Capítulo 1

Dinámica cuántica

Queremos ver la evolución temporal de los kets

$$|\alpha, t_0, t\rangle\,,$$

notación que refiere al estado α que partió en t_0 al tiempo t. Pictóricamente

$$|\alpha, t_0\rangle \underbrace{\longrightarrow}_{\text{evoluciona}} |\alpha, t_0, t\rangle$$

Emplearemos para ello un operador de evolución temporal $U_{(t,t_0)}$ al cual le pediremos

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U\,|\alpha, t_0\rangle$$

con las propiedades

- Unitariedad

  $$\langle \alpha, t_0, t \,|\, \alpha, t_0, t\rangle = 1 \forall t$$

  $$\langle \alpha, t_0 \,|\, U^\dagger U \,|\, \alpha, t_0\rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$$

  para conservación de la probabilidad.

- Linealidad

  $$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) \qquad t_2 > t_1 > t_0$$

- Límite a $\mathbb{1}$

  $$U_{(t,t_0)} \to \mathbb{1} \quad \text{si} \quad t \to t_0$$

  o bien

  $$U_{(t_0+dt,t_0)} \to \mathbb{1} \quad \text{si} \quad dt \to 0$$

Se propone entonces un

$$U_{(t+dt,t)} = \mathbb{1} - i\Omega dt$$

con Ω hermítico. Comparando con clásica vemos que H origina la evolución temporal, entonces identificamos Ω con H, del modo $\Omega = H/\hbar$ así que

$$U_{(t+dt,t)} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt.$$

De esta forma

$$U_{(t+dt,t_0)} = U_{(t+dt,t)} U_{(t,t_0)} = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt\right) U_{(t,t_0)}$$

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

y entonces

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU$$

que es la ecuación para $U_{(t,t_0)}$.

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

y arribamo a la ecuación de Schrödinger para kets

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

donde el inconveniente es que $H = H(t)$.

El concepto se ilustra en la figura siguiente

1.1 Dinámica cuántica

1.1.1 Casos de solución de $U(t, t_o)$

- Supongamos $H \neq H(t)$, entonces

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

- Sea $H = H(t)$, entonces

$$U(t, t_0) = \mathrm{e}^{-i/\hbar \int_{t_0}^{t} H(t')dt'}$$

y la integral puede hacerse una vez conocida la expresión de $H(t)$.

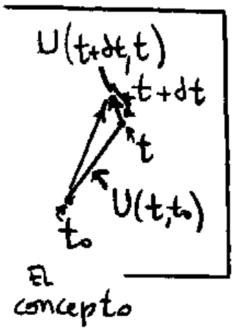

Figura 0.1

- Sea $H = H(t)$ con $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$ entonces

$$U(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \ldots \times \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n)$$

  y esta es la serie de Dyson (del físico Freeman Dyson().)

El problema que suscita es debido a que si H a diferentes tiempos no conmuta no podemos poner la exponencial en serie de potencias. En realidad $\exp(\square)$ tiene sentido sólo si la serie

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \square^n$$

tiene sentido; es decir, si no surgen ambigüedades al tomar la potencia n-ésima del operador $\square$.

El operador $\square$ no se deja poner sombreros, quiere andar con la cabeza descubierta

Para el caso 1 es simplemente

$$a$$

pero para el caso 3 es

$$a$$

puesto que al operar es

$$a$$

pues $[H(t'), H(t'')] \neq 0$. En el caso 2 $(\int_{t_0}^{t} H(t')dt')^n$ no tiene problemas puesto que está provista la conmutatividad.

1.1.2 Soluciones útiles

Primeramente conseguimos un $\hat{A}$ tal que $[A, H] = 0$ y entonces (estoy considerando $H \neq H(t)$)

$$a,$$

luego

$$a$$

con $\hat{H}$ y $\hat{A}$ conmutan se tiene

$$a$$

Entonces operamos con el H para

$$a$$

y así

$$a$$

de manera que comparando con

$$a$$

El coeficiente es el mismo pero le hemos sumado una fase $\exp(-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar)$ que no es global.

1.1.3 Evolución de valores de expectación

Recordemos primeramente que los autoestados no evolucionan. Luego

$$a$$

La fase es global es considerar una autoestado. La podemos descartar (setear igual a uno)

$$a$$

El valor de expectacion de un operador respecto a un autoestado no varía.

$$a$$

$$a$$

$$a$$

El valor de expectación de un operador respecto a un estado general tiene una fase no global que produce términos de interferencia.

1.1.4 Relaciones de conmutación

$$[A+B,C]=[A,C]+[B,C]$$
$$[A,B]=-[B,A]$$
$$[A,B\cdot C]=B[A,C]+[A,B]C$$

Acá no es baca + caballo puesto que no conmutan.

$$i\hbar[A,B]_{\text{classic}}=[A,B]$$

donde $[,]_{\text{classic}}$ es el corchete de Poisson. Las relaciones de conmutación fundamentales son

$$[x_i,x_j]=0 \qquad [p_i,p_j]=0 \qquad [x_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}$$

a las que podemos sumar

$$[x,f(p)]=i\hbar\frac{\partial f}{\partial p} \qquad [p,G(x)]=i\hbar\frac{\partial G}{\partial x}$$

$$[S_i,S_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$$

1.1.5 La ecuación de Schrödinger

$$a\text{con} \qquad \hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})$$

Puedo meter un bra $\langle x'|$ que no depende del tiempo y entonces

$$a$$

$$a$$

de manera que resulta la ecuación de Schrödinger

$$a.$$

1.1.6 Representación de Heisenberg

Los kets y los operadores no tienen sentido físico, pero sí los valores de expectación : toda física podrá modificar los primeros pero debe conservar los valores de expectación. Así tenemos dos representaciones posibles:

Schrödinger	Heisenberg
$\lvert\alpha\rangle \to U\lvert\alpha\rangle$	$\lvert\alpha\rangle \to \lvert\alpha\rangle$
$A \to A$	$A \to U^\dagger A U$
$\lvert a'\rangle \to \lvert a'\rangle$	$\lvert a'\rangle \to U^\dagger \lvert a'\rangle$

Así vemos que en Schrödinger los kets evolucionan y los operadores permanecen fijos; al igual que los autoestados. En cambio en Heisenberg los kets no evolucionan pero sí lo hacen los operadores y los autoestados.

Deben notars que:

1. Los productos internos no cambian con el tiempo

$$a$$

2. Los valores de expectacion son los mismos en ambos esquemas

$$a$$

$$\langle A\rangle^{(S} = \langle A\rangle^{(H} \qquad A(t)^H = U(t)^\dagger A^S U(t)$$

El operador $\hat{A}$ en Schrödinger no depende explícitamente del tiempo. La idea es que le "pegamos" a los operadores la evolución temporal de los kets.

$$a$$

pero a $t = t_0$ las representaciones coinciden,

$$a$$

La ecuación de Heisenberg

$$a$$

$$\Rightarrow$$

$$a$$

$$a$$

$$a$$

y llegamos a la ecuación de Heisenberg

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

si $A^{(H)}$ conmuta con el $H^{(H)}$, entonces $A^{(H)}$ es una cantidad conservada (una constante de movimiento). En ese caso el operador no depende del tiempo y entonces $A^{(H)} = A^{(S)}$.

Evolución de autoestados

$$a,$$

aplico un $U^\dagger$ a ambos lados y entonces

$$a$$

los a' no dependen de la representación porque tienen significado físico. Entonces los $|a'\rangle$ evolucionan

$$a$$

$$a$$

$$a$$

puesto que recordemos, nota importante,

$$a$$

entonces H es el mismo en ambas puesto que $\hat{U} = \hat{U}(\hat{H})$ y $[U, H] = 0$.

De esta forma los autoestados evolucionan al revés

$$a$$

Podemos ver de otro modo la equivalencia

$$a$$

pero

$$a$$

$$a$$

Coeficientes

Los coeficientes en Schrödinger y en Heisenberg son

$$a$$

Entonces en Schrödinger es

$$a$$

mientras que en Heisenberg es

$$a$$

Los coeficientes en las expresiones son iguales como corresponde a todo magnitud que tiene sentido físico, pues $|c_a(t)|^2$ es la probabilidad.

1.1.7 Teorema de Ehrenfest

Para una partícula libre, donde $p(t) = p(0)$ es constante de movimiento,

$$x^{(H)} = x(0) + \frac{p(0)}{m}t$$

y se tiene

$$[x(t), x(0)] = -\frac{i\hbar}{m}t$$

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

$$\frac{dP}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p, H] = \frac{1}{i\hbar}[p, V(x)] = \frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\right),$$

de modo que

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} \qquad \longrightarrow \qquad m\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$p = m\frac{dx}{dt} \qquad \frac{dp}{dt} = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

donde estamos usando

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H]$$

Es necesario remarcar que relaciones como $[x, p] = i\hbar$ son para operadores en la picture de Schrödinger, donde los operadores no cambian en el tiempo. Estamos en efecto haciendo $[x(0), p(0)] = i\hbar$

$$\left\langle \alpha, t_0 \left| m\frac{d^2x}{dt^2} \right| \alpha, t_0 \right\rangle = -\left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle$$

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left\langle \alpha, t_0 \,\middle|\, x^H \,\middle|\, \alpha, t_0 \right\rangle = -\left\langle \alpha, t_0 \,\middle|\, \frac{\partial V}{\partial x} \,\middle|\, \alpha, t_0 \right\rangle$$

y entonces el teorema de Ehrenfest es

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left\langle x^{(s)} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial V^{(s)}}{\partial x} \right\rangle$$

los valores de expectación son iguales en ambas representaciones.