2,\pm 3/2\rangle \quad \text{e} \quad \hat{\Pi}|3/2,\pm 1/2\rangle = \pm|3/2,\pm 1/2\rangle,$$

facilmente verificamos que os auto-estados linearmente independentes associados a cada nível duplamente degenerado possuem paridades opostas, ou seja,

$$\boxed{|E_+, -1\rangle = \frac{1}{N_-}(2\sqrt{3}B|3/2, 3/2\rangle + (\sqrt{9A^2 + 12B^2} - 3A)|3/2, -1/2\rangle),} \tag{21a}$$

$$\boxed{|E_+, +1\rangle = \frac{1}{N_+}(2\sqrt{3}B|3/2, -3/2\rangle + (\sqrt{9A^2 + 12B^2} + 3A)|3/2, 1/2\rangle),} \tag{21b}$$

$$\boxed{|E_-, -1\rangle = \frac{1}{N_+}(2\sqrt{3}B|3/2, 3/2\rangle - (\sqrt{9A^2 + 12B^2} + 3A)|3/2, -1/2\rangle)} \tag{21c}$$

e

$$\boxed{|E_-, +1\rangle = \frac{1}{N_-}(2\sqrt{3}B|3/2, -3/2\rangle - (\sqrt{9A^2 + 12B^2} - 3A)|3/2, 1/2\rangle).} \tag{21d}$$

Uma vez que a especificação dos autovalores da hamiltoniana e da paridade determinam univocamente um vetor de estado podemos concluir que eles formam um conjunto completo de observáveis que comutam.