Dinâmica Quântica

Prof. Emerson Passos

14 de abril de 2010

Operador de Evolução Temporal

Vetor de estado no instante t está relacionado com o vetor de estado no instante t_0 pela ação do operador de evolução temporal, $\hat{U}(t, t_0)$,

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$$

com

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}.$$

O operador de evolução temporal deve satisfazer duas propriedades:

(i) $\hat{U}(t, t_0)$ é um operador unitário como consequência da convervação da probabilidade

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{1}.$$

Probabilidade de numa medida de um observável $\hat{A}$ acharmos o valor a_i, no instante inicial t_0,

$$p(a_i, t_0) = |\langle a_i|\alpha, t_0\rangle|^2.$$

A probabilidade de acharmos qualquer valor é:

$$\sum_i p(a_i, t_0) = \sum_i \langle \alpha, t_0 | a_i \rangle \langle a_i | \alpha, t_0 \rangle = \langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1,$$

pois a norma de $|\alpha, t_0\rangle$ é igual a 1.
Podemos fazer as mesmas perguntas no instante t,

$$p(a_i, t) = |\langle a_i | \alpha, t \rangle|^2$$

$$\sum_i p(a_i, t) = \sum_i \langle \alpha, t | a_i \rangle \langle a_i | \alpha, t \rangle = \langle \alpha, t | \alpha, t \rangle = 1.$$

Conservação da probabilidade impõe que o operador de evolução temporal seja um operador unitário, pois:

$$\langle \alpha, t | \alpha, t \rangle = \langle \alpha, t_0 | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) | \alpha, t_0 \rangle = 1$$

para qualquer estado $|\alpha, t_0\rangle$ de norma igual a 1, logo,

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{1}.$$

(ii) $\hat{U}(t, t_0)$ deve satisfazer a lei de composição,

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) \quad \text{com} \quad t_2 > t_1 > t_0.$$

Na Mecânica Clássica (MC) gerador dos deslocamentos no tempo é a *hamiltoniana* do sistema.
Na Mecânica Quântica (MQ) vamos supor que o gerador dos deslocamentos no tempo seja o *operador hamiltoniana*.
Consequentemente operador de evolução temporal infinitesimal dado por:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\delta t \hat{H}(t),$$

$\hat{H}(t)$ operador hamiltoniana do sistema.

(i) A unitariedade do operador de evolução temporal impõe que $\hat{H}$ seja um operador hermiteano,

$$\hat{U}^\dagger(t+\delta t, t)\hat{U}(t+\delta t, t) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}(\hat{H}(t) - \hat{H}^\dagger(t)) = \hat{1}.$$

Logo,

$$\hat{H}(t) = \hat{H}^\dagger(t).$$

(ii) Lei de composição automaticamente satisfeita.
Considere a evolução temporal entre $t \to t+\delta t_1 \to t+\delta t_2$ com $\delta t_2 > \delta t_1$. Pela lei de composição:

$$\hat{U}(t+\delta t_2, t) = \hat{U}(t+\delta t_2, t+\delta t_1)\hat{U}(t+\delta t_1, t).$$

Mas

$$\hat{U}(t+\delta t_2, t+\delta t_1)\hat{U}(t+\delta t_1, t) = \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar}(\delta t_2 - \delta t_1)\hat{H}(t)\right)\left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\delta t_1 \hat{H}(t)\right)$$
$$= \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\delta t_2 \hat{H}(t)\right) = \hat{U}(t+\delta t_2, t).$$

Equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal

Pela Lei de Composição:

$$\hat{U}(t+\Delta t, t_0) = \hat{U}(t+\Delta t, t)\hat{U}(t, t_0)$$

e

$$\frac{\hat{U}(t+\Delta t, t_0) - \hat{U}(t, t_0)}{\Delta t} = -\frac{(\hat{1} - \hat{U}(t+\Delta t, t))}{\Delta t}\hat{U}(t, t_0).$$

Tomando o limite $\Delta t \to 0$ deduzimos a equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal (TESE)

$$\boxed{i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt}(t, t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0),}$$

com a condição de contorno:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}.$$

Equação de Schrödinger dependente do tempo para o vetor de estado do sistema (TDSE)

Se o sistema está no estado $|\alpha\rangle$ no instante inicial t_0, o vetor de estado do sistema no instante t é:

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle, \qquad |\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle.$$

Derivando em relação ao tempo ambos membros e usando TESE deduzimos a equação de Schrödinger dependente do tempo para o vetor de estado do sistema

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t\rangle = \hat{H}(t)|\alpha, t\rangle.}$$

Solução da TESE

Três casos:

1) $\hat{H}$ independente do tempo
$\hat{U}(t, t_0)$ satisfaz a equação

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt}(t, t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0),$$

com a condição de contorno:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}.$$

Nesse caso

$$\boxed{\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right).}$$

Verificação:

- Satisfaz a condição de contorno $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$.
- Satisfaz a equação diferencial. Demonstração:

$$\hat{U}(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{(t-t_0)^n}{n!}\hat{H}^n.$$

Então

$$i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt}(t,t_0) = \hat{H}\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1} \frac{(t-t_0)^{n-1}}{(n-1)!}\hat{H}^{n-1} = \hat{H}\hat{U}(t,t_0).$$

2) $\hat{H}$ dependente do tempo mas a hamiltoniana em tempos diferentes comuta

$$[\hat{H}(t_1),\hat{H}(t_2)] = 0 \quad t_1 \neq t_2.$$

Nesse caso

$$\boxed{\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(t_1)dt_1\right).}$$

Verificação análoga ao caso anterior.

3) $\hat{H}$ dependente do tempo mas

$$[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \neq 0 \quad t_1 \neq t_2.$$

Nesse caso podemos expressar $\hat{U}(t, t_0)$ como uma série perturbativa em $\hat{H}(t)$. Primeiro passo equação integral para $\hat{U}(t, t_0)$

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \hat{H}(t_1)\hat{U}(t_1, t_0) dt_1.$$

Verificação: Mostra-se facilmente que satisfaz a condição de contorno e a equação diferencial.
Interando a equação integral, temos

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \hat{H}(t_1) dt_1$$

$$+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\hat{U}(t_2, t_0).$$

Continuando esse processo interativo deduzimos uma série perturbativa em potências de $\hat{H}(t)$ para $\hat{U}(t, t_0)$ denominada **série de Dyson**:

$$\boxed{\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \cdots \hat{H}(t_n).}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo. Autovalores e Autovetores da hamiltoniana. Estados estacionários e níveis de energia.

Hamiltoniana independente do tempo. Soluções da TDSE onde a dependência no tempo é uma fase:

$$|E, t\rangle = |E\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right).$$

$|E, t\rangle$ satisfaz a TDSE se $|E\rangle$ é um autovetor de $\hat{H}$ com autovalor E,

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

A equação de autovalores para o operador hamiltoniana é denominada **equação de Schrödinger independente do tempo**, TISE. Os autovetores são os *estados estacionários* e os autovalores os *níveis de energia* do sistema.

Estados estacionários na MQ correspondem aos estados de equilíbrio na MC.

Propriedades dos estados estacionários: Como a dependência no tempo é uma fase, probabilidades das medidas de um observável são independentes do tempo. Como estados estacionários satisfazem a TDSE, se o sistema está num estado estacionário ele aí permanece.

Estados não-estacionários. Solução geral da TDSE. Constantes do movimento.

Vetor de estado do sistema como combinação linear dos estados estacionários:

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_n |E_n\rangle\langle E_n|\alpha\rangle$$

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|\alpha, t_0\rangle, \quad |\alpha, t\rangle = \sum_n |E_n\rangle\langle E_n|\alpha\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}.$$

Expandimos o vetor de estado no instante inicial nos vetores da base formada pelos estados estacionários.

Num estado não-estacionário as propriedades do sistema mudam com o tempo, por exemplo, o valor médio das medidas de um observável $\hat{A}$ no instante t,

$$\langle\alpha, t|\hat{A}|\alpha, t\rangle = \sum_{n,m} \langle E_n|\alpha\rangle^\star\langle E_n|\hat{A}|E_m\rangle\langle E_m|\alpha\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)(t-t_0)}$$

oscila com frequências iguais a $\omega_{mn} = \frac{E_m-E_n}{\hbar}$.

Um caso particular ocorre quando o observável é compatível com a hamiltoniana, $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$. A probabilidade de numa medida de $\hat{A}$ acharmos um dado valor é independente do tempo.
Lembrando que $p(a_i, \alpha, t) = \langle \alpha, t | \hat{P}_{a_i} | \alpha, t \rangle$, é fácil mostrar que

$$\frac{dp}{dt}(a_i, \alpha, t) = \langle \alpha, t | [\hat{H}, \hat{P}_{a_i}] | \alpha, t \rangle.$$

Como consequência de $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ o subespaço dos autovetores degenerados de $\hat{A}$ é invariante pela ação de $\hat{H}$, logo $[\hat{H}, \hat{P}_{a_i}] = 0$, consequentemente a probabilidade é uma constante. Segue dessa propriedade que o valor médio das medidas de um observável compatível com $\hat{H}$ é independente do tempo:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, t | \hat{A} | \alpha, t \rangle &= \langle \alpha | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha, t_0 | \hat{A} | \alpha, t_0 \rangle + \langle \alpha, t_0 | [\hat{A}, \hat{U}(t, t_0)] | \alpha, t_0 \rangle, \end{aligned}$$

o último termo é nulo pois de $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ temos que $[\hat{A}, \hat{U}(t, t_0)]$.

Outra propriedade, se o estado inicial é um autovetor de $\hat{A}$ com autovalor a_i, o estado no instante t continua sendo um autovetor de $\hat{A}$ com o mesmo autovalor. Concluindo:

$$\boxed{\text{Observáveis compatíveis com } \hat{H} \text{ são } \textbf{constantes do movimento}.}$$

Descrição da Dinâmica

Na MQ existem diferentes modos de descrever a dinâmica quântica, equivalentes naturalmente:

- **Descrição de Schrödinger:** O modo que vimos até agora é a descrição de Schrödinger da dinâmica. Nessa descrição:
  i) Operadores, que não dependem explicitamente do tempo, não variam no tempo

$$\hat{X}^{(S)}(t) = \hat{X}^{(S)}(t_0) = \hat{X}.$$

  ii) Vetores de estado variam no tempo de acordo com a TDSE

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t\rangle_S = \hat{H}(t)|\alpha, t\rangle_S, \quad |\alpha, t\rangle_S = |\alpha, t\rangle.$$

  iii) Probabilidade de numa medida de um observável $\hat{A}$ no instante t acharmos o valor a_i é igual a

$$p(a_i, \alpha, t) = |\langle a_i|\alpha, t\rangle_S|^2 \quad \text{com} \quad \hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle.$$

- **Descrição de Heisenberg:** Considere o elemento de matriz de um operador $\hat{X}$, $\langle \beta, t | \hat{X} | \alpha, t \rangle$, que é igual a

$$\langle \beta, t | \hat{X} | \alpha, t \rangle = \langle \beta, t_0 | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{X} \hat{U}(t, t_0) | \alpha, t_0 \rangle.$$

No primeiro membro os vetores de estado variam no tempo e os operadores são constantes, de acordo com a descrição de Schrödinger. De um modo equivalente o segundo membro revela que podemos calcular esse elemento de matriz considerando que os vetores de estado não variam com o tempo, $|\alpha, t_0\rangle$, $|\beta, t_0\rangle$, e os operadores variam com o tempo como $\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{X} \hat{U}(t, t_0)$.
Essa é a descrição de Heinsenberg da dinâmica quântica, onde $\hat{X}^{(H)}(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{X} \hat{U}(t, t_0)$ é o operador $\hat{X}$ no instante t e $|\alpha\rangle_H = |\alpha, t_0\rangle$ é o vetor de estado nessa descrição.
Na descrição de Heisenberg os vetores de estado são fixos e os operadores variam no tempo. No instante inicial os operadores e vetores de estado nas duas descrições coincidem.

Equação de movimento de Heisenberg

Seja $\hat{X}^{(H)}(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{X}\hat{U}(t, t_0)$. Derivando em relação ao tempo:

$$i\hbar \frac{d\hat{X}^{(H)}}{dt}(t) = i\hbar \frac{d\hat{U}^\dagger}{dt}(t, t_0)\hat{X}\hat{U}(t, t_0) + i\hbar \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{X}\frac{d\hat{U}}{dt}(t, t_0).$$

Considerando a equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal, vemos que:

$$i\hbar \frac{d\hat{X}^{(H)}}{dt}(t) = -\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{H}(t)\hat{X}\hat{U}(t, t_0) + \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{X}\hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0),$$

que se reduz à **equação de movimento de Heisenberg** para o operador $\hat{X}^{(H)}(t)$

$$\boxed{i\hbar \frac{d\hat{X}^{(H)}}{dt}(t) = [\hat{X}^{(H)}(t), \hat{H}^{(H)}(t)],}$$

onde $\hat{H}^{(H)}(t)$, a hamiltoniana na descrição de Heisenmberg, é igual a

$$\hat{H}^{(H)}(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0).$$

Cálculo de probabilidades na descrição de Heisenberg

$$p(a_i, \alpha, t) = |\langle a_i|\alpha, t\rangle|^2 = |\langle \hat{A}^{(H)}(t), a_i|\alpha\rangle_H|^2$$

$$\langle a_i|\alpha, t\rangle = \langle a_i|\hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$$

onde $|\alpha\rangle_H = |\alpha, t_0\rangle$ é o vetor de estado na descrição de Heisenberg e $|\hat{A}^{(H)}(t), a_i\rangle$ é um autovetor de $\hat{A}^{(H)}(t)$ com autovalor a_i.
$\hat{A}^{(H)}(t)$ difere de $\hat{A}$ por uma transformação unitária,

$$\hat{A}^{(H)}(t) = \hat{U}^{\dagger}(t, t_0)\hat{A}\hat{U}(t, t_0).$$

Operadores que diferem por uma transformação unitária têm os mesmos autovalores e os autovetores estão relacionados pela transformação.
Demonstração: Seja $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$, que é igual à:

$$\hat{U}^{\dagger}(t, t_0)\hat{A}\hat{U}(t, t_0)\hat{U}^{\dagger}(t, t_0)|a_i\rangle = a_i\hat{U}^{\dagger}(t, t_0)|a_i\rangle$$

ou

$$\hat{A}^{(H)}(t)\hat{U}^{\dagger}(t, t_0)|a_i\rangle = a_i\hat{U}^{\dagger}(t, t_0)|a_i\rangle,$$

de onde concluímos que $|\hat{A}^{(H)}(t), a_i\rangle = \hat{U}^{\dagger}(t, t_0)|a_i\rangle$ é um autovetor de $\hat{A}^{(H)}(t)$ com autovalor a_i.

	Descrição de Schrödinger	**Descrição de Heisenberg**
Vetores de estado	Variam no tempo de acordo com TDSE $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\|\alpha,t\rangle_S = \hat{H}(t)\|\alpha,t\rangle_S$ com $\|\alpha,t_0\rangle_S = \|\alpha,t_0\rangle = \|\alpha\rangle.$	São fixos, $\|\alpha\rangle_H = \|\alpha,t_0\rangle = \|\alpha\rangle.$
Observáveis que não dependem explicitamente do tempo	Estacionários, $\hat{A}^{(S)}(t) = \hat{A}^{(S)}(t_0) = \hat{A}.$	Variam no tempo de acordo com a equação de movimento de Heisenberg $i\hbar\frac{\partial\hat{A}^{(H)}}{\partial t}(t) = [\hat{A}^{(H)}(t),\hat{H}^{(H)}(t)]$ onde $\hat{H}^{(H)}(t) = \hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$ com $\hat{A}^{(H)}(t_0) = \hat{A}.$
Probabilidade de numa medida de $\hat{A}$ no instante t acharmos o valor a_i	$\|\langle a_i\|\alpha,t\rangle_S\|^2$ onde $\hat{A}\|a_i\rangle = a_i\|a_i\rangle.$	$\|\langle\hat{A}^{(H)}(t),a_i\|\alpha\rangle_H\|^2$ onde $\hat{A}^{(H)}(t)\|\hat{A}^{(H)}(t),a_i\rangle = a_i\|\hat{A}^{(H)}(t),a_i\rangle.$

Princípio da incerteza *energia* $\times$ *tempo*

$\hat{A}$ observável compatível com $\hat{H}$, $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$. Valor médio e dispersão das medida de $\hat{A}$, no instante t, independentes do tempo.
Demonstração: Vetor de estado no instante t se $|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle$ é o vetor de estado no instante inicial,

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha\rangle, \qquad \hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right).$$

Valor médio das medidas de $\hat{A}$ no instante t:

$$\langle\alpha, t|\hat{A}|\alpha, t\rangle = \langle\alpha|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}\hat{U}(t, t_0)|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle.$$

Dispersão das medidas de $\hat{A}$ no instante t:

$$\langle\alpha, t|\hat{A}^2|\alpha, t\rangle = \langle\alpha|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}^2\hat{U}(t, t_0)|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{A}^2|\alpha\rangle$$

$$\langle\alpha, t|\hat{A}^2|\alpha, t\rangle - \langle\alpha, t|\hat{A}|\alpha, t\rangle^2 = \langle\alpha|\hat{A}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle^2,$$

pois, se $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ então $\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}\hat{U}(t, t_0) = \hat{A}$.
Conclusão: Observáveis compatíveis com $\hat{H}$ são constantes do movimento, $\hat{A}^{(H)}(t) = \hat{A}$.

Se $\hat{A}$ não é compatível com $\hat{H}$, o princípio da incerteza para os observáveis $\hat{A}$ e $\hat{H}$ e o estado identificado com o vetor de estado do sistema no instante t, $|\alpha, t\rangle$, fica igual à,

$$\sigma_A^2(t)\sigma_H^2(t) \geq \frac{1}{4}|\langle\alpha, t|[\hat{A}, \hat{H}]|\alpha, t\rangle|^2,$$

onde a dispersão e o valor médio das medidas de $\hat{H}$ são independentes do tempo.
Como pela equação de Heisenberg,

$$\begin{aligned}
\langle\alpha, t|[\hat{A}, \hat{H}]|\alpha, t\rangle &= \langle\alpha, t_0|[\hat{A}^{(H)}(t), \hat{H}]|\alpha, t_0\rangle = i\hbar\langle\alpha, t_0|\frac{d\hat{A}(t)}{dt}|\alpha, t_0\rangle \\
&= i\hbar\frac{d}{dt}\langle\alpha, t|\hat{A}|\alpha, t\rangle,
\end{aligned}$$

podemos expressar o princípio da incerteza como

$$\boxed{\sigma_H^2\tau_A^2 \geq \frac{\hbar^2}{4},}$$

onde introduzimos um *tempo característico* de variação do observável $\hat{A}$, se o sistema está no estado $|\alpha, t\rangle$,

$$\boxed{\tau_A = \frac{\sigma_A(t)}{\left|\frac{d}{dt}\langle\alpha, t|\hat{A}|\alpha, t\rangle\right|}.}$$

Observe que se $|\alpha, t\rangle \longrightarrow$ estado estacionário, $\tau_A \to \infty$.

Hamiltoniana de uma partícula livre

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}.$$

Equações de movimento de Heisenberg para os operadores $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{p}}$

$$i\hbar \frac{d\hat{x}_j}{dt}(t) = [\hat{x}_j(t), \hat{H}] \qquad i\hbar \frac{d\hat{p}_j}{dt}(t) = [\hat{p}_j(t), \hat{H}].$$

Propriedade: Na descrição de Heisenberg as relações de comutação para tempos iguais são invariantes, isto é, se

$$[\hat{A}(t_0), \hat{B}(t_0)] = \hat{C}(t_0) \longrightarrow [\hat{A}(t), \hat{B}(t)] = \hat{C}(t),$$

consequência imediata do fato dos operadores na descrição de Heisenberg nos instantes t_0 e t estarem relacionados por uma transformação unitária.

Para resolver as equações de Heisenberg: Como $\hat{H}$ é independente do tempo vamos tomá-lo no instante t. Lembrando das relações de comutação canônicas as equações de Heisenberg ficam iguais à

$$i\hbar \frac{d\hat{p}_j}{dt}(t) = 0 \qquad \frac{d\hat{x}_j}{dt}(t) = \frac{\hat{p}_j(t)}{m},$$

com a condição inicial $\hat{x}_j(0) = \hat{x}_j$ e $\hat{p}_j(0) = \hat{p}_j$.

A primeira equação revela que $\hat{p}_j(t)$ é uma constante do movimento,

$$\boxed{\hat{p}_j(t) = \hat{p}_j.}$$

Por outro lado, a equação de Heisenberg para o operador posição fica

$$i\hbar \frac{d\hat{x}_j}{dt}(t) = \left[\hat{x}_j(t), \sum_k \frac{\hat{p}_k^2}{2m}\right].$$

De $[\hat{x}_j, \hat{G}(\hat{\mathbf{p}})] = i\hbar \frac{\partial \hat{G}}{\partial p_j}(\hat{\mathbf{p}})$ chegamos

$$\frac{d\hat{x}_j}{dt}(t) = \frac{\hat{p}_j(t)}{m}.$$

Como $\hat{p}_j(t) = \hat{p}_j$ não depende do tempo resolvemos facilmente a equação de movimento de Heisenberg e impondo as condições iniciais determinamos $\hat{x}_j(t)$:

$$\boxed{\hat{x}_j(t) = \hat{x}_j + \frac{\hat{p}_j}{m} t.}$$

Note que as expressões para $\hat{\mathbf{x}}(t)$ e $\hat{\mathbf{p}}(t)$ tem a mesma forma das equações clássicas.

Comutador invariante somente em tempos iguais. Exemplo: $[\hat{x}_j(t), \hat{x}_k(t)] = 0$ mas $[\hat{x}_j(t), \hat{x}_k(0)]$ não se anula, pois

$$[\hat{x}_j(t), \hat{x}_k(0)] = \left[\hat{x}_j + \frac{\hat{p}_j}{m} t, \hat{x}_k\right] = -i\frac{\hbar t}{m}\delta_{jk}.$$

Dispersão das medidas da posição no instante t, sistema no estado $|\alpha, t\rangle$:

$$\begin{aligned} \sigma_{x_j}^2(t) &= \langle\alpha, t|\hat{x}_j^2|\alpha, t\rangle - \langle\alpha, t|\hat{x}_j|\alpha, t\rangle^2 \\ &= \langle\alpha, 0|\hat{x}_j^2(t)|\alpha, 0\rangle - \langle\alpha, 0|\hat{x}_j(t)|\alpha, 0\rangle^2. \end{aligned}$$

Princípio da incerteza para $\hat{x}_j(t)$ e $\hat{x}_j$:

$$\sigma_{x_j}^2(t)\sigma_{x_j}^2(0) \geq \frac{1}{4}|\langle\alpha, 0|[\hat{x}_j(t), \hat{x}_j]|\alpha, 0\rangle|^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}\frac{t^2}{m^2}$$

ou

$$\sigma_{x_j}(t)\sigma_{x_j}(0) \geq \frac{\hbar}{2}\frac{t}{m}.$$

Conclusão: O desvio padrão sempre cresce com o tempo, velocidade inversamente proporcional ao desvio padrão no instante inicial.

Teorema de Ehrenfest

Partícula sob a ação de uma força cuja energia potencial é igual a $V(\mathbf{x})$. Operador hamiltoniana,

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}).$$

Equações de movimento de Heisenberg para os operadores de posição e momento:

$$\frac{d\hat{p}_j}{dt}(t) = -\frac{\partial V}{\partial x_j}(\hat{\mathbf{x}}(t)) \qquad \frac{d\hat{x}_j}{dt}(t) = \frac{\hat{p}_j(t)}{m}.$$

Dessas equações deduzimos que

$$m\frac{d^2\hat{x}_j}{dt^2}(t) = -\frac{\partial V}{\partial x_j}(\hat{\mathbf{x}}(t)).$$

Mesma forma das equações clássicas. Tomando valor médio no estado inicial, $|\alpha\rangle$, temos que:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\alpha|\hat{\mathbf{x}}(t)|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\nabla V(\hat{\mathbf{x}}(t))|\alpha\rangle.$$

Teorema (Ehrenfest)

Valor médio das medidas da posição se move como uma partícula clássica sob a ação "força" $-\langle\alpha|\nabla V(\hat{\mathbf{x}}(t))|\alpha\rangle$. *Note que essa força, em geral, difere da força clássica,*

$$\langle\alpha|\nabla V(\hat{\mathbf{x}}(t))|\alpha\rangle \neq \nabla V(\langle\alpha|\hat{\mathbf{x}}(t)|\alpha\rangle).$$

Exemplo simples da Dinâmica Quântica: o oscilador harmônico.

Determinar os autovetores e autovalores pelo **método algébrico**.
Hamiltoniana do oscilador harmônico unidimensional:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2,$$

onde ω é a frequência angular do oscilador. Definimos dois operadores *não-hermiteanos*:

$$\boxed{\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{a_0} + i \frac{\hat{p}}{\hbar} a_0 \right), \qquad \hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{a_0} - i \frac{\hat{p}}{\hbar} a_0 \right),}$$

onde a_0 o comprimento do oscilador, $a_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega_0}$. Das relações de comutação canônicas, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, mostra-se que

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

É fácil mostrar que:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{p}^2\frac{a_0^2}{\hbar^2} + \frac{\hat{x}^2}{a_0}\right).$$

Invertendo a equação que define os operadores $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$ determinamos expressões dos operadores posição e momento em função de $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$, e mostrar que,

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)}$$

com $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$.

Autovalores de $\hat{H}$. Significado físico de $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{N}$

Considere os auto-estados e autovalores de $\hat{N}$,

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle.$$

Note que

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \qquad [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}.$$

Então

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{N})|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle,$$
$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a}\hat{N})|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle.$$

Se $|n\rangle$ é um autovetor de $\hat{N}$ com autovalor n, $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ é um autovetor de $\hat{N}$ com autovalor $n+1$ e $\hat{a}|n\rangle$ um autovetor de $\hat{N}$ com autovalor $n-1$. Se n não é inteiro a sucessiva aplicação de $\hat{a}$ levaria a um estado com n negativo o que não é possível pois n é o quadrado da norma do estado $\hat{a}|n\rangle$:

$$||\hat{a}|n\rangle||^2 = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n.$$

Como isto não pode acontecer, n deve ser um inteiro não-negativo $n = 0, 1, 2, \ldots$ tal que

$$\hat{a}|0\rangle = 0.$$

Interpretação física: $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ é o operador número de "quanta" e $\hat{a}^\dagger(\hat{a})$ operadores que criam (destroem) um quanta de oscilador. Autovetores de $\hat{H}$ = autovetores do operador número de autovalor n,

$$\boxed{\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle.}$$

Estado fundamental do oscilador = estado que não tem "quanta", $n = 0$

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle,$$

com $\hat{a}|0\rangle = 0$.

Resumindo, os autovetores da hamiltoniana são rotulados pelo número de quanta, $|n\rangle$, e os níveis de energia dados por $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

Função de onda dos estados estacionários

Estados excitados $(n \neq 0)$ dados pela ação sucessiva do operador de criação de quanta no estado fundamental.
Ponto de partida é a relação $|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$, que mostra o seguinte:

$$|1\rangle = \hat{a}^{\dagger}|0\rangle, |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^{\dagger}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^{\dagger 2}|0\rangle, |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^{\dagger}|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3\cdot 2}}\hat{a}^{\dagger 3}|0\rangle, \cdots,$$

e, por indução, vemos que

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^{\dagger}|0\rangle.}$$

Para determinar a função de onda dos estados estacionários, vamos primeiro calcular a função de onda do estado fundamental que é definido pela equação $\hat{a}|0\rangle = 0$. Escrevendo essa equação no espaço das posições, $\langle x'|\hat{a}|0\rangle = 0$, deduzimos a equação diferencial que é satisfeita pela função de onda do estado fundamental $\langle x'|0\rangle = \psi_0(x')$,

$$\left(x' + a_0^2 \frac{d}{dx'}\right) \psi_0(x') = 0,$$

cuja solução normalizada é igual a:

$$\psi_0(x') = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} a_0}} e^{-\frac{x'^2}{2a_0^2}}.$$

Na dedução acima usamos que a ação no espaço das posições dos operadores de criação e destruição de quanta de oscilador é igual a:

$$\langle x'|\hat{a}|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x'}{a_0} + a_0 \frac{d}{dx'}\right) \langle x'|\alpha\rangle, \quad \langle x'|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x'}{a_0} - a_0 \frac{d}{dx'}\right) \langle x'|\alpha\rangle.$$

Dada a expressão, $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle$ e a ação de $\hat{a}^{\dagger}$ no espaço das posições, mostra-se facilmente que a função de onda dos estados excitados é dada por:

$$\psi_n(x') = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\left(\frac{x'}{a_0} - a_0\frac{d}{dx'}\right)^n \psi_0(x').$$

Exercício: Calcule pelo método algébrico os valores médios de $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{x}^2$ e $\hat{p}^2$ nos estados estacionários.

Do exercício podemos calcular a dispersão das medidas de posição e momento se o sistema está no estado estacionário com n "quanta". Em especial, o produto das dispersões é igual a:

$$\sigma_x^{(n)2}\sigma_p^{(n)2} = \hbar^2\left(n + \frac{1}{2}\right)^2.$$

Concluímos então que o estado fundamental do oscilador é um estado de incerteza mínima com respeito as medidas de posição e momento.

Descrição de Heisenberg da dinâmica do oscilador harmônico

Equação de movimento de Heisenberg para o operador de destruição de "quanta" $\hat{a}$:

$$i\hbar \frac{d\hat{a}}{dt}(t) = [\hat{a}(t), \hat{H}], \quad \text{onde} \quad \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right),$$

com a condição inicial

$$\hat{a}(0) = \hat{a}.$$

Na solução da equação de movimento de Heisenberg é essencial que envolva somente o cálculo de comutadores em tempos iguais. No nosso caso isto é possível pela independência no tempo de $\hat{H}$, $\hat{H} = \hat{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{d\hat{a}}{dt}(t) = [\hat{a}(t), \hat{H}] = \left[\hat{a}(t), \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) + \frac{1}{2}\right)\right],$$

que se reduz a

$$\frac{d\hat{a}}{dt}(t) = -i\omega\hat{a}(t),$$

cuja solução satisfazendo a condição inicial é,

$$\hat{a}(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}.$$

Naturalmente, usando as expressões de $\hat{x}$ e $\hat{p}$ em termos dos operadores $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$,

$$\hat{x} = \frac{a_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{a_0}\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}),$$

determinamos $\hat{x}(t)$ e $\hat{p}(t)$:

$$\hat{x}(t) = \hat{x}\cos\omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega}\sin\omega t, \quad \hat{p}(t) = -m\omega\hat{x}\sin\omega t + \hat{p}\cos\omega t.$$

Note que essas equações são idênticas as equações clássicas de movimento ($\hbar$ não aparece nas equações quânticas). Naturalmente, de um modo equivalente, podemos determinar $\hat{x}$ e $\hat{p}$ resolvendo as equações de Heisenberg para esses operadores.

Dinâmica na descrição de Schrödinger. TDSE para o vetor de estado $|\alpha, t\rangle$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t\rangle = \hat{H}|\alpha, t\rangle,$$

onde no instante inicial t_0, $|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle$.
Escrevendo a TDSE no espaço das posições determinamos a TDSE para a função de onda do vetor de estado do sistema, $\langle \mathbf{x}'|\alpha, t\rangle$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{x}'|\alpha, t\rangle = \langle \mathbf{x}'|\hat{H}|\alpha, t\rangle = \int d^3x'' \langle \mathbf{x}'|\hat{H}|\mathbf{x}''\rangle\langle \mathbf{x}''|\alpha, t\rangle.$$

Caso a hamiltoniana seja igual a, $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}})$, temos que

$$\langle \mathbf{x}'|\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}|\alpha, t\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2\langle \mathbf{x}'|\alpha, t\rangle \;\; \text{e} \;\; \langle \mathbf{x}'|V(\hat{\mathbf{x}})|\alpha, t\rangle = V(\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|\alpha, t\rangle$$

e a TDSE para a função de onda do vetor de estado do sistema se reduz à

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t}(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2\psi_\alpha(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}')\psi_\alpha(\mathbf{x}', t).}$$

Se o sistema está num estado estacionário, $|E, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}|E\rangle$ sua função de onda, $\langle \mathbf{x}'|E\rangle = \psi_E(\mathbf{x}')$ é determinada pela TISE para a função de onda do estado estacionário

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2\psi_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}')\psi_E(\mathbf{x}') = E\psi_E(\mathbf{x}').}$$

Se o sistema clássico análogo é limitado,

$$\lim_{|\mathbf{x}'|\to\infty} V(\mathbf{x}') > E,$$

devemos impor a condição de contorno

$$\lim_{|\mathbf{x}'|\to\infty} \psi_E(\mathbf{x}') = 0,$$

pois a partícula está espacialmente confinada. Esta imposição é satisfeita para valores discretos da energia, implicando na quantização dos níveis de energia.

Interpretação física da função de onda

$\rho(\mathbf{x}', t) = |\psi_\alpha(\mathbf{x}', t)|^2$ é a densidade de probabilidade de achar a partícula no ponto $\mathbf{x}'$.

Equação de continuidade para a densidade de probabilidade

A TDSE para a função de onda do vetor de estado do sistema

$$i\hbar \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t}(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 \psi_\alpha(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}')\psi_\alpha(\mathbf{x}', t)$$

e sua complexa conjugada

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_\alpha^\star}{\partial t}(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 \psi_\alpha^\star(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}')\psi_\alpha^\star(\mathbf{x}', t)$$

pois $V(\mathbf{x}')$ é real, $V(\hat{\mathbf{x}})$ sendo um operador hermiteano. Multiplicando a primeira por $\psi_\alpha^\star(\mathbf{x}', t)$, a segunda por $\psi_\alpha(\mathbf{x}', t)$ e tomando a diferença vemos que

$$i\hbar\left(\psi_\alpha^\star(\mathbf{x}',t)\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t}(\mathbf{x}',t)+\frac{\partial\psi_\alpha^\star}{\partial t}(\mathbf{x}',t)\psi_\alpha(\mathbf{x}',t)\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_\alpha^\star(\mathbf{x}',t)\nabla'^2\psi_\alpha(\mathbf{x}',t)-\psi_\alpha(\mathbf{x}',t)\nabla'^2\psi_\alpha^\star(\mathbf{x}',t))$$

que é igual a

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi_\alpha^\star(\mathbf{x}',t)\psi_\alpha(\mathbf{x}',t))+\frac{i\hbar}{2m}\nabla'\cdot(\psi_\alpha^\star(\mathbf{x}',t)\nabla'\psi_\alpha(\mathbf{x}',t)-\psi_\alpha(\mathbf{x}',t)\nabla'\psi_\alpha^\star(\mathbf{x}',t))=0.$$

Essa equação tem a forma de uma *equação de continuidade*:

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{j}=0}$$

com a densidade de corrente de probabilidade **j** definida como

$$\boxed{\mathbf{j}(\mathbf{x}',t)=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\ \psi_\alpha^\star(\mathbf{x}',t)\nabla'\psi_\alpha(\mathbf{x}',t).}$$

Relação da densidade de corrente de probabilidade com a fase da função de onda

A função de onda é um número complexo e pode ser escrito como o produto de uma amplitude e uma fase, $\psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}, t)e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x},t)}$. A amplitude está relacionada com a densidade de probabilidade,

$$\rho(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}, t)^2.$$

Vamos mostrar que a densidade de corrente está relacionada com a fase da função de onda. De fato, como

$$\nabla\psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x},t)}\left(\nabla A(\mathbf{x}, t) + \frac{i}{\hbar}A(\mathbf{x}, t)\nabla S(\mathbf{x}, t)\right).$$

$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ fica igual a,

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t), \qquad \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{\nabla S(\mathbf{x}, t)}{m},$$

$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ é o campo de velocidades, $\mathbf{j}$ sendo perpendicular as superfícies de fase constante.

Limite clássico da TDSE para a função de onda

Usando a decomposição da função de onda no produto de uma amplitude e uma fase, $\psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}, t)e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x},t)}$, na TDSE para $\psi_\alpha(\mathbf{x}, t)$, separando as componentes reais e puramente imaginárias, deduzimos duas equações em termos desas componentes, naturalmente equivalente à TDSE:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + A\frac{\nabla^2 S}{2m} + \frac{\nabla A \cdot \nabla S}{m} = 0$$

$$A\frac{\partial S}{\partial t} + A\frac{(\nabla S)^2}{2m} + AV(\mathbf{x}) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 A = 0.$$

Multiplicando a primeira por A e dividindo a segunda por A as equações são da forma:

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \nabla \cdot A^2\frac{\nabla S}{m} = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\mathbf{x}) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 A}{A} = 0.$$

A primeira é a equação da continuidade e se desprezarmos o último termo a segunda equação se reduz a equação de Hamilton-Jacobi para a função principal de Hamilton, $S(\mathbf{x}, t)$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\mathbf{x}) = 0.$$

No caso de estados estacionários a dependência no tempo é uma fase, $S(\mathbf{x}, t) = W(\mathbf{x}) - Et$ e a equação de Hamilton-Jacobi para $S(\mathbf{x}, t)$ se reduz à equação de Hamilton-Jacobi para a função característica de Hamilton, $W(\mathbf{x})$,

$$\frac{\nabla W^2}{2m} + V(\mathbf{x}) = E.$$

O momento clássico é igual a $\mathbf{p}_c = \nabla W$, consequentemente as trajetórias clássicas são perpendiculares à superfície $S(\mathbf{x}, t) = \mathrm{constante}$. Essas superfícies podem ser interpretadas como **frentes de onda** e as trajetórias clássicas como **raios** da ótica geométrica.