

7 - Operador Evolução Temporal

- Casos em que a Hamiltoniana depende do Tempo

Como vimos na aula anterior podemos representar o Operador de Evolução Temporal através da Equação de Schrödinger como:

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H U(t, t_0)$$

No caso que $H = H(t)$ e as Hamiltonianas em diferentes instantes de tempo comutam entre si

$$U(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right]$$

Caso contrário, se $H = H(t)$, mas as Hamiltonianas em diferentes instantes de tempo não comutam entre si podemos expandir o operador sendo que:

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots$$

No caso de operadores temos a série de Dyson

$$U(t, t_0) = 1 + \frac{(-i)}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 + \frac{(-i)^2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} H(t_1) H(t_2) dt_2 + \dots$$

$$+ \dots + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n) dt_n$$

$$= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n) dt_n$$

7.1 - Representação de Schrödinger e Heisenberg

A representação em que o operador de Evolução Temporal:

$$U(t, t_0) = e^{-i \frac{H}{\hbar} (t - t_0)}$$

Altera os Kets

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi_0\rangle$$

é conhecida como representação de Schrödinger

A representação em que os observáveis variam no tempo

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

é a conhecida representação de Heisenberg;

Onde

$$A^{(H)}(0) = A^{(S)}$$

A equação de movimento nessa representação será:

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A^{(H)}, H]$$

Equação de Heisenberg

- Auto estados de energia

Consideremos uma grandeza física qualquer A e que o Hamiltoniano não depende do tempo.

$$A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$$

$$\text{se } [A, H] = 0 \Rightarrow H|a_i\rangle = E_i|a_i\rangle$$

Nesse caso podemos fazer:

$$\begin{aligned} U &= e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \mathbb{1} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \mathbb{1} \\ &= \sum_{i,j} |a_j\rangle \langle a_j| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |a_i\rangle \langle a_i| \\ &= \sum_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} |a_i\rangle \langle a_i| \end{aligned}$$

Logo:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi_0\rangle$$

Na base $|a_i\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \underbrace{\langle a_i | \Psi_0 \rangle}_{C_i} |a_i\rangle$$

Suponhamos que $|\Psi_0\rangle = |a_j\rangle$

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \underbrace{\langle a_i | a_j \rangle}_{\delta_{ij}} |a_i\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} |a_j\rangle \end{aligned}$$

fase global!

Ou seja, se $|\Psi\rangle$ é auto estado puro de energia, ele não vai mudar no tempo, isso significa que ele é um estado estacionário!

Consideremos um estado que não seja puro p/ Energia²

$$|\psi_0\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = U(A, t_0) |\psi_0\rangle = \sum_i c_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} |a_i\rangle$$

Qual deve ser a evolução temporal dos valores esperados de uma grandeza B?

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_{(t)} &= \langle \psi(t) | B | \psi(t) \rangle \\ &= \sum_{i,j} c_j^* c_i \langle a_j | B | a_i \rangle e^{-i \frac{(E_j - E_i)}{\hbar} t} \end{aligned}$$

$\omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{\hbar}$ são as frequências de Bohr

Se $|\psi_0\rangle$ é um estado puro: $\langle B \rangle_{(t)} = \langle B \rangle_{(0)}$

Amplitude de correlação e princípio de Incerteza Energia Tempo

Nesse contexto dinâmico, surge a necessidade de entendermos como estados quânticos em diferentes tempos estão relacionados. Para isso definimos a amplitude de correlação.

$$\begin{aligned} C(t) &= \langle \psi | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi | U_{(t,t_0)} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Onde o módulo de $C(t)$ quantifica a similaridade entre dois autoestados, em tempos diferentes. Se $|\psi\rangle$ é autoestado de Energia:

$$C(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \Rightarrow |C(t)| = 1$$

O estado não será mudado com o passar do tempo

De maneira geral temos

$$C(t) = \left[\sum_j C_j^* \langle a_j | \right] \left[\sum_i C_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} | a_i \rangle \right]$$
$$= \sum_i |C_i|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t}$$

Temos então uma dependência oscilante no tempo para diferentes frequências

De maneira mais concreta, vamos considerar uma superposição de muitos autoestados de energia que nos permita passar para o espectro contínuo

$$\sum_i \rightarrow \int dE \rho(E); \quad C_i \rightarrow f(E)$$

$$C(t) = \int |f(E)|^2 \rho(E) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dE$$

Respeitando a condição de normalização

$$\int |f(E)|^2 \rho(E) dE = 1$$

Podemos então escrever

$$C(t) = \int |f(E)|^2 \rho(E) e^{-\frac{i}{\hbar} (E - E_0 + E_0) t} dE$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \int |f(E)|^2 \rho(E) e^{-\frac{i}{\hbar} (E - E_0) t} dE$$

Esse caso é mais realista, uma vez que $|f(E)|^2 \rho(E)$ são definidas no intervalo $E \pm \Delta E$ centralizado em E_0 .

Nesse caso se o tempo se torna muito grande o integrando muda rapidamente a menos que $E - E_0$ seja pequeno o suficiente comparado a $\frac{\hbar}{t}$. Nesse caso a amplitude de correlação só vai apresentar valores diferentes de 1 a partir de

$$t \sim \frac{\hbar}{\Delta E} \sim \frac{6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}}{\Delta E} \sim \frac{6,6 \cdot 10^{-16} \text{ eV}}{\Delta E}$$

Ou seja a evolução temporal de um estado quântico tende a acabar após um intervalo de tempo da ordem de $\frac{\hbar}{\Delta E}$. A esse fenômeno alguns livros texto chamam de princípio de incerteza energia-tempo. Vejamos agora porque essa definição é equivocada. Pelo princípio de incerteza:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

Se $A = H$ e $B = Q$

$$\begin{aligned} \langle (\Delta H)^2 \rangle \langle (\Delta Q)^2 \rangle &\geq \frac{1}{4} |\langle [H, Q] \rangle|^2 \\ &\geq \frac{\hbar^2}{4} \left| \left\langle \frac{dQ}{dt} \right\rangle \right|^2 \end{aligned}$$

Fazendo $\Delta E = \sqrt{\langle (\Delta H)^2 \rangle}$

$$\Delta t = \sqrt{\frac{\langle (\Delta Q)^2 \rangle}{\left| \left\langle \frac{dQ}{dt} \right\rangle \right|^2}}$$

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}; \text{ Isso é fisicamente inviável,}$$

Pois pequenos intervalos de tempo violariam a conservação da energia!

- Teorema de Ehrenfest

Seja a média da posição:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{x} |\langle x | \psi \rangle|^2 dx$$

Para uma partícula no estado $|\psi\rangle$. Onde a média é feita sobre um **ensemble** de partículas. Todas preparadas num mesmo estado $|\psi\rangle$ num instante t . Nesse caso, a medida que o tempo muda, considerando a dependência temporal de $|\psi\rangle$, a média $\langle x \rangle$ também irá mudar com o tempo.

Uma maneira interessante de calcularmos a evolução temporal do valor esperado da posição é através da **representação de Heisenberg**.

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, H] \rangle$$

Considerando que H não depende do tempo

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

Assim:

$$[\hat{x}, H] = \frac{1}{2m} [\hat{x}, \hat{p}^2] + U(x) [\hat{x}, 1]$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] \rangle = \frac{1}{2mi\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{p}] \frac{d\hat{p}^2}{d\hat{p}} \rangle \\ &= \frac{1}{2mi\hbar} \langle i\hbar \frac{d\hat{p}}{d\hat{p}} \rangle \end{aligned}$$

Portanto:

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$$

Esse resultado está completamente de acordo com a equação clássica para o momento linear.

Dessa maneira, podemos calcular a evolução Temporal do valor esperado do momento:

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, H] \rangle$$

$$[\hat{p}, H] = [\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] + [\hat{p}, U(x)]$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} (-i\hbar) \left[\frac{\partial}{\partial x}, U(x) \right]$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle - \frac{\partial U(x)}{\partial x} \right\rangle$$

Podemos reconhecer essa relação como a 2ª Lei de Newton da mecânica Clássica. Esse é o conhecido Teorema de Ehrenfest, que nos diz que a dinâmica dos valores esperados na mecânica quântica deve obedecer as leis Clássicas da mecânica.