**PGF5001 - MECÂNICA QUÂNTICA I (2010)**
**Resolução Comentada da Lista de Problemas 1**
*Eduardo T. D. Matsushita*

1. (a) Queremos determinar os autovalores e os autoestados do operador $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}$ para uma partícula de spin 1/2, onde a direção $\mathbf{n}$ é especificada pelos ângulos $\theta$ e $\phi$,

$$\mathbf{n} = \sin\theta\cos\phi\,\mathbf{e}_x + \sin\theta\sin\phi\,\mathbf{e}_y + \cos\theta\,\mathbf{e}_z.$$

Em termos das componentes do operador vetorial de spin, $\hat{\mathbf{S}}$, o operador $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}$ pode ser escrito da forma

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n} = \sin\theta\cos\phi\,\hat{S}_x + \sin\theta\sin\phi\,\hat{S}_y + \cos\theta\,\hat{S}_z.$$

Vamos trabalhar com a base $\{|z,+\rangle, |z,-\rangle\}$ formada pelos autoestados de $\hat{S}_z$,

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

Se levarmos em conta que as representações dos operadores $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ e $\hat{S}_z$ nesta base são da forma

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

segue que a representação de $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}$ é dada pela matriz

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}.$$

Vamos denotar por $|\mathbf{n},\lambda\rangle$ um particular autovetor de $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}$ associado ao autovalor $\lambda$, ou seja,

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}|\mathbf{n},\lambda\rangle = \lambda|\mathbf{n},\lambda\rangle.$$

Se na base $\{|z,+\rangle, |z,-\rangle\}$ esse autovetor é escrito da forma

$$|\mathbf{n},\lambda\rangle = a|z,+\rangle + b|z,-\rangle \to \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

com $a$ e $b$ sendo coeficientes complexos, a equação de autovalores é dada por

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow$$
$$\begin{pmatrix} \cos\theta - \frac{2\lambda}{\hbar} & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta - \frac{2\lambda}{\hbar} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0.$$

Note que temos um sistema linear homogêneo. Para admitir soluções não-triviais devemos ter

$$\det\begin{pmatrix} \cos\theta - \frac{2\lambda}{\hbar} & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta - \frac{2\lambda}{\hbar} \end{pmatrix} = 0.$$

A equação acima é a chamada **equação característica**. Facilmente concluímos que

$$\boxed{\lambda = \pm\frac{\hbar}{2}.} \tag{1}$$

Observe que os autovalores são reais como era de se esperar pois $\hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{n}$ é um operador hermiteano. Agora vamos determinar os autovetores normalizados de $\hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{n}$.

i. $\lambda = \frac{\hbar}{2} \quad \to \quad \hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{n}|\mathbf{n},+\rangle = \frac{\hbar}{2}|\mathbf{n},+\rangle$:

$$\begin{pmatrix} \cos\theta - 1 & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta - 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0.$$

Temos o sistema:

$$\begin{cases} a = e^{-i\phi}\cot\frac{\theta}{2}b \\ |a|^2 + |b|^2 = 1 \qquad \text{(normalização)} \end{cases}, \tag{2}$$

de onde obtemos

$$|a|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2} \quad \Rightarrow \quad a = \cos\frac{\theta}{2}$$

e

$$|b|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2} \quad \Rightarrow \quad b = e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}.$$

Note que temos liberdade de fixar uma fase global. Assim:

$$\boxed{|\mathbf{n},+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|z,+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|z,-\rangle \to \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.} \tag{3}$$

ii. $\lambda = -\frac{\hbar}{2} \quad \to \quad \hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{n}|\mathbf{n},-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\mathbf{n},-\rangle$:

$$\begin{pmatrix} \cos\theta + 1 & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta + 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0.$$

Temos o sistema:

$$\begin{cases} a = -e^{-i\phi}\tan\frac{\theta}{2}b \\ |a|^2 + |b|^2 = 1 \qquad \text{(normalização)} \end{cases}, \tag{4}$$

de onde obtemos

$$|a|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2} \quad \Rightarrow \quad a = e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}$$

e

$$|b|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2} \quad \Rightarrow \quad b = -\cos\frac{\theta}{2}.$$

Assim:

$$\boxed{|\mathbf{n},-\rangle = e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|z,+\rangle - \cos\frac{\theta}{2}|z,-\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.} \tag{5}$$

(b) Vamos supor que a partícula esteja no estado $|\mathbf{n},-\rangle$. A probabilidade $p(S_z = \frac{\hbar}{2})$ de numa medida de $S_z$ acharmos o valor $\frac{\hbar}{2}$ é

$$\boxed{p\left(S_z = \frac{\hbar}{2}\right) = |\langle z,+|\mathbf{n},-\rangle|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2}.} \tag{6}$$

(c) Se a partícula está no estado $|\mathbf{n},-\rangle$, o valor médio das medidas de $S_x$ é dado por

$$\begin{aligned}
\langle S_x\rangle &= \langle \mathbf{n},-|\hat{S}_x|\mathbf{n},-\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
&= -\frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi.
\end{aligned} \tag{7}$$

Logo:

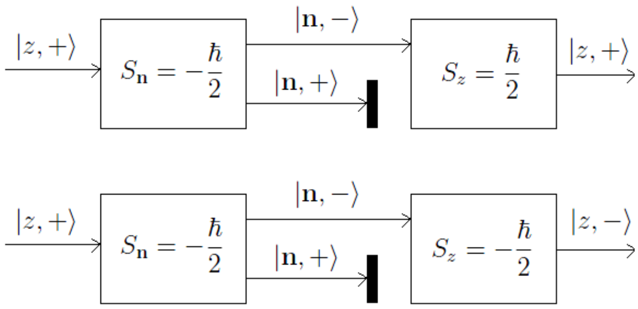
$$\boxed{\langle S_x\rangle = -\frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi.} \tag{8}$$

2. Considere um feixe de átomos de spin 1/2 atravessando um filtro de Stern-Gerlach que mede a componente do spin numa direção $\mathbf{n}$. Vamos supor que os átomos do feixe incidente estão no estado com $S_z = \frac{\hbar}{2}$ e que $\mathbf{n}$ está no plano $xz$, inclinado de um ângulo $\theta$ em relação ao eixo $Oz$, ou seja, $\phi = 0$.

   (a) Primeiramente, vamos calcular a fração dos átomos do feixe emergente que têm $S_z = \frac{\hbar}{2}$ e $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ na situação onde o filtro aceita o estado com $S_{\mathbf{n}} = -\frac{\hbar}{2}$ e rejeita o estado com $S_{\mathbf{n}} = \frac{\hbar}{2}$. No esquema abaixo ilustramos o processo de medida:

   Note que em ambos os casos só existe um caminho de modo que a probabilidade da partícula inicialmente no estado $|z,+\rangle$ continuar no estado $|z,+\rangle$ ou mudar para $|z,-\rangle$ passando pelo estado intermediário $|\mathbf{n},-\rangle$ é igual ao módulo ao quadrado da amplitude de probabilidade da partícula percorrer esse caminho. Nessas condições, a fração do feixe emergente que têm $S_z = \frac{\hbar}{2}$ é dada por

$$f\left(S_z = \frac{\hbar}{2}\right) = |\langle z,+|\mathbf{n},-\rangle|^2|\langle \mathbf{n},-|z,+\rangle|^2$$




que resulta em

$$\boxed{f\left(S_z = \frac{\hbar}{2}\right) = \sin^4\frac{\theta}{2}.} \tag{9}$$

Já a fração do feixe emergente que têm $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ é dada por

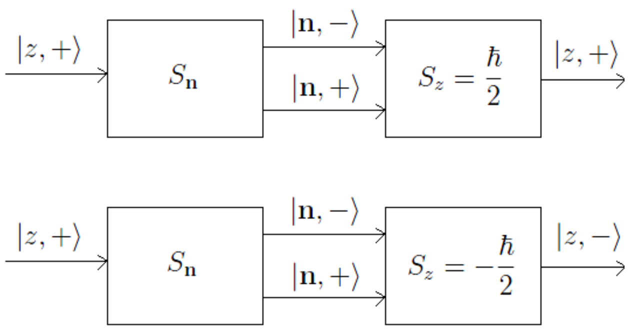
$$f\left(S_z = -\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle z,-|\mathbf{n},-\rangle|^2|\langle \mathbf{n},-|z,+\rangle|^2$$

que resulta em

$$\boxed{f\left(S_z = -\frac{\hbar}{2}\right) = \sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}.} \tag{10}$$

Observe que a soma das frações não é igual a 1 uma vez que parte do feixe é bloqueada no filtro de Stern-Gerlach que permite apenas a saída das partículas com $S_{\mathbf{n}} = -\frac{\hbar}{2}$.

(b) Agora repetiremos o exercício anterior admitindo que o filtro está operando sem rejeitar nenhum estado. Nesse caso, quando medimos $S_{\mathbf{n}}$ sem selecionar identificamos o caminho percorrido pelo feixe e a probabilidade é igual a soma das probabilidades da partícula percorrer os dois caminhos.




Assim, a fração do feixe emergente que têm $S_z = \frac{\hbar}{2}$ é dada por

$$f\left(S_z = \frac{\hbar}{2}\right) = |\langle z,+|\mathbf{n},-\rangle|^2|\langle \mathbf{n},-|z,+\rangle|^2 + |\langle z,+|\mathbf{n},+\rangle|^2|\langle \mathbf{n},+|z,+\rangle|^2$$

que resulta em

$$\boxed{f\left(S_z = \frac{\hbar}{2}\right) = \sin^4\frac{\theta}{2} + \cos^4\frac{\theta}{2}.} \tag{11}$$

Já a fração do feixe emergente que têm $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ é dada por

$$f\left(S_z = -\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle z, -|\mathbf{n}, -\rangle|^2 |\langle \mathbf{n}, -|z, +\rangle|^2 + |\langle z, -|\mathbf{n}, +\rangle|^2 |\langle \mathbf{n}, +|z, +\rangle|^2$$

que resulta em

$$\boxed{f\left(S_z = -\frac{\hbar}{2}\right) = 2\sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}.} \tag{12}$$

Aqui podemos verificar que a soma das frações é igual a 1 pois aqui o filtro não bloqueia nenhuma partícula do feixe incidente.

3. Considere uma molécula triatômica linear formada por três átomos equidistantes, $E$, $C$ e $D$ com um elétron livre. Uma base ortonormal no espaço dos vetores de estado do elétron é dada pelos estados $|\psi_E\rangle$, $|\psi_C\rangle$ e $|\psi_D\rangle$, onde o elétron está localizado na vizinhança dos átomos $E$, $C$ e $D$, respectivamente.

   A hamiltoniana do sistema é

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W},$$

   onde $|\psi_E\rangle$, $|\psi_C\rangle$ e $|\psi_D\rangle$ são autovetores degenerados de $\hat{H}_0$ com energia $E_0$ e $\hat{W}$ é um operador que transfere o elétron de um átomo para o outro definido por

$$\hat{W}|\psi_E\rangle = -a|\psi_C\rangle, \quad \hat{W}|\psi_C\rangle = -a|\psi_E\rangle - a|\psi_D\rangle, \quad \hat{W}|\psi_D\rangle = -a|\psi_C\rangle,$$

   com $a$ sendo uma constante real positiva.

   (a) Levando em conta que a representação do operador hamiltoniana na base $\{|\psi_E\rangle, |\psi_C\rangle, |\psi_D\rangle\}$ é determinada pela ação de $\hat{H}$ em cada um dos vetores da base,

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = \sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{H}|\psi_n\rangle \qquad n, m = E, C, D$$

   facilmente obtemos

$$\boxed{H = \begin{pmatrix} E_0 & -a & 0 \\ -a & E_0 & -a \\ 0 & -a & E_0 \end{pmatrix}.} \tag{13}$$

   Se denotarmos por $|E\rangle$ um particular autovetor de $\hat{H}$,

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

podemos expandir esse vetor na base $\{|\psi_E\rangle, |\psi_C\rangle, |\psi_D\rangle\}$ como

$$|E\rangle = x|\psi_E\rangle + y|\psi_C\rangle + z|\psi_D\rangle,$$

onde $x$, $y$ e $z$ são coeficientes complexos, de modo que a equação de autovalores assume a forma:

$$\begin{pmatrix} E_0 - E & -a & 0 \\ -a & E_0 - E & -a \\ 0 & -a & E_0 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0.$$

Para que o sistema homogêneo acima admita soluções não-triviais devemos ter

$$\det \begin{pmatrix} E_0 - E & -a & 0 \\ -a & E_0 - E & -a \\ 0 & -a & E_0 - E \end{pmatrix} = 0,$$

o que nos leva a equação característica

$$(E_0 - E)[(E_0 - E)^2 - 2a^2] = 0,$$

que é uma equação cúbica em $(E_0 - E)$. Identificamos três soluções $E = E_0$, $E = E_0 + a\sqrt{2}$ e $E = E_0 - a\sqrt{2}$. Assim as energias do sistema são:

$$\boxed{E = E_0 - a\sqrt{2}, \qquad E = E_0, \qquad E = E_0 + a\sqrt{2}.} \tag{14}$$

Fisicamente os autovalores são os possíveis valores que podemos obter em medidas da energia do sistema. Vamos agora determinar os autovetores normalizados:

i. $E = E_0 - a\sqrt{2}$:

$$\begin{pmatrix} a\sqrt{2} & -a & 0 \\ -a & a\sqrt{2} & -a \\ 0 & -a & a\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0.$$

Temos o sistema:

$$\begin{cases} y = \sqrt{2}x \\ z = x \\ |x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = 1 \quad \text{(normalização)} \end{cases}, \tag{15}$$

onde a escolha da fase foi feita de modo que

$$x = \frac{1}{2},$$

$$y = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

e

$$z = \frac{1}{2}.$$

Assim:

$$\boxed{|E_0 - a\sqrt{2}\rangle = \frac{1}{2}(|\psi_E\rangle + \sqrt{2}|\psi_C\rangle + |\psi_D\rangle) \to \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}.} \tag{16}$$

ii. $E = E_0$:

$$\begin{pmatrix} 0 & -a & 0 \\ -a & 0 & -a \\ 0 & -a & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0.$$

Temos o sistema:

$$\begin{cases} y = 0 \\ z = -x \\ |x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = 1 \quad \text{(normalização)} \end{cases}, \tag{17}$$

onde escolhemos a fase de modo que

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$y = 0$$

e

$$z = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Assim:

$$\boxed{|E_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_E\rangle - |\psi_D\rangle) \to \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.} \tag{18}$$

iii. $E = E_0 + a\sqrt{2}$:

$$\begin{pmatrix} -a\sqrt{2} & -a & 0 \\ -a & -a\sqrt{2} & -a \\ 0 & -a & -a\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0.$$

Temos o sistema:

$$\begin{cases} y = -\sqrt{2}x \\ z = x \\ |x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = 1 \quad \text{(normalização)} \end{cases}, \tag{19}$$

onde a fase foi escolhida de modo que

$$x = \frac{1}{2},$$

$$y = -\frac{\sqrt{2}}{2}$$

e

$$z = \frac{1}{2}.$$

Assim:

$$\boxed{|E_0 + a\sqrt{2}\rangle = \frac{1}{2}(|\psi_E\rangle - \sqrt{2}|\psi_C\rangle + |\psi_D\rangle) \to \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}.} \tag{20}$$

(b) Vamos supor que o sistema se encontre no estado fundamental, ou seja, no estado de menor energia $|E_0 - a\sqrt{2}\rangle$. As probabilidades de encontrar o elétron nos estados $|\psi_E\rangle$, $|\psi_C\rangle$ e $|\psi_D\rangle$ são, respectivamente,

$$P(|\psi_E\rangle) = |\langle\psi_E|E_0 - a\sqrt{2}\rangle|^2 = \frac{1}{4} = 25\%,$$

$$P(|\psi_C\rangle) = |\langle\psi_C|E_0 - a\sqrt{2}\rangle|^2 = \frac{1}{2} = 50\%$$

e

$$P(|\psi_D\rangle) = |\langle\psi_D|E_0 - a\sqrt{2}\rangle|^2 = \frac{1}{4} = 25\%.$$

(c) Se medimos a energia do sistema os possíveis valores serão os autovalores calculados no primeiro item:

$$E = E_0 - a\sqrt{2}, E_0 \text{ e } E_0 + a\sqrt{2}.$$

Admitindo que o sistema esteja no estado $|\psi_E\rangle$, as probabilidades de obter cada um desses valores de energia são, respectivamente,

$$P(E_0 - a\sqrt{2}) = |\langle E_0 - a\sqrt{2}|\psi_E\rangle|^2 = \frac{1}{4} = 25\%,$$

$$P(E_0) = |\langle E_0|\psi_E\rangle|^2 = \frac{1}{2} = 50\%$$

e

$$P(E_0 + a\sqrt{2}) = |\langle E_0 + a\sqrt{2}|\psi_E\rangle|^2 = \frac{1}{4} = 25\%.$$

(d) Queremos calcular o valor médio e a dispersão das medidas de energia se o sistema está no estado $|\psi_E\rangle$. O valor médio da energia é:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \langle \psi_E|\hat{H}|\psi_E\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0 & -a & 0 \\ -a & E_0 & -a \\ 0 & -a & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= E_0 \end{aligned}$$

Portanto

$$\boxed{\langle H \rangle = E_0.} \tag{21}$$

Para calcular a dispersão das medidas de energia precisamos calcular explicitamente $\langle H^2 \rangle = \langle \psi_E|\hat{H}^2|\psi_E\rangle$, que fornece

$$\begin{aligned} \langle H^2 \rangle &= \langle \psi_E|\hat{H}^2|\psi_E\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0^2 + a^2 & -2aE_0 & a^2 \\ -2aE_0 & E_0^2 + a^2 & -2aE_0 \\ a^2 & -2aE_0 & E_0^2 + a^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= E_0^2 + a^2. \end{aligned}$$

Logo

$$\langle H^2 \rangle = E_0^2 + a^2.$$

Finalmente concluímos que:

$$\boxed{\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = a^2.} \tag{22}$$

(e) Se o sistema está no primeiro estado excitado, ou seja, no estado de energia $E_0$, $|E_0\rangle$, as probabilidades de encontrar o elétron nos estados $|\psi_E\rangle$, $|\psi_C\rangle$ e $|\psi_D\rangle$ são, respectivamente,

$$P(|\psi_E\rangle) = |\langle \psi_E|E_0\rangle|^2 = \frac{1}{2} = 50\%,$$
$$P(|\psi_C\rangle) = |\langle \psi_C|E_0\rangle|^2 = 0$$

e

$$P(|\psi_D\rangle) = |\langle \psi_D|E_0\rangle|^2 = \frac{1}{2} = 50\%.$$

4. Considere uma partícula de spin 1/2 e uma base de vetores de estado, $|z,+\rangle$ e $|z,-\rangle$, autovetores de $\hat{S}_z$ com autovalores $\frac{\hbar}{2}$ e $-\frac{\hbar}{2}$, respectivamente. A representação de $\hat{S}_y$ nesta base é dada pela matriz,

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

(a) É fácil observar que $\hat{S}_y$ é um observável físico uma vez que sua representação na base formada pelos autovetores $|z,+\rangle$ e $|z,-\rangle$ é uma matriz hermiteana:

$$\boxed{S_y^\dagger = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = S_y.} \tag{23}$$

(b) Vamos denotar por $|y, \lambda\rangle$ um particular autovetor de $\hat{S}_y$ associado ao autovalor $\lambda$, ou seja,

$$\hat{S}_y|y, \lambda\rangle = \lambda|y, \lambda\rangle.$$

Se na base $\{|z, +\rangle, |z, -\rangle\}$ esse autovetor é escrito da forma

$$|y, \lambda\rangle = a|z, +\rangle + b|z, -\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

com $a$ e $b$ sendo coeficientes complexos, a equação de autovalores é dada por

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{2\lambda}{\hbar} & -i \\ i & -\frac{2\lambda}{\hbar} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0.$$

Note que temos um sistema linear homogêneo. Para admitir soluções não-triviais devemos ter

$$\det \begin{pmatrix} -\frac{2\lambda}{\hbar} & -i \\ i & -\frac{2\lambda}{\hbar} \end{pmatrix} = 0,$$

implicando que

$$\boxed{\lambda = \pm\frac{\hbar}{2}.} \tag{24}$$

Observe que os autovalores são reais como era de se esperar pois $\hat{S}_y$ é um operador hermiteano. Agora vamos determinar os autovetores normalizados de $\hat{S}_y$.

i. $\lambda = \frac{\hbar}{2} \quad \rightarrow \quad \hat{S}_y|y, +\rangle = \frac{\hbar}{2}|y, +\rangle$:

$$\begin{pmatrix} -1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0.$$

Temos o sistema:

$$\begin{cases} b = ia \\ |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad \text{(normalização)} \end{cases}, \tag{25}$$

onde escolhemos a fase de modo que

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

e

$$b = \frac{i}{\sqrt{2}}$$

Assim:

$$\boxed{|y, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z, +\rangle + i|z, -\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}.} \tag{26}$$

ii. $\lambda = -\frac{\hbar}{2} \quad \to \quad \hat{S}_y|y,-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|y,-\rangle$:

$$\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0.$$

Temos o sistema:

$$\begin{cases} b = -ia \\ |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad \text{(normalização)} \end{cases}, \tag{27}$$

onde a fase foi escolhida de modo que

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

e

$$b = -\frac{i}{\sqrt{2}}$$

Assim:

$$\boxed{|y,-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z,+\rangle - i|z,-\rangle) \to \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.} \tag{28}$$

De um cálculo direto temos,

$$\langle y,+|y,-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = 0,$$

mostrando que os autovetores obtidos são ortogonais.

(c) A transformação unitária que diagonaliza a matriz $S_y$ é representada por uma matriz cujas colunas são os autovetores obtidos no item anterior:

$$\boxed{U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}.} \tag{29}$$

(d) Utilizando a transformação unitária obtida acima podemos escrever as representações dos operadores $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ e $\hat{S}_z$ na base formada pelos autoestados de $\hat{S}_y$:

$$\boxed{U^\dagger S_x U = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_2,} \tag{30}$$

$$\boxed{U^\dagger S_y U = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_3} \tag{31}$$

e

$$\boxed{U^\dagger S_z U = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_1.} \tag{32}$$

É importante salientar que diferentes escolhas de fase podem nos conduzir a representações equivalentes dos observáveis. Devemos enfatizar que essas representações continuam satisfazendo as relações de comutação do spin. Por exemplo, com nossa escolha de fase as representações das componentes do spin na base formada pelos auto-estados de $\hat{S}_y$ são obtidas por uma permutação cíclica das matrizes de Pauli.

5. Considere um espaço de vetores de estado tridimensional. Na base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, os observáveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são representados pelas matrizes,

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}$$

e

$$B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix}.$$

(a) Observando diretamente a representação do operador $\hat{A}$ na base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ facilmente verificamos que o autovalor $-a$ é duplamente degenerado, ou seja, existem dois autovetores linearmente independentes, $|2\rangle$ e $|3\rangle$, associados a esse autovalor.

Para verificar se existe degenerescência no espectro de $\hat{B}$ devemos obter explicitamente os autovalores e autovetores. Note que a estrutura da matriz que representa o observável $\hat{B}$ na base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ já nos permite identificar um autovalor: $b$. Assim, nos resta apenas diagonalizar o bloco

$$\begin{pmatrix} 0 & -ib \\ ib & 0 \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

que possui a mesma estrutura da matriz tratada no exercício anterior. Assim, segue que o autovalor $b$ possui multiplicidade dois, ou seja, é duplamente degenerado. Os autovetores normalizados são:

$$|b, 1\rangle = |1\rangle,$$

$$|b, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + i|3\rangle)$$

e

$$|-b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - i|3\rangle)$$

(b) De fato $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são operadores compatíveis uma vez que suas representações são matrizes que comutam.

(c) Note que, como consequência desses observáveis serem compatíveis, os autoestados de $\hat{B}$ obtidos anteriormente também são autoestados de $\hat{A}$:

$$\hat{A}|b, 1\rangle = a|b, 1\rangle,$$

$$\hat{A}|b,2\rangle = -a|b,1\rangle$$

e

$$\hat{A}|-b\rangle = -a|b,1\rangle,$$

mostrando que

$$|a,b\rangle = |1\rangle,$$

$$|-a,b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + i|3\rangle)$$

e

$$|-a,-b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - i|3\rangle)$$

formam uma base de autovetores simultâneos de $\hat{A}$ e $\hat{B}$. Uma vez que as duplas de autovalores definem de maneira unívoca os autovetores simultâneos podemos dizer que os operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são um conjunto completo de observáveis que comutam.

(d) Se o sistema está no estado $|3\rangle$, a probabilidade de numa medida simultânea de $\hat{A}$ e $\hat{B}$, acharmos os valores $-a$ e $b$ é

$$\boxed{P(-a,b) = |\langle -a,b|3\rangle|^2 = \frac{1}{2} = 50\%.} \tag{33}$$

6. Dado o operador

$$\hat{B}(l) = \exp\frac{il\hat{x}}{\hbar}$$

e o estado

$$|\beta\rangle = \hat{B}(l)|\alpha\rangle. \tag{34}$$

(a) Queremos calcular $\phi_\beta(p) = \langle p|\beta\rangle$ dado $\phi_\alpha(p) = \langle p|\alpha\rangle$. De (34) facilmente verificamos que

$$\langle p|\beta\rangle = \langle p|\hat{B}(l)|\alpha\rangle = \int dx'\langle p|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle e^{\frac{ilx'}{\hbar}}.$$

Levando em conta que

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}},$$

podemos escrever

$$\langle p|\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx'\langle x'|\alpha\rangle e^{\frac{-i(p-l)x'}{\hbar}} = \int dx'\langle p-l|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \langle p-l|\alpha\rangle.$$

Portanto,

$$\boxed{\phi_\beta(p) = \phi_\alpha(p-l).} \tag{35}$$

(b) Mostre que

$$\langle\beta|\hat{p}|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle + l.$$

De (34) facilmente verificamos que

$$\langle\beta|\hat{p}|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{B}^\dagger(l)\hat{p}\hat{B}(l)|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle + \langle\alpha|\hat{B}^\dagger(l)[\hat{p},\hat{B}(l)]|\alpha\rangle,$$

onde utilizamos o fato que $\hat{p}\hat{B}(l) = \hat{B}(l)\hat{p} + [\hat{p},\hat{B}(l)]$. Levando em conta que:

$$[\hat{p},\hat{B}(l)] = l\hat{B}(l),$$

finalmente obtemos:

$$\boxed{\langle\beta|\hat{p}|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle + l.} \tag{36}$$

(c) O operador $\hat{B}$ está associado fisicamente a uma translação finita no espaço dos momentos e o operador $\hat{x}$ é o **gerador** dessas translações.