

Capítulo 1

Dinámica cuántica

Queremos ver la evolución temporal de los kets. Para ello utilizaremos cierta convención. Un ket dependerá del tiempo lo cual se indicará con

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

notación que refiere al estado α que partió en t_0 al tiempo t . Luego $|\alpha, t = t_0\rangle \equiv |\alpha\rangle$. Pictóricamente

$$|\alpha, t_0\rangle \xrightarrow[\text{evoluciona}]{} |\alpha, t_0, t\rangle$$

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

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

Entonces, un elemento de matriz $\langle b | U_{(t,t_0)} | a \rangle$ implica la probabilidad (amplitud) de que se tenga componente de b en el tiempo t del sistema que estamos considerando. El operador de evolución tendrá las propiedades

- Unitariedad

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

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

para conservación de la probabilidad. Tiene que ser unitario.

- Linealidad

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

- Límite a $\mathbb{1}$ (identidad)

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

o bien

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

Se propone entonces (infinitesimalmente) un

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

con Ω hermitico. 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

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

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{U_{(t+dt,t_0)} - U_{(t,t_0)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H U_{(t,t_0)}$$

y entonces

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

que es la ecuación para $U_{(t,t_0)}$. No podemos utilizar los métodos que usamos anteriormente porque en $U = N e^{i \int dt' H(t)/\hbar}$ [depende del tiempo?]. Supongmos que es $H \sim \mathbf{S} \cdot \mathbf{r}(\theta)$, se tiene en $t = 0$ es $\mathbf{r}(t) = \hat{z}$ y en $t = 5$ seg. es $\mathbf{r}(t) = \hat{y}$. Tenemos

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

que nos conduce 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

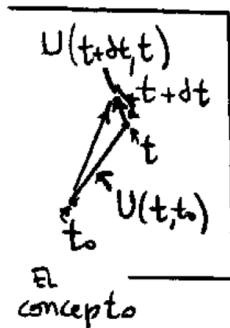


Figura 0.1

1.1 Casos sencillos de solución de $U(t, t_0)$

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

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

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

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

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

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

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

y esta es la serie de Dyson (del físico Freeman Dyson(.).) Esta es la solución formal general para el caso 3.

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 .

Para el caso 1 (pensamos una especie de serie de Taylor, que es un modo general de encarar este tipo de problemas de cosas no bien definidas) es simplemente

$$e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} = 1 - i\frac{H}{\hbar}(t-t_0) + \frac{(-i)^2}{2} \left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right)^2 + \dots + \frac{(-i)^n}{n!} \left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right)^n,$$

y por otra parte

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H - i\frac{H^2}{\hbar^2} \Delta t + \dots$$

y término a término coinciden; entonces probamos que la solución vale.

Para el caso 2, donde los hamiltonianos a diferentes tiempos conmutan entre sí, es decir $[H(t_1), H(t_2)] = 0$ la solución es

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

Esto no es una boludez. Al desarrollar Taylor la exponencial surge un problema

Si no conmutan los operadores no sé cómo armar el cuadrado.

$$A^2 = A(t)A(t'') \text{ o bien } A^2 = A(t'')A(t)$$

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

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.

1.1.1 Soluciones útiles

La solución que sirve es

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

La idea es escribir el $|\alpha\rangle$ del sistema y hallar un operador que conmute con el hamiltoniano y en cuya base escribo $|\alpha\rangle$,

$$|\alpha\rangle = \sum C_{a'} |a'\rangle \quad H |\alpha\rangle = \sum E_{a'} C_{a'} |a'\rangle$$

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

y trabajaremos con una solución útil ahora.

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

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

luego

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

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

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

Entonces operamos con el H para

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

y así (quiero saber cómo trabaja en el tiempo $|\alpha\rangle$), le aplico el operador evolución

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

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

o bien

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

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.

1.1.2 Evolución de valores de expectación

Recordemos primeramente que los autoestados no evolucionan. Luego

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

La fase es global y no tiene sentido físico (no cambia el valor de expectación, por ejemplo) Es considerar una autoestado [?]. La podemos descartar (setear igual a uno)

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

El valor de expectación de un operador respecto a un autoestado no varía. Se simplifican las fases y en el valor de expectación no me entero de ellas. Para un estado que no es necesariamente autoestado

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

donde $(E_{a''} - E_{a'})/\hbar$ es la llamada frecuencia de Bohr y vemos que la fase global depende de los índices de las sumatorias; entonces habrá términos de interferencia.

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

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

Sólo en el caso en que B conmute con H (B diagonal) se dará que la fase no interviene, porque pierdo una sumatoria merced a una delta de Kronecker que aparece.

1.1.3 Relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [A + B, C] &= [A, C] + [B, C] \\ [A, B] &= -[B, A] \\ [A, B \cdot C] &= B[A, C] + [A, B]C \end{aligned}$$

**Acá no es baka + caballo
puesto que no conmutan.**

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

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

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

a las que podemos sumar

$$\begin{aligned} [x, f(p)] &= i\hbar \frac{\partial f}{\partial p} & [p, G(x)] &= i\hbar \frac{\partial G}{\partial x} \\ [S_i, S_j] &= i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k \end{aligned}$$

1.1.4 La ecuación de Schrödinger

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

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

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

1.1.5 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
$ \alpha\rangle \rightarrow U \alpha\rangle$	$ \alpha\rangle \rightarrow \alpha\rangle$
$A \rightarrow A$	$A \rightarrow U^\dagger A U$
$ a'\rangle \rightarrow a'\rangle$	$ a'\rangle \rightarrow U^\dagger 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

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

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

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

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.

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

pero a $t = t_0$ las representaciones coinciden,

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

La ecuación de Heisenberg

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

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

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

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

pues A^S no depende explícitamente del tiempo

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

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

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

aplico un U^\dagger a ambos lados y entonces

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

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

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

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

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

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

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

Podemos ver de otro modo la equivalencia

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

pero

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

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

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

Coeficientes

Los coeficientes en Schrödinger y en Heisenberg son

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

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 toda magnitud que tiene sentido físico, pues $|c_a(t)|^2$ es la probabilidad.

1.1.6 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

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

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

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

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

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

y entonces el teorema de Ehrenfest es

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

los valores de expectación son iguales en ambas representaciones.