Mecânica Quântica

Dinâmica quântica

A C Tort[1]

[1]Departmento de Física Teórica
Instituto Física – Universidade Federal do Rio de Janeiro

24 de Maio de 2012

Evolução temporal do ket de estado

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle$$

O operador $U(t)$ deve preservar a norma do ket de estado:

$$\langle\psi(t) \mid \psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\, U^{\dagger}(t)\, U(t)\, |\psi(0)\rangle = \langle\psi(0) \mid \psi(0)\rangle$$

Portanto:

$$U^{\dagger}(t)\, U(t) = \mathrm{I}, \quad \rightarrow \quad U^{\dagger}(t) = U^{-1}(t)$$

O operador $U(t)$ deve ser <u>unitário</u>.

Translações infinitesimais no tempo

$$U = \mathrm{I} + \delta U\,(t)$$

Se $\Delta\, t \equiv \varepsilon$ é um intervalo de tempo infinitesimal:

$$\delta U\,(\varepsilon) = -\frac{i}{\hbar} H\,\varepsilon$$

onde H, como veremos, é o operador associado com a energia do sistema e, por enquanto, independente do tempo. Portanto,

$$U\,(\varepsilon) = \mathrm{I} - \frac{i}{\hbar} H\,\varepsilon$$

Por outro lado,

$$U^{\dagger}\,(\varepsilon) = \mathrm{I} + \frac{i}{\hbar} H^{\dagger}\,\varepsilon$$

$$U^\dagger(\varepsilon)\, U(\varepsilon) = \left(\mathrm{I} + \frac{i}{\hbar} H^\dagger \varepsilon\right)\left(\mathrm{I} - \frac{i}{\hbar} H \varepsilon\right) \approx \mathrm{I} - \frac{i}{\hbar}\left(H - H^\dagger\right) \varepsilon = \mathrm{I}$$

Segue que $H = H^\dagger$, o operador associado com a translação temporal deve ser hermitiano (note a importância do fator i).

Translação temporal finita. Escrevendo $t = N\,\varepsilon$:

$$U(t) = \lim_{N\to\infty}\left(\mathrm{I} - \frac{i}{\hbar} H \frac{t}{N}\right)^N = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H\, t\right)$$

A exponencial de um operador significa:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} H\, t\right) = \mathrm{I} + \frac{1}{1!}\left(-\frac{i}{\hbar} H\, t\right) + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i}{\hbar} H\, t\right)^2 + \frac{1}{3!}\left(-\frac{i}{\hbar} H\, t\right)^3 + \cdots$$

O operador H, o hamiltoniano, está associado com a energia do sistema quântico, isto é:

$$H\,|E\rangle = E\,|E\rangle$$

logo,

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\,t\right)|E\rangle = \left[\mathrm{I} + \frac{1}{1!}\left(-\frac{i}{\hbar}H\,t\right) + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i}{\hbar}H\,t\right)^2 + \cdots\right]|E\rangle$$

ou ainda:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\,t\right)|E\rangle = \left[\mathrm{I} + \frac{1}{1!}\left(-\frac{i}{\hbar}E\,t\right) + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i}{\hbar}E\,t\right)^2 + \cdots\right]|E\rangle$$

Portanto:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\,t\right)|E\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E\,t\right)|E\rangle$$

Equação de movimento para $U(t)$

O operador $U(t)$ obedece à relação:

$$U(t+\varepsilon) = U(\varepsilon)\, U(t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H\varepsilon\right) U(t)$$

Segue que:

$$U(t+\varepsilon) - U(t) = -\frac{i}{\hbar} HU(t)\,\varepsilon$$

ou ainda:

$$\frac{U(t+\varepsilon) - U(t)}{\varepsilon} = -\frac{i}{\hbar} H\, U(t)$$

No limite $\varepsilon \to 0$,

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = H\, U(t)$$

cuja solução é...

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

se o hamiltoniano H for independente do tempo!

$$[H, U(t)] = 0$$

(exercício!) segue que:

$$\langle\psi\,(t)|\, H\, |\psi\,(t)\rangle = \langle\psi\,(0)|\, U^{\dagger}(t)\, H\, U(t)\, |\psi\,(0)\rangle = \langle\psi\,(0)|\, H\, |\psi\,(0)\rangle$$

O operador H tem dimensões de energia e, de fato, representa a energia do sistema quântica:

$$\langle E\rangle = \langle\psi\,(t)|\, H\, |\psi\,(t)\rangle$$

A equação de Schrödinger

Considere:

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = H\,U(t)$$

Multiplique ambos os lados desta equação por $|\psi(0)\rangle$:

$$i\hbar \frac{d(U(t)\,|\psi(0)\rangle)}{dt} = H\,(U(t)\,|\psi(0)\rangle)$$

Lembrando que $|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle$ e que H não depende do tempo:

$$\boxed{i\hbar \frac{d\,|\psi(t)\rangle}{dt} = H\,|\psi(t)\rangle}$$

cuja solução é...(se H não depender do tempo...)

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H\,t\right)\,|\psi(0)\rangle$$

FIM DA AULA 8

Próxima aula:

$\boxed{\text{Aplicações da dinâmica quântica}}$