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

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

3 de mayo de 2023

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

En Mecánica Clásica, el Hamiltoniano H es el generador de la transformación canónica infinitesimal que lleva a las variables $\{\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}\}$ 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

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

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:

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

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 $\lambda_i = 1, ..g_i$. 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 una transformación unitaria $\tilde{U}(\theta) = e^{-iA\theta/\hbar}$. Esta transformación es la representación de una transformación en el espacio físico (ver **capitulo 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). $H = \frac{P^2}{2m} + V(r)$, $\boldsymbol{L}\cdot\hat{n}$ es el generador de rotaciones en el eje $\hat{n}$, $D(\hat{n}, \theta) = e^{-i\boldsymbol{L}\cdot\hat{n}\theta/\hbar}$. El Hamiltoniano es invariante ante rotaciones ($[H, \boldsymbol{L}\cdot\hat{n}] = 0$). Como consecuencia $\boldsymbol{L}\cdot\hat{n}$ se conserva.

- Partícula en un potencial independiente del tiempo. $H = \frac{P^2}{2m} + V(\boldsymbol{r})$, 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 $\boldsymbol{B} = B\hat{\boldsymbol{z}}$, 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 $\boldsymbol{P}(t)$ 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 $\boldsymbol{P}$. Hemos visto en un ejercicio anterior que la matriz densidad correspondiente es

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

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 $t \to -t$.

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

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

donde cada componente de $\boldsymbol{\sigma}(t)$ evoluciona como si estuviera en el cuadro de Heisenberg, pero haciendo $t \to -t$. 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

$$\rho(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \boldsymbol{P}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}(0))$$

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

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

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

Vemos que el vector $\boldsymbol{P}(t)$ que define los valores medios de $\boldsymbol{S}$ (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. Este resultado es el mismo que el caso clásico, un dipolo magnético rota alrededor del campo magnético con la misma frecuencia, y esto está de acuerdo al Teorema de Ehrenfest, que dice que los valores medios de observables cuánticos, evolucionan como las correspondientes magnitudes clásicas.

Notar que este resultado es válido sea el estado inicial puro ($|\boldsymbol{P}| = 1$) o mixto ($|\boldsymbol{P}| < 1$), y polarizado inicialmente en cualquier dirección. En ambos casos la evolución no cambia la pureza del estado.