Capítulo 7

Representação de Heisenberg e Simetrias

Quando apresentamos os postulados da Mecânica Quântica definimos de forma arbitrária que os estados evoluem no tempo ao passo que os observáveis são constantes. Esta maneira de analisar a evolucção temporal é chamada de *repre sentação de Schrödinger* . Neste capítulo vamos mostrar que podemos reformular a Mecânica Quântica de forma a ter os estados constantes no tempo enquanto que os observáveis apresentam uma dependência temporal, o que define a *representação de Heisenberg* . Aproveitando o formalismo da *representaccão de Heisenberg* nós vamos também analisar o conceito de simetria e leis de conservação em Mecânica Quântica.

7.1 Aquecimento Matemático

Uma ferramenta que utilizaremos bastante neste cap'ıtulo é a exponencial de um operador. Vejamos sua definição e métodos de cálculo.

7.1.1 Exponenciando um operador

Se A é um operador em um espaço de Hilbert podemos definir o operador

$$e^{tA} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n A^n}{n!} \quad . \tag{7.1}$$

Evitando discutir a questão da convergência da soma infinita no lado direito de (7.1) pode-se demonstrar as seguintes propriedades:

$$e^{tA} e^{sA} = e^{(t+s)A} \ , \tag{7.2}$$

e

$$\frac{d}{dt} e^{tA} = A e^{tA} = e^{tA} A \quad , \tag{7.3}$$

ou seja, o operador e^{tA} herda através de (7.1) propriedades análogas às da função e^{ta}, onde a é um número.

Há que se lembrar porém que e^{tA} é um operador o que por exemplo implica que em geral

$$e^{tA} e^{sB} \neq e^{sB+tA} \tag{7.4}$$

$$e^{tA} e^{sB} \neq e^{sB} e^{tA} \tag{7.5}$$

a menos que A e B comutem (veja exercício 1).

7.1.2 Como calcular e^{tA}

O fato fundamental é o seguinte: se φ é autovetor de A com autovalor a

$$A\varphi = a\varphi$$

então

$$\begin{aligned} A^2 \varphi &= a^2 \varphi \quad , \\ A^n \varphi &= a^n \varphi \end{aligned}$$

para todo n.[1]

[1] Por que?

Portanto

$$e^{At}\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} A^n \varphi = e^{ta}\varphi \tag{7.6}$$

i.e. φ é autovetor de e^{tA} com autovalor e^{ta}.

Em particular se A admitir uma base ortonormal de autovetores (Por exemplo se A for hermiteano)

$$A\varphi_n = a_n\varphi_n \quad . \quad \langle \varphi_r | \varphi_n \rangle = \delta_{rn}$$

então

$$e^{tA}\varphi_n = e^{tan}\varphi_n \quad .$$

Portanto se ψ é um vetor arbitrário podemos calcular $e^{tA}\psi$ da seguinte forma:

$$\psi = \sum_n C_n\varphi_n \quad . \quad C_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle$$

$$e^{tA}\psi = \sum_n c_n e^{tan}\varphi_n \tag{7.7}$$

onde usamos a linearidade de e^{tA}.

Se A^* for o operador hermiteano conjugado de A, i.e. $\langle A\psi | \phi \rangle = \langle \psi | A^*\Phi \rangle$ então da definição segue $(e^{tA})^* = e^{tA^*}$, ?

7.2 O operador de evolução temporal

O operador

$$U(t) = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \tag{7.8}$$

como definido acima, satisfaz

$$\frac{dU(t)}{dt} = \frac{H}{i\hbar}U(t) \tag{7.9}$$

portanto o vetor

$$\psi_t = U(t)\psi \tag{7.10}$$

satisfaz à equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{d\psi_t}{dt} = H\psi_t \tag{7.11}$$

com condição inicial

$$\psi_0 = \psi \tag{7.12}$$

Da discussão do parágrafo 2 acima concluímos que, se:

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n \quad .\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \delta rn$$

i.e. φ_n são os autovalores normalizados de e, e se

$$\psi = \sum C_n\varphi_n$$

então

$$\begin{aligned} \psi_t &= e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}\psi = U(t)\psi = \\ &= \sum C_n e^{-i\frac{Ent}{\hbar}\varphi_n} \end{aligned} \tag{7.13}$$

que é a nossa velha conhecida solução da equação de Schrödinger, (9),(10).

Como $H = H^*$ (i.e. H é hermiteano) podemos calcular

$$U(t)^* = (e^{-i\frac{Ht}{\hbar}})^* = e^{+\frac{iHt}{\hbar}} = U(-t)$$

Portanto, o operador $U(t)$ é unitário:

$$U(t)^*U(t) = U(t)U^*(t) = I$$

Como consequência

$$\langle\psi_t|\psi_t\rangle = \langle U(t)\psi_0|U(t)\psi_0\rangle = \langle\psi_0|\psi_i\rangle \quad .$$

7.3 Representação de Heisenberg

Na formulação que adotamos até agora um sistema quântico com Hamiltoniana H, que no instante zero está no estado ψ_o, será determinado no instante t pelo vetor $\psi_t = U(t)\psi_0 = e^{-i\frac{Ht}{\hbar\psi_0}}$. O valor esperado de um observável A no instante t é dado por $\langle\psi_t|A\psi_t\rangle$, que pode ser calculado $\langle\psi_t|A\psi_t\rangle = \langle e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}\psi_0|Ae^{-i\frac{Ht}{\hbar}}\psi_o\rangle$.

Se definirmos então o operador $A(t)$ através de:

$$A(t) = e^{+i\frac{Ht}{\hbar}} A e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \tag{7.14}$$

vemos que

$$\langle\psi|a\psi\rangle - \langle\psi|A(t)\psi\rangle$$

i.e. se usarmos o operador evoluído temporalmente A(t) podemos calcular valores esperados no estado inicial.

Note que se o operador A comuta com H então

$$A(t) = e^{+i\frac{Ht}{\hbar}} A e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} = A(o) = A$$

i.e. $A(t)$ é constante no tempo.
Em particular

$$H(t) = H(0) = H$$

- Equações de Movimento de Heisenberg

Da definição

$$A(t) = e^{i\frac{Ht}{\hbar}} A e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}$$

segue

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dA(t)}{dt} &= -He^{i\frac{Ht}{\hbar}} A e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} + e^{i\frac{Ht}{\hbar}} A e^{-\frac{Ht}{\hbar}} H \\ i\hbar\frac{dA(t)}{dt} &= [A(t), H] \end{aligned} \tag{7.15}$$

que é a equação de movimento de Heisenberg para o operador $A(t)$, substituindo a equação de Schrödinger para o vetor de estado ψ_t.

A equação (13) deve ser comparada à equação correspondente em Mecânica Clássica

$$\frac{d}{dt}A(q(t), P(t)) = \{A, H\}(q(t), P(t)) \tag{7.16}$$

onde $q(t), P(t)$ é a trajetória clássica no espacço de fase

$$\dot{q}(t) = \frac{\partial H}{\partial P} \cdot \dot{P}(t) = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

e $A(q,P)$ é um observável.

A comparação entre (13) e (14) nos remete mais uma vezs à correspondência

$$\{A,B\} \to \frac{i}{i\hbar}[A,B]$$

entre a mecânica clássica e a mecânica quântica.

Para se calcular as equações de Heisenberg a seguinte observação é importante:

Se $C = AB$ então

$$C(t) = e^{+i\frac{Ht}{\hbar}} ABe^{-\frac{Ht}{\hbar}} = e^{+i\frac{tH}{\hbar}} Ae^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \cdot e^{+i\frac{Ht}{\hbar}} Be^{-i\frac{Ht}{\hbar}} = A(t;B(t))$$

Em particular se

$$[A,B] = C$$

então

$$[A(t),B(t)] = C(t)$$

Exemplos:

$[P,q] = \frac{\hbar}{i} \Rightarrow [P(t),q(t)] = \frac{\hbar}{i}$
$[P,V(q)] = \frac{\hbar}{i}V'(q)$ então $[P(t),V(q(t))] = \frac{\hbar}{i}V'(q(t))$
$[\sigma_1,\sigma_2] = 2i\sigma_3$

Para os observáveis $q(t)$ e $P(t)$ de um sistema com Hamiltoniana

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(q)$$

as equações de Heisenberg fornecem:

$$\dot{q}(t) = \frac{P(t)}{m}$$

$$\dot{P}(t) = -V'(q(t))$$

equações formalmente idênticas às de Hamilton na Mecânica Clássica.

Em alguns casos, assim como em Mecânica Clássica, elas podem ser integradas explicitamente.

Exemplos:

1) Partícula livre $\left(H = \frac{P^2}{2m}\right)$

$$\dot{q}(t) = \frac{P(t)}{m} \cdot \dot{P}(t) = 0$$

Da segunda equação

$$P(t) = P \qquad \text{(constante)}$$

e portanto

$$\dot{q}(t) = \frac{P}{m}$$

de onde concluímos que

$$q(t) = q + \frac{P}{M}t$$

$$P(t) = P$$

2) Oscilador Harmônico

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

$$\dot{q}(t) = \frac{P(t)}{m} e \dot{P}(t) = -m\omega^2 q(t)$$

(iguais às equações clássicas)

Solução:

$$\begin{aligned} q(t) &= (\cos\omega t)q + (\text{sen}\omega t)\frac{P}{m\omega} \\ P(t) &= -m\omega(\text{sen}\omega t)q + \cos\omega t p \quad . \end{aligned}$$

Alternativamente para os operadores

$$\begin{aligned} a &= \frac{i}{(\hbar\omega)^{1/2}}\left(\sqrt{\frac{m}{2}}q\omega + \frac{iP}{\sqrt{2m}}\right) \\ a^* &= \frac{1}{(\hbar\omega)^{1/2}}\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\omega q - \frac{iP}{\sqrt{2m}}\right) \\ H &= \hbar\omega\left(a^* a + \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

De $[a, a^*] = 1$, segue

$$\begin{aligned} [H, a] &= -\hbar\omega a \\ [H, a^*] &= \hbar\omega a^* \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \dot{a}(t) &= \frac{1}{i\hbar}[a(t), H] = -i\omega a(t) \\ \dot{a^*}(t) &= +i\omega a^*(t) \end{aligned}$$

cujas soluções são

$$\begin{aligned} a(t) &= e^{-i\omega t} a \\ a^*(t) &= e^{+i\omega t} a \end{aligned}$$

(Compare com as soluções clássicas).

3) Sistemas de níveis

Se por exemplo

$$H = B\sigma_3$$

então

$$\begin{aligned} \dot{\sigma_3}(t) &= \frac{1}{i\hbar}[\sigma_3(t), H(t)] = 0 \\ \dot{\sigma_1}(t) &= \frac{1}{\hbar}B[\sigma_1(t), \sigma_3(t)] = -\frac{2B}{\hbar}\sigma_2(t) \\ \dot{\sigma_2}(t) &= \frac{B}{i\hbar}[\sigma_2(t), \sigma_3(t)] = \frac{2B}{\hbar}\sigma_1(t) \end{aligned}$$

que pode ser integrada (como?)

$$\begin{aligned} \sigma_1(t) &= \left(\cos\frac{2B}{\hbar}t\right)\sigma_1 - \left(\mathrm{sen}\frac{2B}{\hbar}t\right)\sigma_2 \\ \sigma_2(t) &= \left(\mathrm{sen}\frac{2B}{\hbar}t\right)\sigma_1 + \left(\cos\frac{2B}{\hbar}t\right)\sigma_2 \end{aligned}$$

Alternativamente podemos introduzir ?

$$\sigma_+ = \sigma_1 + i\sigma_2$$

$$\sigma_- = \sigma_1 - i\sigma_2$$

com

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_+(t) &= 1\left(\frac{2B}{\hbar}\right)\sigma_+(t) \\ \dot{\sigma}_-(t) &= -i\left(\frac{2B}{\hbar}\right)\sigma_-(t) \end{aligned}$$

com soluções

$$\sigma_+(t) = e^{i\omega t}\sigma_+ \qquad \omega = \tfrac{2B}{\hbar}$$

$$\sigma_-(t) = e^{-i\omega t}\sigma_-$$

Exercícios:
1) Calcule $e^{t\sigma_1} = \cos ht + \sigma_1, \mathrm{sen} ht, e^{t\sigma_2}$ e $e^{t\sigma_3}$ e compare $e^{t\sigma_1}e^{\sigma_2}, e^{t\sigma_2}e^{s\sigma_1}, e^{s\sigma_1+t\sigma_2}$.
Sugestão — use a definição de exponencial de um operador e o fato de que $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1$.
2) Integre as equações de Heisenberg para as Halmitonianas:
a) $H = \frac{P^2}{2m} - eEq$
b) $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}n\omega^2 q^2 - eEq$.
Em cada 1 dos casos calcule o comutador $[q(t), q(0)]$ e discuta as implicações do ponto de vista do princípio da incerteza.