Equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal

Encontramos a forma infinitesimal para o operator de evolução temporal

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{iHdt}{\hbar}$$

Vimos que o operador de evolução temporal satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0), \qquad \text{com} \ \lim_{t\to t_0} U(t,t_0) = 1$$

Achamos também a equação de Schrödinger para o ket $|\alpha, t_0; t\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0; t\rangle = H|\alpha, t_0; t\rangle$$

mas como $U(t,t_0)|\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0; t\rangle$, basta resolver a equação para operador de evolução temporal que teremos o futuro do ket. Dividiremos o problema em 3 casos:

1) $H(t) = H$ (Hamiltoniana não depende do tempo)

2) $[H(t), H(t')] = 0 \ \forall \ \ t$ e t' (Hamiltoniana depende do tempo, mas os H's comutam em instantes diferentes)

3) $[H(t), H(t')] \neq 0$ para $t \neq t'$ (Hamiltoniana depende do tempo, mas os H's não comutam em instantes diferentes)

O operador de evolução temporal

1º Caso: $H(t) = H$ *(Hamiltoniana não depende do tempo)*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0) \rightarrow \boxed{U(t,t_0) = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]}$$

Para provar isso, substitua na equação de Schrödinger, a expansão:

$$\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] = 1 + \left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] + \frac{1}{2!}\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]^2 + \ldots$$

isso permite encontrar

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = i\hbar\left(\left[\frac{-iH}{\hbar}\right] + \frac{1}{2!}\left[\frac{-H^2 2(t-t_0)}{\hbar^2}\right] + \ldots\right) =$$

$$= H\left(1 + \left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] + \ldots\right) = HU(t,t_0)$$

note que a solução respeita a condição de contorno $\lim_{t\rightarrow t_0} U(t,t_0) = 1$

Uma outra forma de fazer isso é tomar um número infinito de evoluções temporais infinitesimais:

$$\lim_{N\rightarrow\infty}\left[1 - \frac{(iH/\hbar)(t-t_0)}{N}\right]^N = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]$$

O operador de evolução temporal

$2^{\underline{o}}$ Caso: $[H(t), H(t')] = 0 \; \forall \;\; t$ e t' (Hamiltoniana depende do tempo, mas os H's comutam em instantes diferentes). A solução proposta é:

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

que pode ser verificada pela estratégia de expansão, como no primeiro caso. Um exemplo interessante é de uma partícula com spin em um campo magnético fixo em uma direção, mas variável no tempo em intensidade Para perceber que a forma de solução proposta tem sentido, resolva a equação para a função $w(t)$

$$i\hbar\frac{dw}{dt} = h(t)w(t) \rightarrow \frac{dw}{w} = \frac{-ih(t)dt}{\hbar} \rightarrow \int_{w(t0)}^{w(t)} \frac{dw}{w} = \int_{t_0}^{t} \frac{-ih(t)dt}{\hbar}$$

$$\ln w(t)|_{w(t_0)}^{w(t)} = (\frac{-i}{\hbar})\int_{t_0}^{t} h(t')dt' \rightarrow \ln w(t) - \ln w(t_0) = (\frac{-i}{\hbar})\int_{t_0}^{t} h(t')dt'$$

e encontre a forma proposta $w(t) = \exp\left[(\frac{-i}{\hbar})\int_{t_0}^{t} h(t')dt'\right]$, pois $w(t_0) = 1$

O operador de evolução temporal

A importância da relação de comutação de H's em instantes diferentes, vem da propriedade $U(t_2,t_1)U(t_1,t_0)=U(t_2,t_0)$ que pode ser escrita por

$$\exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_1}^{t_2} dt' H(t')\right]\exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t_1} dt' H(t')\right]=\exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t_2} dt' H(t')\right]$$

Note que isso só é verdade se $\exp(A)\exp(B)=\exp(A+B)$, e isso exige $[A,B]=0$ (mostre isso, usando a expansão da exponencial em ambos os lados)

3º Caso: $[H(t),H(t')]\neq 0$ para $t\neq t'$ (Hamiltoniana depende do tempo, mas os H's não comutam em instantes diferentes). A solução formal é:

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

Um exemplo interessante é de uma partícula com spin em um campo magnético variável no tempo em sua direção e em intensidade.

Mostre que caso 3 respeita casos 1 e 2. Em FI001 teremos basicamente Hamiltonianas que não dependem do tempo (como no caso 1).

Autokets de energia

Se $[H, A] = 0 \rightarrow$ fácil, pois autokets de A também são autokets de H, ou seja $H|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle$. Para saber o futuro, usamos $U(t, t_0)$ na base $|a'\rangle$

$$\exp[\frac{-iHt}{\hbar}] = \mathbb{1} \times \exp[\frac{-iHt}{\hbar}] \times \mathbb{1} = \sum_{a''} |a''\rangle\langle a''| \exp[\frac{-iHt}{\hbar}] \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| =$$

$$= \sum_{a'a''} |a''\rangle\langle a''| \exp[\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}]|a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'} |a'\rangle \exp[\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}]\langle a'|$$

Considere o ket

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} C_{a'}(t = 0)|a'\rangle$$

A aplicação direta do operador de evolução temporal sobre esse ket, fornece

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \exp[\frac{-iHt}{\hbar}]|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \exp[\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}]\langle a'|\alpha, t_0 = 0\rangle =$$

$$= \sum_{a'} C_{a'}(t)|a'\rangle, \text{ onde } C_{a'}(t) = \exp[\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}]C_{a'}(t = 0)$$

Um caso especial interessante: $\begin{cases} |\alpha, t_0 = 0\rangle = |a'\rangle \\ |\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \exp[\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}]|a'\rangle \end{cases}$

O estado não muda com o tempo. Só ganha uma fase global

Autokets de energia

Se $[H, A] = 0 \rightarrow$ e inicialmente o ket é autoket de A e H, ele permanece sendo, quando o relógio, começa a rolar. Ou seja, observáveis compatíveis com H são "constantes de movimento". Isto é,

$$\text{se} \begin{cases} [A, B] = [B, C] = [A, C] = \ldots = 0 \\ [A, H] = [B, H] = [C, H] = \ldots = 0 \end{cases}$$

$U(t, t_0)$ pode ser escrito por: $\exp[\frac{-iHt}{\hbar}] = \sum_{K'} |K'\rangle \exp[\frac{-iE_{K'}t}{\hbar}]\langle K'|$

onde $K = A, B, C \ldots$ e $|K'\rangle = |a', b', c', \ldots\rangle$.

Assim, se $|\alpha, t_0 = 0\rangle = |K'\rangle \rightarrow |\alpha, t_0 = 0, t\rangle = \exp[\frac{-iE_{K'}t}{\hbar}]|K'\rangle$.

$|K'\rangle$ é estacionário, pois se medirmos qualquer uma das observáveis$(A, B, C, \ldots)$ em t, encontraremos o mesmo resultado que havíamos medido em t=0

Boas Práticas:

É fundamental achar um conjunto completo de observáveis que comutam entre si e com H. Na base comum destas observáveis, é possível escrever não só um ket arbitrário de forma precisa, mas o seu futuro. Basta escrevê-lo em função destes autokets e aplicar a fórmula acima.

Dependência temporal de valores esperados

Suponha $[H, A] = 0$ e que no instante $t = 0$ o sistema se encontra em um autoket de A. Sabemos que no futuro, ele estaria em: $|a', t_0 = 0; t\rangle = U(t, 0)|a'\rangle$.
Que tal olharmos $\langle B\rangle$, onde B pode ou não comutar com A ou H?

$$\langle B\rangle(t) = \langle a'|U^\dagger(t,0)BU(t,0)|a'\rangle = \langle a'|\exp[\frac{+iE_{a'}t}{\hbar}]B\exp[\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}]|a'\rangle = \langle a'|B|a'\rangle$$

$|a'\rangle$ é dito estado estacionário, pois $\langle B\rangle(t) = \langle a'|B|a'\rangle$ é independente do tempo.

Suponha agora $|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} C_{a'}|a'\rangle$

$$\langle B\rangle(t) = \{\sum_{a'} C^*_{a'}\langle a'|\exp[\frac{+iE_{a'}t}{\hbar}]\}B\{\sum_{a''} C_{a''}\exp[\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}]|a''\rangle\}$$

onde usamos $U(t,0)\sum_{a''} C_{a''}|a''\rangle = \sum_{a''} C_{a''}\exp[\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}]|a''\rangle$

Assim $\langle B\rangle(t) = \sum_{a'a''} C^*_{a'}C_{a''}\langle a'|B|a''\rangle\exp[\frac{-i(E_{a''}-E_{a'})t}{\hbar}]$

o valor esperado é a combinação de termos oscilatórios de frequência

$w_{a''a'} = \dfrac{E_{a''}-E_{a'}}{\hbar}$, as frequências de Bohr

Precessão de spin – um bom exemplo

A Hamiltoniana de um sistema de spin 1/2 (momento magnético $\frac{e\hbar}{2m_e c}$) sujeito à um campo magnético externo $\mathbf{B}$ é: $H = -(\frac{e}{m_e c})\mathbf{S}.\mathbf{B}$

Tomemos $\mathbf{B}$ estático, na direção $\hat{z} \longrightarrow H = -(\frac{eB}{m_e c})S_z$

Como $H \propto S_z \to [H, S_z] = 0$

Quais são os autokets e auvalores de H?

$|\pm\rangle$ com autovalores $\mp\frac{e\hbar B}{2m_e c}$ e frequência de Bohr $w = |\frac{E_+ - E_-}{\hbar}| = \frac{|e|B}{m_e c}$

$\therefore E_\pm = \pm\frac{\hbar w}{2}$. Assim, a Hamiltoniana pode ser escrita por $H = wS_z$.

Conhecer H é conhecer o operador evolução temporal $U(t,0) = \exp[\frac{-iwS_z t}{\hbar}]$

Tomemos em t=0, $|\alpha, t_0 = 0\rangle = C_+|+\rangle + C_-|-\rangle$. Este ket no futuro é:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = U(t,0)|\alpha, t_0 = 0\rangle = \{\exp[\frac{-iwS_z t}{\hbar}]\}\{C_+|+\rangle + C_-|-\rangle\}$$

$$\therefore |\alpha, t_0 = 0; t\rangle = C_+ \exp[\frac{-iwt}{2}]|+\rangle + C_- \exp[\frac{+iwt}{2}]|-\rangle$$

Precessão de spin – dois casos

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = C_+ \exp\left[\frac{-iwt}{2}\right]|+\rangle + C_- \exp\left[\frac{+iwt}{2}\right]|-\rangle$$

Caso 1: $C_+ = 1$ e $C_- = 0 \rightarrow |\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \exp\left[\frac{-iwt}{2}\right]|+\rangle$

Sem surpresas, pois $|+\rangle$ é uma estado estacionário (autoket da Hamiltoniana)

Caso 2: $|\alpha\rangle = |S_x, +\rangle \rightarrow C_+ = C_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left[\frac{-iwt}{2}\right]|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left[\frac{+iwt}{2}\right]|-\rangle$$

Qual é a probabilidade de obtermos $|S_x, \pm\rangle$ no futuro?

Que tal, $|\langle S_x, \pm|\alpha, t_0 = 0; t\rangle|^2 =$

$$= |[\frac{1}{\sqrt{2}}\langle +| \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\langle -|][\frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left[\frac{-iwt}{2}\right]|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left[\frac{+iwt}{2}\right]|-\rangle] =$$

$$= |\frac{1}{2} \exp\left[\frac{-iwt}{2}\right] \pm \frac{1}{2} \exp\left[\frac{+iwt}{2}\right]|^2 \begin{cases} \cos^2 \frac{wt}{2} \text{ para } |S_x, +\rangle \\ \sin^2 \frac{wt}{2} \text{ para } |S_x, -\rangle \end{cases}$$

Note que a soma é 1 e que o ket está rodando. Quanto vale $\langle S_x \rangle$?

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{wt}{2} - \frac{\hbar}{2} \sin^2 \frac{wt}{2} = \frac{\hbar}{2} \cos wt \text{ oscila com frequência } w$$

usei $cos2a = cos^2 a - sin^2 a.$

$\langle A \rangle = \sum_{a'} a' |\langle a'|\alpha\rangle|^2$. Mostre que $\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin wt; \langle S_z \rangle = 0$

Amplitude de Correlação e relação de incerteza tempo-energia

Isso começa com a pergunta: Quão similar ao ket $|\alpha, t_0\rangle$ é o ket $|\alpha, t_0; t\rangle$?

$C(t) \equiv \langle \alpha, t_0|\alpha, t_0; t\rangle = \langle \alpha, t_0|U(t,0)|\alpha, t_0\rangle$ é uma medida disto.

Definimos: $|C(t)| \equiv$ semelhança

Exemplo 1: tome $|\alpha, t_0 = 0\rangle = |a'\rangle$, um autoket de H

$C(t) = \langle a'|a', t_0 = 0; t\rangle = \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \rightarrow$ o módulo de $C(t)$ é $|C(t)| = 1, \forall t$.

Exemplo 2: tome $|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} C_{a'}|a'\rangle$,

$$C(t) = \left(\sum_{a'} C^*_{a'}\langle a'|\right).\left[\sum_{a''} C_{a''} \exp\left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}\right)|a''\rangle\right] = \sum_{a'} |C_{a'}|^2 \exp\left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}\right)$$

Note que $C(0) = 1$. O que esperar de $C(\infty)$? $C(\infty) \rightarrow 0$.

Amplitude de Correlação e relação de incerteza tempo-energia

Suponha agora, um contínuo de energias. Vale a seguinte substituição:

$$\sum_{a'} \longrightarrow \int dE\rho(E) \qquad \text{e} \qquad C_{a'} \longrightarrow g(E)|_{E\approx E_{a'}}$$

$$\text{compare} \begin{cases} C(t) = \sum_{a'} |C_{a'}|^2 \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \\ \\ C(t) = \int dE|g(E)|^2\rho(E)\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \end{cases}$$

com a condição de normalização $\displaystyle\int dE|g(E)|^2\rho(E) = 1$

Em uma situação realista $|g(E)|^2\rho(E)$ tem um pico em $E = E_0$ e largura ΔE.
Reescreva $C(t)$ na seguite forma:

$$C(t) = \exp\left(\frac{-iE_0t}{\hbar}\right)\int dE\underbrace{|g(E)|^2\rho(E)}\,\underbrace{\exp\left(\frac{-i(E-E_0)t}{\hbar}\right)}$$

Isso é zero se $\begin{cases} E > E_0 + |\Delta E| \\ E < E_0 - |\Delta E| \end{cases}$ Oscila muito se $\left|\dfrac{|(E-E_0)t}{\hbar}\right| >> 1$

Para evitar mudanças em $C(t)$, é preciso oscilar pouco na região:
$E_0 - |\Delta E| < E < E_0 + |\Delta E|$. Para mudanças em $C(t)$, $\underline{\Delta E.t > \hbar}$

Amplitude de Correlação e relação de incerteza tempo-energia

Como exemplo, tomemos:

$$C(t) = \exp\left(\frac{-iE_0 t}{\hbar}\right) \int dE |g(E)|^2 \rho(E) \exp\left(\frac{-i(E-E_0)t}{\hbar}\right), \text{ com } E_0 = 0$$

e $|g(E)|^2 \rho(E) = \frac{1}{\pi^{1/2} d} \exp\left[-\frac{E^2}{d^2}\right]$ que respeita a condição de normalização $\int_{-\infty}^{+\infty} dE |g(E)|^2 \rho(E) = 1$. Desta forma, $C(t)$ fica:

$$C(t) = \frac{1}{\pi^{1/2} d} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{E^2}{d^2}\right] \exp(-iEt)$$

Note que a largura ΔE da Gaussiana é d e que estamos utilizando unidades atômicas, onde $\hbar = 1$. Note também que ao escrever $\exp(-iEt) = \cos Et - i \sin Et$, a integral envolvendo $\sin Et$ é nula, pois o integrando é ímpar. Assim, nosso problema se reduz a analisar:

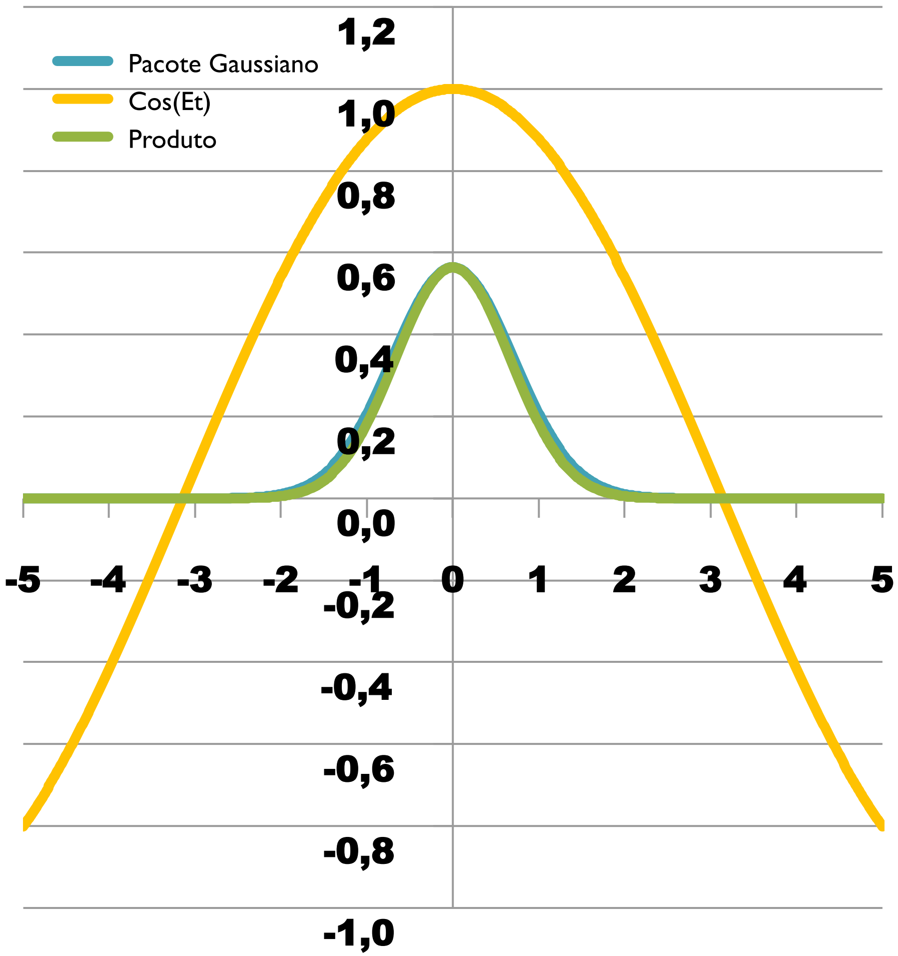
$$C(t) = \frac{1}{\pi^{1/2} d} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{E^2}{d^2}\right] \cos(Et)$$

Queremos ilustrar a afirmação: Para evitar mudanças em $C(t)$, é preciso que o $\cos(Et)$ oscile pouco na região: $-d < E < d$. Para mudanças em $C(t)$, vale a relação de incerteza $d.t > 1$ (unidades atômicas).

Relação de incerteza tempo-energia

$$\Delta E = d = 1; \qquad t = 0,5$$

$$\text{Semelhança } = |C(t)| = 0,94$$



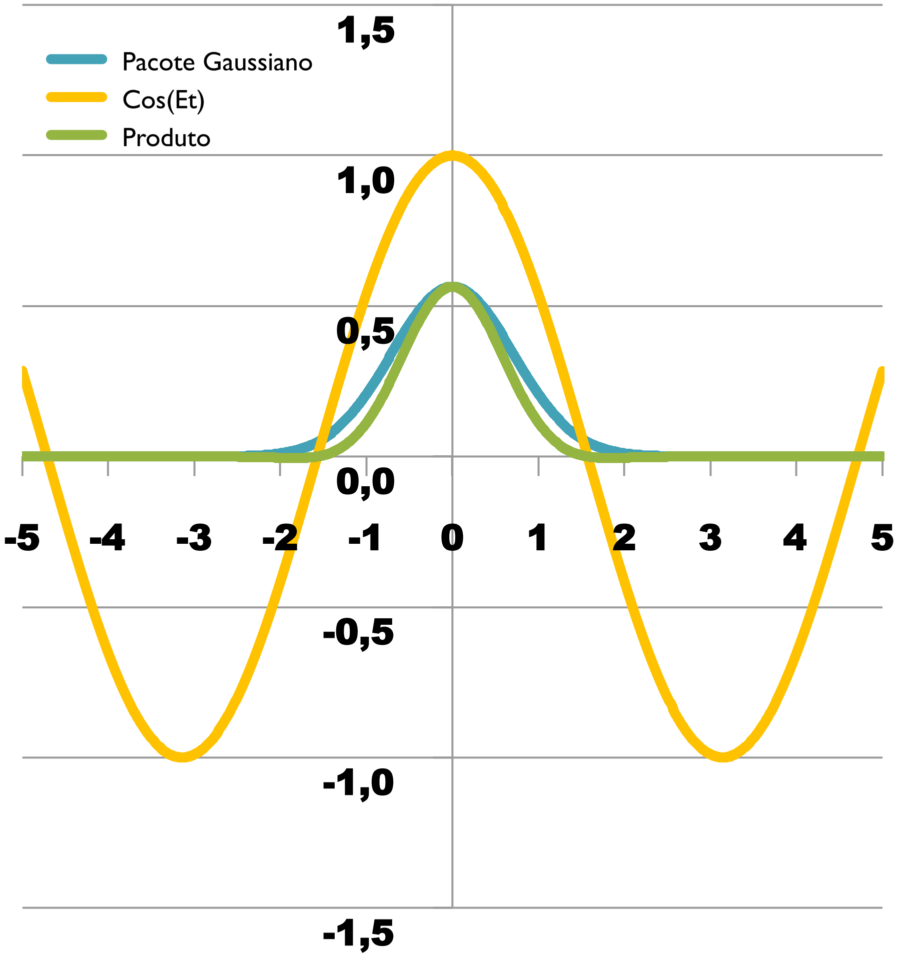
Para t pequeno, cos(et) não oscila na região do pacote gaussiano
e a semelhança fica próxima de 1

FI001
Aula 7

Relação de incerteza tempo-energia

$$\Delta E = d = 1; \qquad t = 1$$

$$\text{Semelhança } = |C(t)| = 0,78$$



Para t próximo do limite da relação de incerteza, cos(et) começa a oscilar na região do pacote gaussiano e a semelhança começa a mudar

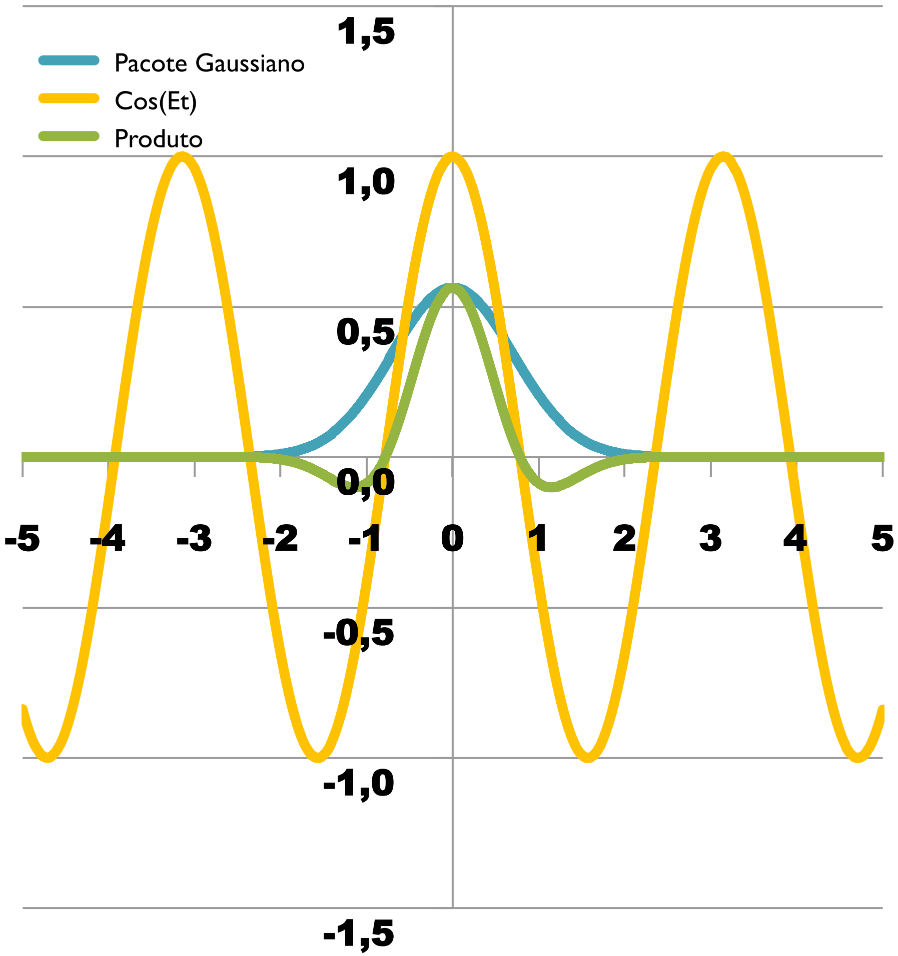
Instituto de Física Gleb Wataghin

MAPLima

Relação de incerteza tempo-energia

$$\Delta E = d = 1; \qquad t = 2$$

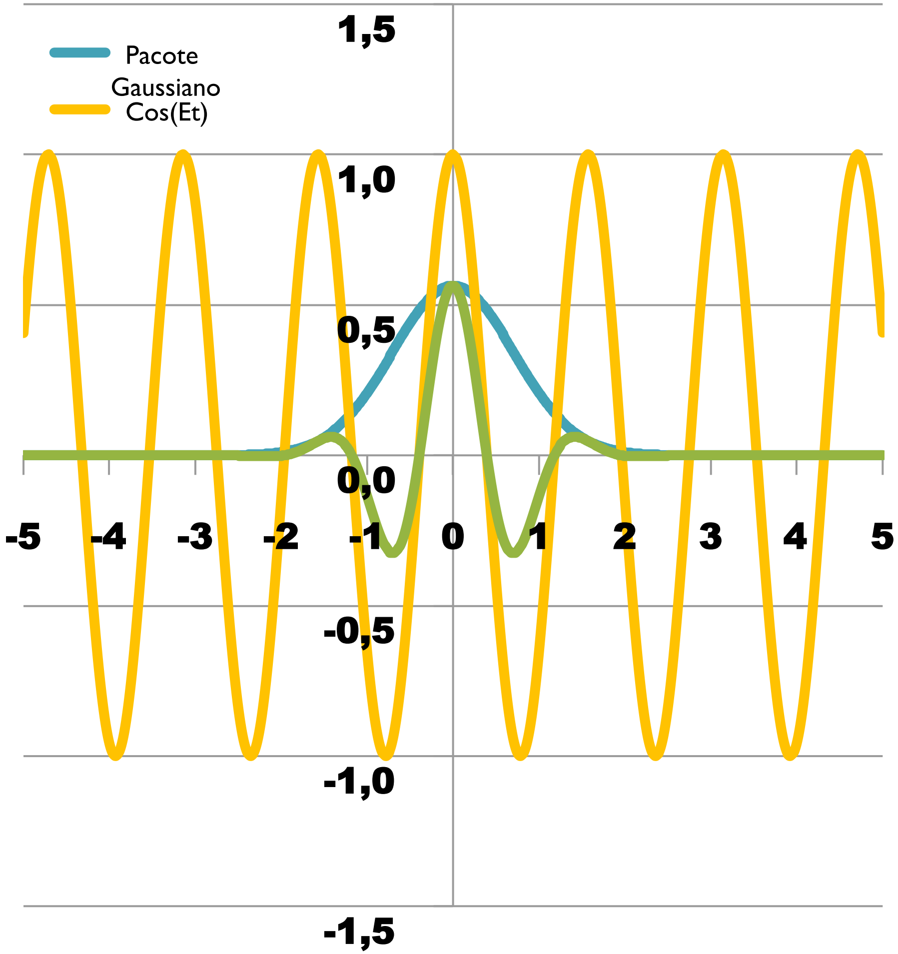
$$\text{Semelhança} \;= |C(t)| = 0,37$$



Quando t cresce, cos(et) oscila na região do pacote gaussiano e a semelhança se afasta de 1

FI001
Aula 7

Relação de incerteza tempo-energia



$\Delta E = d = 1; \qquad t = 4$

Semelhança $= |C(t)| = 0,02$

Para t grande, cos(et) oscila muito na região do pacote gaussiano e a semelhança fica próxima de zero. O resultado da integral muda muito, pois há um cancelamento das contribuições positivas e negativas.

Instituto de Física Gleb Wataghin

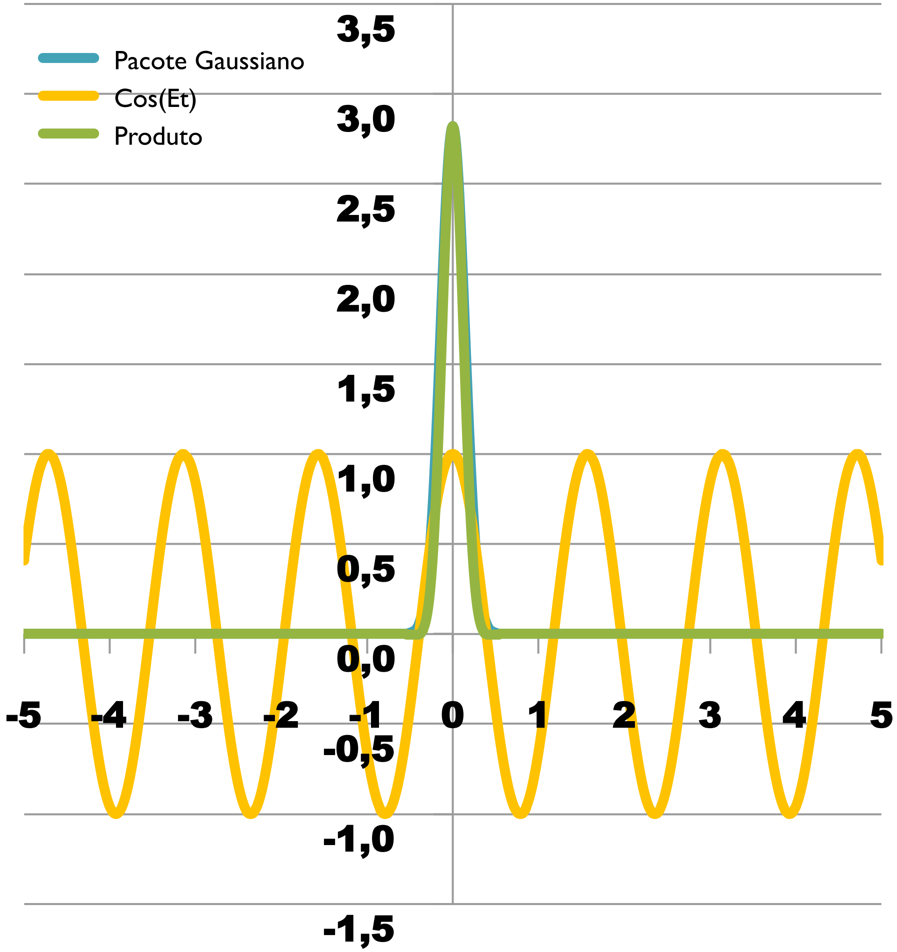
MAPLima

UNICAMP

Relação de incerteza tempo-energia

$$\Delta E = d = 0,2; \qquad t = 4$$

$$\text{Semelhança } = |C(t)| = 0,85$$



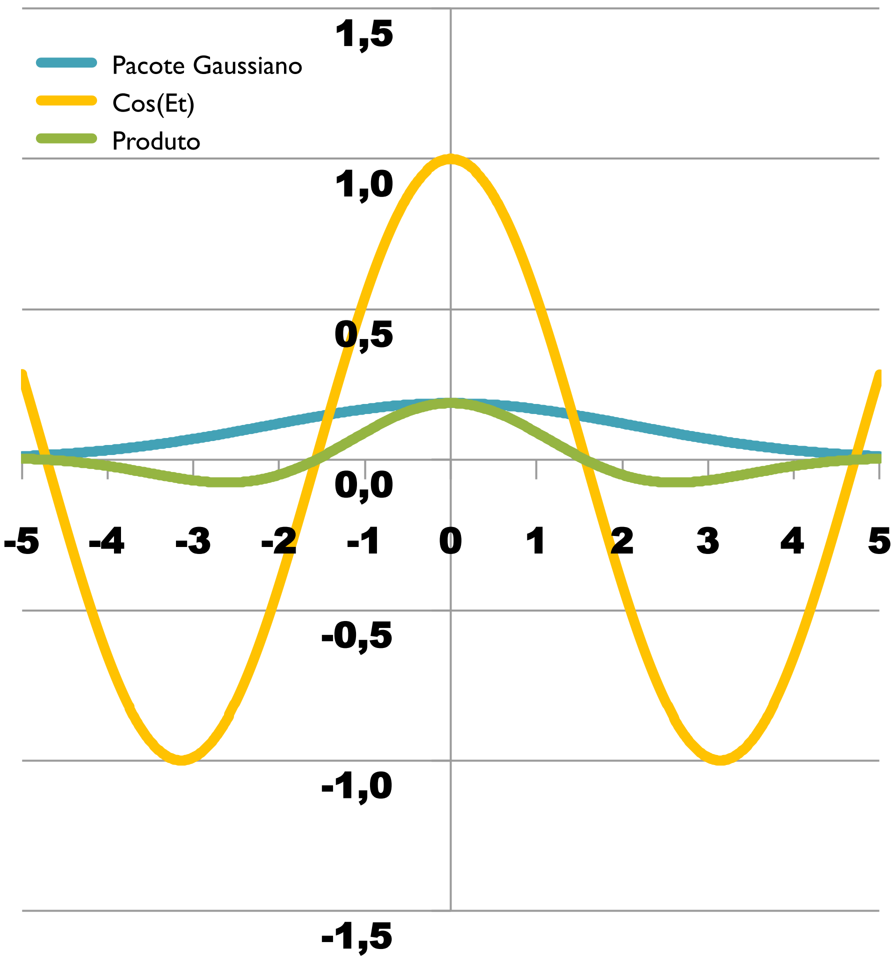
Se d diminui, o mesmo t=4 faz agora cos(et) oscilar pouco na região do pacote gaussiano e a semelhança fica próxima de 1

FI001
Aula 7

Relação de incerteza tempo-energia

$$\Delta E = d = 3; \qquad t = 1$$

$$\text{Semelhança} \;= |C(t)| = 0,09$$



Se d cresce, t's pequenos já fazem o cos(et) oscilar na região do pacote gaussiano e a semelhança se afasta de 1

Instituto de Física Gleb Wataghin

MAPLima

Relação de incerteza tempo-energia

Comentários sobre: $\Delta E \Delta t > \hbar$

1) Se a largura em energia é estreita (estado quase estacionário), é preciso esperar muito para que haja oscilações da exponencial na região da Gaussiana e a semelhança demora para mudar de 1.
2) Se a Gaussiana é larga (grande mistura de estados estacionários, rapidamente a exponencial oscila e cancela contribuições positivas com as negativas e a semelhança se afasta de 1.
3) Se diminuir a largura de distribuição de energias do sistema, é preciso aumentar a espera para grandes mudanças. Para diminuir a espera de grandes mudanças é preciso aumentar a largura da distribuição de energias do sistema.