§ Versão de Schrödinger vs. versão de Heisenberg

O conceito de evolução temporal formulado através do operador $\mathcal{U}(t, t_0)$ que afeta os kets é conhecido como versão de Schrödinger da dinâmica. Existem outras formulações da dinâmica quântica, todas elas equivalentes. Na versão de Heisenberg, a evolução temporal afeta os observáveis e deixa os kets inalterados. Esta versão tem um contato mais estreito com a mecânica clássica, onde não são introduzidos kets, mas onde os "observáveis" variam no tempo. Todas as versões estão ligadas entre si por operadores unitários.

Seja U uma tal transformação:

$$|\alpha\rangle \rightarrow U|\alpha\rangle \ , \text{ com } U^{\dagger}U = U\cdot U^{\dagger} = 1$$

Sabemos que um operador unitário preserva os produtos escalares:

$$\langle\beta|\alpha\rangle \longrightarrow \langle\beta|U^{\dagger}U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$$

Vejamos como transforma um elemento de matriz de um operador:

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle \longrightarrow (\langle\beta|U^{\dagger})\cdot X\cdot(U|\alpha\rangle)$$
$$= \langle\beta|U^{\dagger}\cdot X\cdot U|\alpha\rangle$$

Esta relação sugere dois tratamentos diferentes do problema:

i) $|\alpha\rangle \rightarrow U|\alpha\rangle$, com operadores inalterados;

ii) $X \rightarrow U^{\dagger}\cdot X\, U = X'$, com kets inalterados.

▶ Ex: Voltemos para a nossa formulação dos operadores infinitesimais de translação:

$$\mathcal{T}(d\vec{x}') = 1 - \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot d\vec{x}'$$

No primeiro tratamento, $\mathcal{T}(d\vec{x}')$ afeta os kets e deixa inalterados os observáveis:

$$
\text{i)} \begin{cases} |\alpha\rangle \longrightarrow \left(1 - \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot d\vec{x}'\right)|\alpha\rangle \\ \vec{x} \longrightarrow \vec{x} \end{cases}
$$

Para o tratamento ii) teríamos:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle ,$$

$$\vec{x} \longrightarrow \mathcal{U}^{\dagger}\cdot\vec{x}\cdot\mathcal{U} = \left(1+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot d\vec{x}'\right)\cdot\vec{x}\cdot\left(1-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot d\vec{x}'\right)$$

$$= \vec{x} + \frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}\cdot d\vec{x}', \vec{x}\right]$$

$$= \vec{x} + \frac{i}{\hbar}\, dx'_k \underbrace{\left[p_k , x_j\right]}_{-i\hbar\,\delta_{kj}} \hat{x}_j$$

$$= \vec{x} + d\vec{x}'$$

$$
\text{ii)} \begin{cases} \vec{x} \longrightarrow \vec{x} + d\vec{x}' \\ |\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle \end{cases}
$$

Como os produtos escalares não mudam por uma transformação unitária, os valores médios são os mesmos independente da formulação:

$$\langle\vec{x}\rangle \longrightarrow \langle\vec{x}\rangle + \langle d\vec{x}'\rangle$$

<u>Versão de Schrödinger:</u> Os kets-estados variam de acordo com o operador de evolução temporal $\mathcal{U}(t,t_0)$. Os operadores correspondentes aos observáveis (como $\vec{x}, \vec{p}, \vec{S}$, etc...) estão fixos no tempo. Para simplificar, escolhemos $t_0 = 0$;

$$\mathcal{U}(t,t_0=0) \equiv \mathcal{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right)$$

$$|\alpha,t\rangle = \mathcal{U}(t)|\alpha,0\rangle = \mathcal{U}(t)|\alpha\rangle$$

$|\alpha,t\rangle$ e $\mathcal{U}(t)$ satisfazem a equação de Schrödinger:

$$\boxed{i\hbar\partial_t |\alpha,t\rangle = \mathcal{H}|\alpha,t\rangle} \longleftrightarrow \boxed{i\hbar\partial_t \mathcal{U}(t) = \mathcal{H}\,\mathcal{U}(t)}$$

<u>Versão de Heisenberg:</u> Os kets estão fixos, "congelados" no tempo (digamos no momento inicial $t_0 = 0$). Os operadores correspondentes à observáveis variam no tempo (como no caso clássico). Definimos um observável na versão de Heisenberg por:

$$\boxed{A^{(H)}(t) \equiv \mathcal{U}^{\dagger}(t)\, A^{(S)}\, \mathcal{U}(t)\,,}$$

onde os super índices (H,S) significam respectivamente de Heisenberg e de Schrödinger. No tempo inicial $t_0 = 0$, ambas versões coincidem

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

Para os kets temos:

$$|\alpha, t_0=0; t\rangle_H = \mathcal{U}^\dagger(t)\,|\alpha, t_0=0; t\rangle_S$$
$$= \mathcal{U}^\dagger(t)\big(\mathcal{U}(t)\,|\alpha, t_0=0\rangle_S\big)$$
$$= |\alpha, t_0=0\rangle_S \qquad = |\alpha\rangle$$

independente de $\underline{t}$. Equivalentemente:

$$|\alpha, t_0=0; t\rangle_S = \mathcal{U}(t)\,|\alpha, t_0=0; t\rangle_H$$

Os valores médios são os mesmos em ambas versões:

$${}_S\langle \alpha, t_0=0; t\,|\,A^{(S)}\,|\,\alpha, t_0=0; t\rangle_S = \langle \alpha, t_0=0\,|\,\mathcal{U}^\dagger(t) A^{(S)}\,\mathcal{U}(t)\,|\alpha, t_0=0\rangle$$
$$= {}_H\langle \alpha, t_0=0; t\,|\,A^{(H)}\,|\,\alpha, t_0=0; t\rangle_H\,,$$

ou
$$\langle A^{(S)}\rangle_S = \langle A^{(H)}\rangle_H\,,$$

de maneira que podemos eliminar os índices para os valores médios.

§ Equação de Movimento de Heisenberg

Para a maior parte das situações físicas de interesse, podemos assumir que $A^{(s)}$ não depende explicitamente do tempo. Assim:

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

$$\frac{dA^{(H)}}{dt}(t) = \frac{\partial \mathcal{U}^{\dagger}}{\partial t} A^{(s)} \mathcal{U} + \mathcal{U}^{\dagger} A^{(s)} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t}$$

usamos a eq. de Schrödinger para $\mathcal{U}$ e $\mathcal{U}^{\dagger}$

$$i\hbar \partial_t \mathcal{U} = \mathcal{H}\mathcal{U} \qquad , \quad -i\hbar \partial_t \mathcal{U}^{\dagger} = \mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{H}$$

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}(\mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{H}\mathcal{U})(\mathcal{U}^{\dagger}A^{(s)}\mathcal{U}) + \frac{1}{i\hbar}(\mathcal{U}^{\dagger}A^{(s)}\mathcal{U})(\mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{H}\mathcal{U})$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[A^{(H)}, \mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{H}\mathcal{U}\right]$$

Temos:
$$\mathcal{H}^{(H)} = \mathcal{U}^{\dagger}(t,t_0)\,\mathcal{H}\,\mathcal{U}(t,t_0)$$
$$= \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t-t_0)\right]\mathcal{H}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t-t_0)\right]$$
$$= \mathcal{H},$$

com a eq. de movimento

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

Eq. de Heisenberg

Esta é a equação que tem que ser comparada com a equação clássica:

$$\frac{dA(q,p)}{dt} = \left[A(q,p), \mathcal{H}(q,p)\right]_{\text{Clássico}} ,$$

onde outra vez aparece a analogia observada por Dirac

$$[\ ,\ ]_{\text{Clássico}} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\ ,\ ]$$

§ Construção do Hamiltoniano como operador hermitéano

Para sistemas com análogos clássicos simplesmente substituímos as variáveis clássicas (x_i, p_i) pelos correspondentes operadores da Mecânica Quântica. Os colchetes de Poisson transformam-se em comutadores. Como no caso mecânico-quântico os observáveis podem não ser compatíveis podem surgir ambigüedades na construção de H. Isto pode ser resolvido na maior parte dos casos pela simetrização dos termos, o que deixaria o Hamiltoniano hermitéano.

$$\overset{MC}{x' p_{x'}} \longrightarrow \overset{MQ}{x p_x} , \quad (x p_x)^\dagger = p_x x \neq x p_x$$

Simetrizar:

$$x' p_{x'} \longrightarrow \frac{1}{2}(x p_x + p_x x)$$

Quando o sistema físico não tem análogo clássico temos que adivinhar a estrutura do Hamiltoniano, com base nas experiências.

As seguintes fórmulas podem ser usadas:

$$[x_i, G(\vec{p})]_{\text{Clássico}} = \sum_j \underbrace{\frac{\partial x_i}{\partial x_j}}_{\delta_{ij}} \frac{\partial G}{\partial p_j} = \frac{\partial G}{\partial p_i}$$

$$\longrightarrow \quad \frac{1}{i\hbar}[x_i, G(\vec{p})] = \frac{\partial G}{\partial p_i}(\vec{p})$$

Também:

$$[p_i, G(\vec{x})]_{\text{Clássico}} = -\frac{\partial G}{\partial x_i}(\vec{x}) \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[p_i, G(\vec{x})] = -\frac{\partial G}{\partial x_i}(\vec{x})$$

- Exemplo 1: Partícula livre

Tomamos o Hamiltoniano da Mec. Clássica:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

Trabalhamos na versão de Heisenberg (omitindo o correspondente índice). Assim temos:

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, \mathcal{H}] = 0$$

ou $\quad p_i(t) = p_i(0) = \text{cte.}, \quad i = 1,2,3$

Para uma partícula livre, o seu momentum linear é uma constante de movimento. Agora seja:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[x_i, \mathcal{H}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[x_i, \frac{p_i^2}{2m}\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{1}{2m}\right)\left(\underbrace{[x_i, p_i]}_{i\hbar} p_i + p_i \underbrace{[x_i, p_i]}_{i\hbar}\right)$$

$$= \frac{p_i}{m} = \frac{p_i(0)}{m} = \text{cte}.$$

Integramos esta equação:

$$x_i(t) = \frac{p_i(0)}{m} t + x_i(0),$$

que lembra a equação clássica $x(t) = v t + x_0$.
Comutadores à tempos diferentes de um mesmo operador não são necessariamente nulos:

$$\left[x_i(t), x_i(0)\right] = \frac{t}{m}\left[p_i(0), x_i(0)\right] = -\frac{i\hbar t}{m},$$

de maneira que o Princípio de Incerteza, neste caso fornece

$$\langle(\Delta x_i(t))^2\rangle \langle(\Delta x_i(0))^2\rangle \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}$$

Esta relação implica que se inicialmente a posição da partícula estava bem definida, esta informação é perdida com o tempo (partícula livre).

Exemplo 2: Partícula na presença de um potencial

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})$$

$$V(\vec{x}) = V(x,y,z)$$

Usando as equações mencionadas antes:

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[p_i, V(\vec{x})\right] = -\frac{\partial V}{\partial x_i}(\vec{x})$$

e

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[x_i, \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\right] = \frac{p_i}{m}$$

Podemos usar a equação de Heisenberg uma outra vez com:

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{dx_i}{dt}, \mathcal{H}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{p_i}{m}, \mathcal{H}\right]$$

$$= \frac{1}{m}\,\frac{1}{i\hbar}\left[p_i, V(\vec{x})\right] = -\frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial x_i}(\vec{x}),$$

e escrevendo de maneira vetorial:

$$\boxed{m\,\frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = -\nabla V(\vec{x})}$$

Análogo quântico da equação de Newton

Tomando médias em relação a um estado arbitrário obtemos:

$$m\left\langle \frac{d^2\vec{x}}{dt^2}\right\rangle_\alpha = m\frac{d^2}{dt^2}\langle\vec{x}\rangle_\alpha = \frac{d\langle\vec{p}\rangle_\alpha}{dt}$$

$$= -\langle\nabla V(\vec{x})\rangle_\alpha$$

ou

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle_\alpha = -\langle\nabla V(\vec{x})\rangle_\alpha} \, ,$$

resultado que é conhecido como Teorema de Ehrenfest. Se $|\alpha\rangle$ representa um pacote de ondas, o Teorema de Ehrenfest sugere que o centro do pacote segue uma trajetória similar á clássica. Mas, apesar de que $\hbar$ desapareceu da relação acima, a trajetória corresponde com a clássica, apenas para potenciais do tipo $V(x) = Ax^n$, com $x = 0, 1, 2$. Em outros casos, observam-se correções quânticas.

Para que a equação acima represente a trajetória clássica deveríamos ter que

$$\langle\nabla V(\vec{x})\rangle_\alpha = \nabla V(\vec{x}')\Big|_{\vec{x}'=\langle\vec{x}\rangle_\alpha} \, ,$$

o que em geral não é verdade (ver discussão no livro de Cohen-Tanoudji et al.)