Teoría cuántica de fenómenos dependientes del tiempo (teoría de perturbaciones y desarrollo de Dyson)

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires FCEN-UBA

El problema dependiente del tiempo

Consideremos la ecuación de Schrödinger en el caso dependiente del tiempo. Es decir, consideremos un hamiltoniano de la forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t).$$

Típicamente, consideraremos el caso en el cual $\mathcal{H}_1$ contribuye a la parte del potencial.

El problema dependiente del tiempo es mucho más difícil. De hecho, este caso puede ser resuelto (integrado) exactamente en muy pocos casos particulares. No obstante, es un problema de mucha importancia, tanto desde el punto de vista teórico como del de las aplicaciones que el mismo tiene.

Para poder abordar el problema uno recurre, genéricamente, a métodos de aproximación, similares a los métodos perturbativos que se vienen discutiendo. Es decir, uno procede pensando el problema de interés como una perturbación de un problema distinto que sí sabe resolver (el correspondiente al problma descrito por el hamiltoniano $\mathcal{H}_0$).

Consideremos el estado $|\varphi(t)\rangle$, que corresponde a la evolución temporal de un estado que a tiempo $t = 0$ se encuentra en un estado $|\varphi_n\rangle$, siendo $|\varphi_n\rangle$ un autoestado (normalizado) del hamiltoniano $\mathcal{H}_0$. Es decir, consideremos

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |\varphi_n\rangle .$$

Si $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$, es decir si $\mathcal{H}_1 = 0$, tenemos que la probabilidad $P_n(t)$, correspondiente a la probabilidad de que al tiempo t el estado del sistema se encuentre en el estado original, está dada, como sabemos, por $P_n(t) = 1$. Esto es debido a que

$$P_n(t) = |\langle\varphi_n|\varphi(t)\rangle|^2 = \left|e^{-iE_n t/\hbar}\right|^2 |\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle|^2 = 1.$$

Encendamos ahora la parte dependiente del tiempo del hamiltoniano. Es decir, consideremos ahora $\mathcal{H}_1 \neq 0$. Ahora, dado que el estado inicial no es necesariamente autoestado del hamiltoniano completo, podemos esperar que el estado se mezcle con otros autoestados de $\mathcal{H}_0$ a medida que el tiempo avanza. Para estudiar esta mezcla, esta evolución, expandamos el estado a tiempo arbitrario t en la base de autoestados de $\mathcal{H}_0$. Esto es, escribamos

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_m d_m(t) |\varphi_m\rangle ,$$

donde $d_m(t)$ son coeficientes dependientes del tiempo que, para cada valor de t, corresponden a los componentes del estado escrito en la base $\{|\varphi_m\rangle\}$. Sabemos, además, que $\sum_m |d_m(t)|^2 = 1$.

Ahora, la probabilidad de, a tiempo t, tener un dado estado $|\varphi_n\rangle$ está dada por

$$\boxed{P_n(t) = |\langle\varphi_n|\varphi(t)\rangle|^2 = |\sum_m d_m(t)\,\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle|^2 = |\sum_m d_m(t)\delta_{n,m}|^2 = |d_n(t)|^2 .}$$

Esto nos enseña el significado físico de los coeficientes $d_n(t)$. Éstos dan la probabilidad de que un estado se encuentre a tiempo t en el autoestado $|\varphi_n\rangle$.

Como decíamos, la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo permite abordar el siguiente problema: Supongamos un sistema que inicialmente está en un estado inicial $|\varphi_i\rangle$, que es autoestado de $\mathcal{H}_0$. Supongamos que luego de un tiempo realizamos una medición para ver si el estado está en un dado autoestado $|\varphi_f\rangle$ de $\mathcal{H}_0$. ¿Cuál es la probabilidad asociada a una medición tal?

Para responder a esta pregunta, comencemos considerando la ecuación de Schrödinger

$$\mathcal{H}\,|\varphi(t)\rangle = (\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1(t))\,|\varphi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\varphi(t)\rangle\,.$$

Expandamos, pues, el estado $|\varphi(t)\rangle$ en la base de autoestados de $\mathcal{H}_0$. Uno siempre puede hacer esto. Así, escribamos

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_m d_m(t)\,|\varphi_m\rangle\,.$$

Pero, por comodidad, renombremos los coeficientes de la siguiente manera $c_m(t) = e^{iE_m t/\hbar} d_m(t)$. Es decir,

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_m e^{-iE_m t/\hbar} c_m(t)\,|\varphi_m\rangle\,.$$

Dado que $|e^{-iE_n t/\hbar}|^2 = 1$, tenemos que la probabilidad de tener un estado $|\varphi_m\rangle$ a tiempo t está dada por

$$\boxed{P_n(t) = |d_n(t)|^2 = |e^{-iE_n t/\hbar}|^2\,|c_n(t)|^2 = |c_n(t)|^2\,,}$$

de modo que la interpretación de los $c_n(t)$ es la misma que la de los coeficientes $d_n(t)$.

Pidiendo que se satisfaga la ecuación de Schrödinger sobre el estado, escrito éste en la base que acabamos de considerar, tenemos

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}\sum_m c_m(t)e^{-iE_nt/\hbar}\left|\varphi_m\right\rangle &= \sum_m c_m(t)e^{-iE_mt/\hbar}\mathcal{H}_0\left|\varphi_m\right\rangle + \sum_m c_m(t)e^{-iE_mt/\hbar}\mathcal{H}_1(t)\left|\varphi_m\right\rangle = \\
&= \cancel{\sum_m c_m(t)e^{-iE_mt/\hbar}E_m\left|\varphi_m\right\rangle} + \sum_m c_m(t)e^{-iE_mt/\hbar}\mathcal{H}_1(t)\left|\varphi_m\right\rangle =
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_m c_m(t)e^{-iE_mt/\hbar}\left|\varphi_m\right\rangle = \\
&= \cancel{\sum_m c_m(t)e^{-iE_mt/\hbar}E_m\left|\varphi_m\right\rangle} + i\hbar\sum_m e^{-iE_mt/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}c_m(t)\left|\varphi_m\right\rangle .
\end{aligned}
$$

Esto es

$$
\sum_m c_m(t)e^{-iE_mt/\hbar}\mathcal{H}_1(t)\left|\varphi_m\right\rangle = i\hbar\sum_m e^{-iE_mt/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}c_m(t)\left|\varphi_m\right\rangle .
$$

Multiplicando a izquierda por el *bra* $\left\langle\varphi_n\right|$ encontramos lo siguiente

$$
\sum_m c_m(t)e^{-iE_nt/\hbar}\left\langle\varphi_n\right|\mathcal{H}_1(t)\left|\varphi_m\right\rangle = i\hbar\sum_m e^{-iE_nt/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}c_m(t)\left\langle\varphi_n|\varphi_m\right\rangle = i\hbar e^{-iE_nt/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}c_n(t).
$$

Ahora bien, hasta ahora no consideramos en absoluto ninguna aproximación. No debemos confundirnos con el hecho de que hayamos elegido la base de autoestados de $\mathcal{H}_0$ como la base a representar los estados; esto no es más que una elección conveniente.

Consideremos ahora sí la aproximación: Consideremos que la parte del hamiltoniano que depende del tiempo, $\mathcal{H}_1(t)$, es pequeño respecto a $\mathcal{H}_0$. Ya consideramos esta aproximación en las clases anteriores; la novedad ahora es la dependencia con t. Pensando un poco en esta dependencia con el tiempo, advertimos que si $\mathcal{H}_1$ es pequeño en comparación con $\mathcal{H}_0$, siempre que uno considere una excursión no demasiado prolongada en el tiempo, se espera que si un estado parte inicialmente de un autoestado del hamiltoniano parcial $\mathcal{H}_0$ -llamemos a este estado inicial $|\varphi_i\rangle$- entonces el coeficiente $c_i(t)$ que corresponde a la proyección del estado sobre el estado inicial seguirá valiendo aproximadamente $c_i(t) \simeq 1$, mientras que los otros coeficientes seguirán, en la misma aproximación, valiendo $c_{n\neq i}(t) \simeq 0$. Entonces, considerando esta aproximación, la ecuación a la que arribamos arriba nos dice

$$\frac{\partial}{\partial t} c_f(t) \simeq \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_f | \mathcal{H}_1(t) | \varphi_i \rangle \, e^{i(E_f - E_i)t/\hbar}.$$

Integrando esta ecuación, obtenemos

$$\boxed{c_f(t) \simeq \frac{1}{i\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \, \langle \varphi_f | \mathcal{H}_1(t) | \varphi_i \rangle \, e^{i(E_f - E_i)t/\hbar}.}$$

Esta es una ecuación fundamental de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo a primer orden.

Este resultado, en particular, nos permite calcular la probabilidad de transición de un estado $|\varphi_i\rangle$ a un estado $|\varphi_f\rangle$. Llamemos a esta probabilidad $P_{(f\to i)} = |c_f(t)|^2$.

Este resultado, en particular, nos permite calcular la probabilidad de transición de un estado $|\varphi_i\rangle$ a un estado $|\varphi_f\rangle$. Llamemos a esta probabilidad $P_{(f\to i)} = |c_f(t)|^2$.

Asumamos ahora que la parte del hamiltoniano que depende del tiempo admite ser escrita de la forma siguiente

$$\mathcal{H}_1(t) = V \cdot f(t),$$

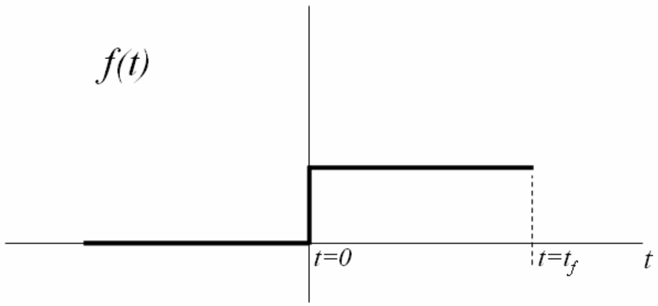
donde $f(t)$ es una función del timpo, mientras qye V es un operador independiente del tiempo. No todo hamiltoniano admite ser escrito de una manera tal, pero ciertamente es un caso que encuentra muchas aplicaciones.

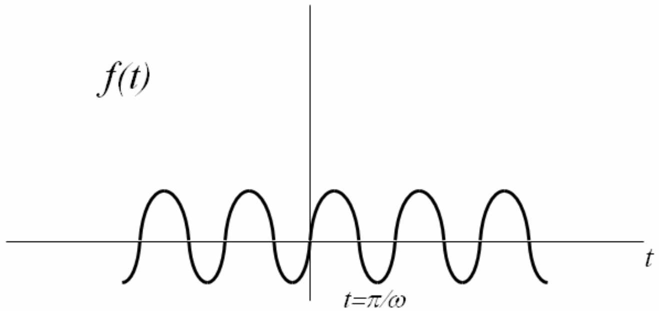
En un caso tal, la probabilidad $P_{(f\to i)}$ adopta la forma

$$\boxed{P_{(f\to i)} \simeq \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\varphi_f|\,V\,|\varphi_i\rangle\right|^2 \left|\int_{t_1}^{t_2} dt\ f(t)e^{i(E_f-E_i)t/\hbar}\right|^2 .}$$

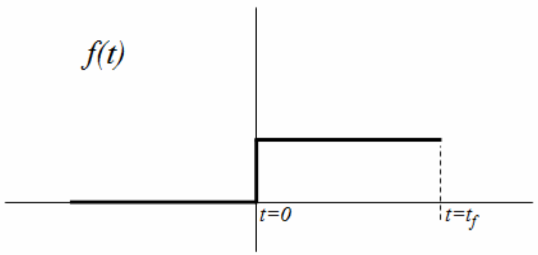
Esto es interesante porque nos permite aislar la información de la dependencia temporal separando a ésta del detalle operatorial del elemento de matriz $V_{if} = \langle\varphi_f|\,V\,|\varphi_i\rangle$.

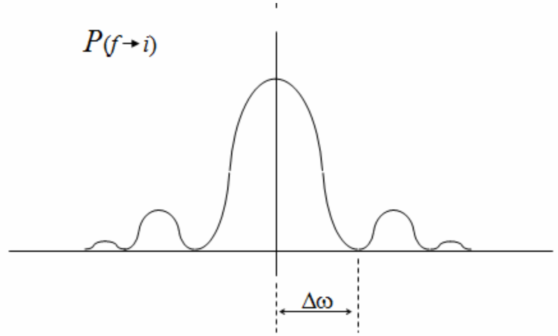
Casos de interés son, por ejemplo,





Consideremos, por ejemplo, una función tipo escalón; es decir





Entonces tenemos

$$c_f(t) \simeq \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle \int_0^{t_2} dt \; e^{i(E_f - E_i)t/\hbar}.$$

Esta integral nos da como resultado

$$c_f(t) \simeq \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle \frac{\hbar}{i(E_f - E_i)} \left(e^{i(E_f - E_i)t_f/\hbar} - 1 \right) = \frac{\langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle}{(E_f - E_i)} \left(1 - e^{i(E_f - E_i)t_f/\hbar} \right).$$

Identifiquemos, pues, la frecuencia característica del problema $\Delta\omega = (E_f - E_i)/\hbar$. En términos de esta cantidad, la probabilidad de transición de un estado a otro está dada por

$$P_{(f \to i)} = |c_f(t)|^2 \simeq \left| \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle \right|^2 \frac{\sin^2(\Delta\omega t_f/2)}{\hbar^2(\Delta\omega/2)^2}.$$

$$P_{(f\to i)} = |c_f(t)|^2 \simeq \left|\langle\varphi_f|\, V\, |\varphi_i\rangle\right|^2 \frac{\sin^2(\Delta\omega t_f/2)}{\hbar^2(\Delta\omega/2)^2}.$$

O bien, en téminos de las energías de los estados

$$P_{(f\to i)} = |c_f(t)|^2 \simeq \frac{4\left|\langle\varphi_f|\, V\, |\varphi_i\rangle\right|^2}{(E_f - E_i)^2} \sin^2\left(\frac{(E_f - E_i)t_f}{2\hbar}\right).$$

Si expandimos esto a primer orden tenemos

$$P_{(f\to i)} = |c_f(t)|^2 \simeq \left|\langle\varphi_f|\, V\, |\varphi_i\rangle\right|^2 \frac{(\Delta t)^2}{\hbar^2},$$

donde llamamos $\Delta t = t_f - t_i$.

Notemos, además, que el ancho la campana del gráfico nos da precisamente $\Delta\omega = \Delta t/2$. Esto nos lleva a una relación que puede sonarnos familiar; a saber

$$\frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{1}{2\Delta t}$$

aunque esta vez en un contexto y un problema particular.

De esta relación y de la la expresión de arriba también obtenemos que

$$\boxed{\frac{\Delta P_{(f\to i)}}{\Delta t} = |c_f(t)|^2 \simeq \left|\langle\varphi_f|\, V\, |\varphi_i\rangle\right|^2 \frac{\Delta t}{\hbar^2} = \frac{1}{2\hbar}\left|\langle\varphi_f|\, V\, |\varphi_i\rangle\right|^2 \frac{1}{\Delta E},}$$

Otro problema de interés es considerar

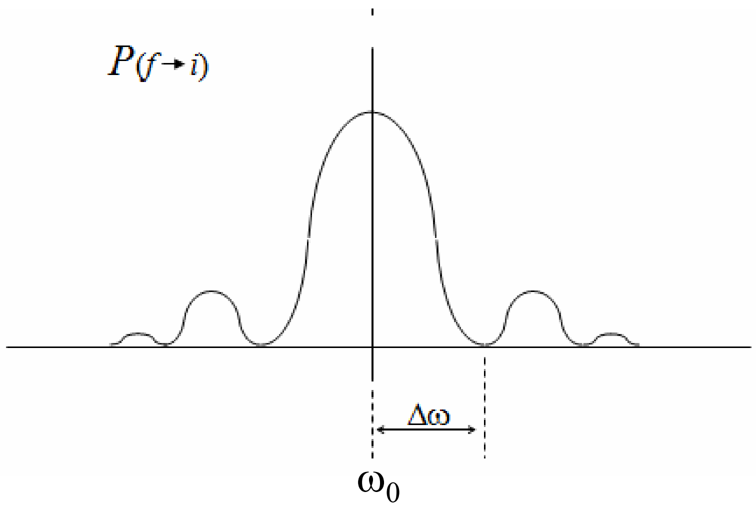
$$\mathcal{H}_1(t) = V \cdot \cos(\omega_f t)$$

el cual, presenta una frecuencia característica *de forzado* dada por ω_f.

Es sencillo comprobar siguiendo los pasos que describimos anteriormente que la probabilidad de transición para los casos en los cuales $E_f > E_i$ y valores tales que $\omega_f \simeq \Delta\omega$ está dada por

$$P_{(f\to i)} \simeq \frac{\left|\langle\varphi_f\right| V \left|\varphi_i\rangle\right|^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2((\Delta\omega - \omega_0)t_f/2)}{((\Delta\omega - \omega_0)/2)^2}.$$

Esto nos enseña un fenómeno analogo al fenómeno al de *resonancia* pero en el caso de la mecánica cuántica.



Habíamos discutido la diferencia entre el llamado *picture de Schrödinger* y el *picture de Heisenberg*. Discutiremos ahora un *picture* que podríamos llamar intermedio, híbrido, que resulta de suma utilidad para abordar problemas de perturbaciones dependientes del tiempo. Seguiremos el mismo camino que antes, con la filosofía de abordar el problema de un hamiltoniano dependiente del tiempo $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t)$ como una perturbación del problema descrito en término de los autoestados del hamiltoniano parcial dominante $\mathcal{H}_0$ que sí sabemos resolver.

Definimos, así, un picture intermedio, llamado *picture de interacción*, el que conecta estados que evolucionan sólo con el hamiltoniano de interacción. Definimos así el estado $|\varphi_I(t)\rangle$ en el *picture de interacción* de la siguiente manera

$$|\varphi_I(t)\rangle = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\varphi(t)\rangle .$$

La ecuación de Schrödinger nos dice

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_I(t)\rangle &= i\hbar \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\varphi(t)\rangle + e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = \\
&= \cancel{-\mathcal{H}_0 |\varphi_I(t)\rangle} + e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} (\cancel{\mathcal{H}_0} + \mathcal{H}_1) e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\varphi_I(t)\rangle = \\
&= e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \mathcal{H}_1 e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\varphi_I(t)\rangle
\end{aligned}$$

Esto nos lleva a definir

$$\mathcal{H}_1(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \mathcal{H}_1 e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar}$$

de forma tal que se tiene

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_I(t)\rangle = \mathcal{H}_1(t) |\varphi_I(t)\rangle .}$$

Esta ecuación puede ser integrada, y de manera iterativa se puede obtener el operador de evolución temporal en el picture de interacción, el cual nombraremos $U_I(t, t_0)$ y que viene a realizar la evolución

$$|\varphi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0) \, |\varphi_I(t_0)\rangle \, .$$

La dificultad adicional en este caso es que el hamiltoniano de interacción $\mathcal{H}_1(t)$ depende explícitamente del tiempo. Aún así, puede mostrarse en pocos pasos que $U_I(t, t_0)$ toma la forma

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} d\tau \mathcal{H}_1(\tau) + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{t} d\tau_2 T[\mathcal{H}_1(\tau_1) \mathcal{H}_1(\tau_2)] + ... + \\ & ... + \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^{t} d\tau_1 ... \int_{t_0}^{t} d\tau_n T[\mathcal{H}_1(\tau_1) ... \mathcal{H}_1(\tau_n)] + ... \end{aligned}$$

donde el operador lineal T, llamado operado de orden temporal, está definido de forma tal que actúa de la siguiente manera

$$\begin{aligned} T[A_1(t_1) A_2(t_2)] &= A_1(t_1) A_2(t_2), \qquad t_1 > t_2, \\ T[A_1(t_1) A_2(t_2)] &= A_2(t_2) A_1(t_1), \qquad t_1 > t_2. \end{aligned}$$

Una forma sucinta de escribir el operador de evolución temporal de arriba es, pues, la siguiente

$$\boxed{U_I(t, t_0) = T \left[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}_1(\tau)d\tau} \right].}$$

Este desarrollo funcional del operador de evolución temporal en el picture de interacción en término de integrales temporales que se alternan y encajan recibe el nombre de *desarrollo de Dyson* y es de suma importancia en muchas áreas de la física, por cuanto los fenómenos dependientes del tiempo y sus análisis perturbativo lo son. En particular, esto nos permitirá, dentro de algunas clases, abordar problemas de *scattering* en mecánica cuántica.