Física Teórica 2 - Guía 5: Dinámica: Cuadro de Heisenberg, evolución de la Matriz densidad

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

10 de mayo de 2022

1. Breve resumen: Dinámica, representaciones de Schrödinger y Heisenberg

En Mecánica Clásica, el Hamiltoniano H es el generador de la transformación canónica infinitesimal que lleva a las variables $\{\mathbf{r}, \mathbf{p}\}$ de un tiempo t a un tiempo posterior $t + \delta t$. En Mecánica Cuántica, la evolución temporal de un sistema dado se obtiene usando el operador evolución $U(t, 0)$, que es un operador unitario, $U(t, 0)U(t, 0)^\dagger = U(t, 0)^\dagger U(t, 0) = \mathbb{I}$. El generador infinitesimal de estas transformaciones es del mismo modo, el Hamiltoniano.

En la representación de Schrödinger, los estados son los que evolucionan:

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

$U(t, 0)$ satisface la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, 0) = H U(t, 0)$$

que lleva inmediatamente a la de Schrödinger para el vector de estado

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$$

Si H no depende del tiempo, el operador de evolución se expresa

$$U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}$$

El valor medio de un observable A se obtiene en este esquema de la forma usual

$$\langle A \rangle_{|\Psi(t)\rangle} = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | U(t, 0)^\dagger A U(t, 0) | \Psi(0) \rangle$$

Esta última ecuación nos sirve para introducir una representación en la cual los operadores evolucionan, y no el estado del sistema. En la nueva representación tenemos al operador $A_H(t)$ definido por

$$A_H(t) = U(t, 0)^\dagger A_H(0) U(t, 0)$$

de la cual podemos obtener la ecuación de Heisenberg

$$i\hbar \dot{A}_H(t) = [A_H(t), H] + U(t, 0)^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U(t, 0)$$

donde A_S ($A_S = A_H(0)$) puede depender explícitamente del tiempo. El caso más común es que esto no sea así en cuyo caso tenemos

$$\dot{A}_H(t) = \frac{[A_H(t), H]}{i\hbar}$$

Por la forma en que se introdujo esta representación es claro que los valores medios no dependen de la representación usada:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi_H | A_H(t) | \Psi_H \rangle, \quad |\Psi_H\rangle = |\Psi(0)\rangle = U(t, 0)^\dagger |\Psi(t)\rangle$$

2. Problema 9

“Simetrías y Conservación”. Sea $A = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|$ un observable que conmuta con el Hamiltoniano. Muestre entonces que la probabilidad de medir los distintos resultados a_i es independiente del tiempo. Concluya entonces que, además, el valor medio de A también es constante en el tiempo. ¿Dependen estos resultados de la representación elegida?

Para contemplar la posibilidad que $\{A, H\}$ no formen un CCOC, y de que eventualmente A sea degenerado, usamos la base ortogonal común (los operadores conmutan): $\{|a_i, \lambda_i\rangle\}$ donde el índice de degeneración del autovalor a_i es $\lambda_i = 1, \dots, g_i$. El proyector sobre un espacio de autoestados de autovalor a_j del observable A es:

$$\Pi_{a_j} = \sum_{\lambda_j=1}^{g_j} |a_j, \lambda_j\rangle\langle a_j, \lambda_j|$$

y una función de onda general se expresa en esta base:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_{a_i} \sum_{\lambda_i=1}^{g_i} c_{i,\lambda_i} |a_i, \lambda_i\rangle$$

Por lo que la función de onda a tiempo t es:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= U(t, 0) |\Psi(0)\rangle \\ &= e^{-iHt/\hbar} \sum_{a_i} \sum_{\lambda_i=1}^{g_i} c_{i,\lambda_i} |a_i, \lambda_i\rangle \\ &= \sum_{a_i} \sum_{\lambda_i=1}^{g_i} c_{i,\lambda_i} e^{-i\varepsilon(i,\lambda_i)t/\hbar} |a_i, \lambda_i\rangle \end{aligned}$$

Donde se usó que $H |a_i, \lambda_i\rangle = \varepsilon(i, \lambda_i) |a_i, \lambda_i\rangle$ (a cada estado le corresponde una energía dada).

Finalmente la probabilidad de medir $A = a_j$ es:

$$\begin{aligned} P_{a_j}(t) &= |\Pi_{a_j} |\Psi(t)\rangle|^2 \\ &= \left| \sum_{\lambda_j=1}^{g_j} |a_j, \lambda_j\rangle\langle a_j, \lambda_j| \sum_{a_i} \sum_{\lambda_i=1}^{g_i} c_{i,\lambda_i} e^{-i\varepsilon(i,\lambda_i)t/\hbar} |a_i, \lambda_i\rangle \right|^2 \\ &= \left| \sum_{\lambda_j=1}^{g_j} c_{j,\lambda_j} e^{-i\varepsilon(j,\lambda_j)t/\hbar} |a_j, \lambda_j\rangle \right|^2 \\ &= \sum_{\lambda_j=1}^{g_j} |c_{j,\lambda_j}|^2 = P_{a_j}(0) \end{aligned}$$

independiente del tiempo. En el cálculo se usó la ortogonalidad de los estados: $\langle a_j, \lambda_j | a_i, \lambda_i \rangle = \delta(a_j, a_i) \delta(\lambda_j, \lambda_i)$.

Dado que las probabilidades de medir a_j no dependen del tiempo, entonces tampoco dependen del tiempo los valores medios de A . Esto es consecuencia de que A conmuta con H , y representa en Mecánica Cuántica la conservación del observable A .

Esto último se puede ver muy fácilmente en la representación de Heisenberg pues:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi(0) | A_H(t) | \Psi(0) \rangle$$

Usando la ecuación de Heisenberg (A no depende explícitamente de t)

$$\dot{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [A_H(t), H] = 0$$

por lo que $A_H(t) = A_H(0)$ y el valor medio $\langle A \rangle$ no depende del tiempo para cualquier estado inicial.

La relación entre simetrías y leyes de conservación surge de recordar que todo observable A es el generador de una transformación unitaria $\tilde{U}(\theta) = e^{-iA\theta/\hbar}$. Esta transformación es la representación de una transformación en el espacio físico (ver **capítulo 7** del apunte teórico). Dicha transformación actúa sobre los estados, pero también se puede pensar, en forma alternativa, que actúa sobre los operadores, por ejemplo sobre el Hamiltoniano:

$$\tilde{H} = \tilde{U}(\theta)^\dagger H \tilde{U}(\theta)$$

si $[A, H] = 0$ obtenemos

$$\tilde{H} = \tilde{U}(\theta)^\dagger H \tilde{U}(\theta) = H$$

lo que significa que A genera una transformación de simetría del Hamiltoniano. Por lo visto anteriormente, dicha transformación implica que A se conserva. A cada simetría de H le corresponde una magnitud conservada. Muy parecido al lo visto en Mecánica Clásica (teorema de Noether).

Por ejemplo:

- Partícula libre. $H = \frac{P^2}{2m}$, P es el generador de traslaciones espaciales, $T(d) = e^{-iPd/\hbar}$. El Hamiltoniano es invariante ante traslaciones ($[H, P] = 0$). Como consecuencia P se conserva.
- Partícula en un potencial central (3D). $H = \frac{P^2}{2m} + V(r)$, $\mathbf{L} \cdot \hat{n}$ es el generador de rotaciones en el eje $\hat{n}$, $D(\hat{n}, \theta) = e^{-i\mathbf{L} \cdot \hat{n} \theta / \hbar}$. El Hamiltoniano es invariante ante rotaciones ($[H, \mathbf{L} \cdot \hat{n}] = 0$). Como consecuencia $\mathbf{L} \cdot \hat{n}$ se conserva.
- Partícula en un potencial independiente del tiempo. $H = \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{r})$, H es el generador de traslaciones en el tiempo, $U(t, t_0) = e^{-iHt/\hbar}$. El Hamiltoniano es invariante ante traslaciones en el tiempo (sólo válido si H no depende del tiempo). Como consecuencia H se conserva.

3. Problema 12

Evolución temporal en la bola de Bloch. Considere un sistema de espín 1/2. En presencia de un campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B\hat{z}$, el Hamiltoniano del sistema se puede escribir como $H = \omega S_z$ (ver problema de precesión del espín de la guía de Dinámica). Encuentre el $\mathbf{P}(t)$ que corresponde a la matriz densidad evolucionada $\rho(t)$. Interprete el resultado.

En la esfera de Bloch de un sistema de espín 1/2 la matriz densidad del estado más general posible (sea mixto o puro) está caracterizado por su vector de polarización $\mathbf{P}$. Hemos visto en un ejercicio anterior que la matriz densidad correspondiente es

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

En el cuadro de Schrödinger la matriz densidad evoluciona en el tiempo (pues los estados evolucionan). De modo que

$$\rho(t) = U(t, 0)\rho(0)U(t, 0)^\dagger$$

Lo cual conduce a una ecuación diferencial para $\rho(t)$ que es similar a la ecuación de Heisenberg

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{[\rho(t), H]}{i\hbar}$$

Si H no depende del tiempo, esta ecuación se obtiene de la ecuación de Heisenberg haciendo $t \rightarrow -t$.

Para simplificar las cuentas y usar resultados previos usamos que la solución de la ecuación anterior es

$$\rho(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}(t))$$

donde cada componente de $\boldsymbol{\sigma}(t)$ evoluciona como si estuviera en el cuadro de Heisenberg, pero haciendo $t \rightarrow -t$. Usando resultados del Problema 8 de esta guía para el Hamiltoniano $H = \omega S_z$:

$$\begin{aligned}\sigma_z(t) &= \sigma_z(0) \\ \sigma_x(t) &= \sigma_x(0) \cos(\omega t) + \sigma_y(0) \sin(\omega t) \\ \sigma_y(t) &= -\sigma_x(0) \sin(\omega t) + \sigma_y(0) \cos(\omega t)\end{aligned}$$

reemplazando en la expresión anterior y agrupando los operadores de Pauli, obtenemos

$$\rho(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \mathbf{P}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}(t))$$

donde se ha definido el vector de polarización $\mathbf{P}(t)$

$$\begin{aligned}P_z(t) &= P_z(0) \\ P_x(t) &= P_x(0) \cos(\omega t) - P_y(0) \sin(\omega t) \\ P_y(t) &= P_x(0) \sin(\omega t) + P_y(0) \cos(\omega t)\end{aligned}$$

siendo $\mathbf{P}(0)$ el vector de polarización a $t = 0$, y $\mathbf{P}(t)$ el vector de polarización a tiempo t .

Vemos que el vector $\mathbf{P}(t)$ que define los valores medios de $\mathbf{S}$ (si se multiplica por $\hbar/2$), rota con velocidad angular ω alrededor de la dirección del campo magnético (usando la regla de la mano derecha si $\omega > 0$). Manteniendo su componente a lo largo del campo, pero rotando la componente en la dirección perpendicular al mismo.

Notar que este resultado es válido sea el estado inicial puro ($|\mathbf{P}| = 1$) o mixto ($|\mathbf{P}| < 1$). En ambos casos la evolución no cambia la pureza del estado.