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 $H(t)$.

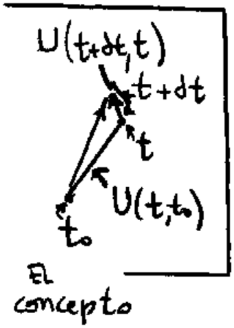

Figura 0.1

- 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

$$\mathrm{e}{-}i\frac{H}{\hbar}(t-t_0) = 1 - i\frac{H}{\hbar}(t-t_0) + \frac{(-i)^2}{2}\left(\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right)^2 + \ldots$$

pero para el caso 3 es

$$\left(\int H(t')dt'\right)\left(\int H(t'')dt''\right) \neq \left(\int H(t'')dt'' \int H(t')dt'\right)$$

puesto que al operar es

$$\int dt'dt''H(t')H(t'') \neq \int dt'dt''H(t'')H(t')$$

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 $H \neq H(t)$)

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle \alpha' \,|\, \alpha\rangle \,,$$

luego

$$U(t,t_0)\,|\alpha\rangle = \sum_{a'} \mathrm{e}{-i}\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\,|a'\rangle \langle \alpha' \,|\, \alpha\rangle$$

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

$$\hat{H}\,|a'\rangle = E_{a'}\,|a'\rangle \qquad \hat{A}\,|a'\rangle = a'\,|a'\rangle$$

Entonces operamos con el H para

$$U(t,t_0) = \sum_{a'} \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\,|a'\rangle \langle a'|$$

y así

$$U(t,t_0)\,|\alpha\rangle = \sum_{a'} \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\,|a'\rangle \langle a' \,|\, \alpha\rangle$$

$$|\alpha,t_0,t\rangle = \sum_{a'} \langle a' \,|\, \alpha\rangle \; \mathrm{e}{-i}\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)\,|a'\rangle$$

de manera que comparando con

$$|\alpha,t_0\rangle = \sum_{a'} \langle a' \,|\, \alpha\rangle\,|a'\rangle$$

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

$$|\alpha\rangle = |a'\rangle \qquad \to |\alpha, t\rangle = |a', t\rangle = \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\,|a'\rangle$$

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

$$\langle a', t \,|\, B \,|\, a', t\rangle = \langle a'|\,\mathrm{e}^{i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} B\, \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}|a'\rangle = \langle a'|B|a'\rangle$$

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

$$\langle \alpha, t|B|\alpha, t\rangle = \langle a''|\sum_{a''} \langle a''|\alpha\rangle^*\ \mathrm{e}^{i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} B \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle\ \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}|a'\rangle$$

$$\langle \alpha, t|B|\alpha, t\rangle = \sum_{a', a''} C^*_{a''} C_{a'}\, \mathrm{e}^{i\frac{E_{a''}-E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\, \langle a''|B|a'\rangle$$

donde

$$C^*_{a''} = \langle \alpha, t_0|a''\rangle \qquad C_{a'} = \langle a'|\alpha, t_0\rangle$$

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\alpha, t_0, t\right\rangle = H\left|\alpha, t_0, t\right\rangle \text{ con } \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x'|\alpha, t_0, t\rangle = \langle x'|H|\alpha, t_0, t\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_\alpha(x', t) = \langle x'|\frac{p^2}{2m} + V(x)|\alpha, t_0, t\rangle$$

de manera que resulta la ecuación de Schrödinger

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

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
$\left|\alpha\right\rangle \to U\left|\alpha\right\rangle$	$\left|\alpha\right\rangle \to \left|\alpha\right\rangle$
$A \to A$	$A \to U^\dagger A U$
$\left|a'\right\rangle \to \left|a'\right\rangle$	$\left|a'\right\rangle \to U^\dagger\left|a'\right\rangle$

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

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle$$

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

$$\langle\alpha, t|A|\alpha, t\rangle = \langle\alpha, t|U^\dagger A U|\alpha, t\rangle = \begin{cases} \langle A\rangle^{(H)} \\ \langle A\rangle^{(S)} \end{cases}$$

de lo cual se deduce que

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

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.

$$(\langle\alpha, t_0|\, U^\dagger) A^{(S)} (U\,|\alpha, t_0\rangle) = \langle\alpha, t_0|U^\dagger A^{(S)} US|\alpha, t_0\rangle$$

pero a $t = t_0$ las representaciones coinciden,

$$|\alpha, t_0, t_0\rangle^{(S)} = |\alpha\rangle^{(H)}$$

La ecuación de Heisenberg

$$A^H = U^\dagger A^S U \qquad \frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A^S U + U^\dagger A^S \frac{\partial U}{\partial t} + U^\dagger A^S \frac{\partial U}{\partial t}$$

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} HU \,;\, \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{1}{-i\hbar} U^\dagger H$$

$$(HU)^\dagger = U^\dagger H^\dagger = U^\dagger H$$

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{-1}{i\hbar} U^\dagger H A^S U + \underbrace{U^\dagger \frac{\partial A^S}{\partial t} U}_{=0} + U^\dagger A^S \frac{1}{i\hbar} HU$$

pues A^S no depende explícitamente del tiempo

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\left(U^\dagger H U U^\dagger A^S U - U^\dagger A^S U U^\dagger H U\right) = \frac{1}{i\hbar}(-HA + AH)$$

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

$$A^S \left| a' \right\rangle^S = a' \left| a' \right\rangle^S ,$$

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

$$U^\dagger A^S U U^\dagger \left| a' \right\rangle^S = a' U^\dagger \left| a' \right\rangle^S$$

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

$$A^H (U^\dagger \left| a' \right\rangle^S) = a' (U^\dagger \left| a' \right\rangle^S)$$

$$\left| a', t \right\rangle^H = U^\dagger \left| a' \right\rangle^S \qquad \frac{\partial}{\partial t} \left(\left| a', t \right\rangle^H \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(U^\dagger \left| a' \right\rangle^S \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left| a', t \right\rangle^H = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger \left| a' \right\rangle^S = -\frac{1}{i\hbar} H U^\dagger \left| a' \right\rangle^S$$

puesto que recordemos, nota importante,

$$H^H = U^\dagger H^S U = U^\dagger U H^S = \mathbb{1} H^S = H^S$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left| a', t \right\rangle^H = -H \left| a', t \right\rangle^H$$

Podemos ver de otro modo la equivalencia

$$A^H = U^\dagger \sum_{a'} A^S \left| a' \right\rangle \left\langle a' \right| U = \sum_{a'} a' U^\dagger \left| a' \right\rangle \left\langle a' \right| U$$

pero

$$A^H = \sum_{a'} A^H \left| a', t \right\rangle \left\langle a', t \right| \equiv \sum_{a'}$$

$$A^H = \sum_{a'} a' \left| a', t \right\rangle \left\langle a', t \right| \equiv \sum_{a'} a' (U^\dagger \left| a' \right\rangle)(\left\langle a' \right| U)$$

$$\left| a', t \right\rangle = U^\dagger \left| a' \right\rangle^S$$

Coeficientes

Los coeficientes en Schrödinger y en Heisenberg son

$$C_{a'}^{S}(t) = ^{S}\langle a'|\alpha, t_0, t\rangle^{S} = ^{S}\langle a'|\left(U\,|\alpha, t_0\rangle\right) \qquad C_{a'}^{H}(t) = ^{H}\langle a', t|\alpha, t_0\rangle^{H} = \left(^{S}\langle a'|\,U\right)|\alpha, t_0\rangle$$

Entonces en Schrödinger es

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

mientras que en Heisenberg es

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

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

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

que es decir que es un operador que no conmuta a t diferentes

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

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

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 $[x(0), p(0)] = i\hbar$

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

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

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.