Aula 4 Evolução Temporal e Representação em Mecânica Quântica.

1) Representação de Schrödinger

$\hat{H} \rightarrow$ INDEPENDENTE DO TEMPO (en)

Evolução temporal: Eq. de Schrödinger. ("S" → Rep. de Schrödinger)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_s(t)\rangle = \hat{H} |\psi_s(t)\rangle \Rightarrow \boxed{|\psi_s(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\psi_s(0)\rangle}$$

onde, formalmente; $e^{\hat{A}} = \mathbb{1} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \frac{\hat{A}^3}{3!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}$

Na Rep. de Schrödinger, a evolução temporal é concentrada no estado $|\psi\rangle$, sendo que operadores independentes do tempo assim permanecem, embora seu valor esperado passa depender do tempo:

operador $\hat{A}_s$ (independente do tempo) na Rep de Schrödinger

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \psi_s(t) | \hat{A}_s | \psi_s(t) \rangle$$

2) Representação de Heisenberg

Note que podemos escrever

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \psi_S(0)| e^{+\frac{iHt}{\hbar}} \hat{A}_S \, e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi_S(0)\rangle \equiv \langle \psi_H | \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle$$

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{onde: } |\psi_H\rangle = |\psi_S(0)\rangle & \text{(independente do tempo)} \\ \hat{A}_H(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}} \hat{A}_S \, e^{-\frac{iHt}{\hbar}} & \text{(dependente do tempo)} \end{array}}$$

Na Representação de Heisenberg, o estado $|\psi_H\rangle$ é independente do tempo e toda a dependência temporal é concentrada no operador. Note que $\hat{H}$ é independente do tempo mesmo na Rep. de Heisenberg: $\hat{H}_H = e^{\frac{iHt}{\hbar}} H \, e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = H \, e^{-\frac{iHt}{\hbar}} e^{\frac{iHt}{\hbar}} = H.\mathbb{1}$

A evolução temporal é dada então pela dinâmica dos operadores.

$$\dot{A}_H(t) = \frac{d A_H(t)}{dt} = e^{\frac{iHt}{\hbar}} \frac{i}{\hbar} H \hat{A}_S \, e^{-\frac{iH2}{\hbar}} + e^{\frac{iHt}{\hbar}} \hat{A}_S \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right) e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$$

$$= \frac{i}{\hbar} e^{\frac{iHt}{\hbar}} \left(H\hat{A}_S - \hat{A}_S H \right) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = \frac{i}{\hbar} [H, A_S](t)$$

ou

$$\frac{d A_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left(H \, e^{\frac{iHt}{\hbar}} \hat{A}_S e^{-\frac{iHt}{\hbar}} - e^{\frac{iHt}{\hbar}} \hat{A}_S e^{-\frac{iHt}{\hbar}} H \right) = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)]$$

Caso $\hat{A}_S = \hat{A}_S(t)$, temos

$$\boxed{\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{A}_S]_H(t) + \left(\frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t}\right)_H} \rightarrow \left(\frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t}\right)_H = e^{\frac{iHt}{\hbar}} \frac{\partial A_S}{\partial t} e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$$

em geral $X_H(t) \equiv e^{\frac{iHt}{\hbar}} (X_S(t)) \, e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$

3) Representação de Interação

Essa Representação é muito útil quando temos Hamiltonianos escritos na forma:

$$\underline{H = H_0 + V}$$ (independente do tempo)

Definimos o estado $|\psi_I(t)\rangle$ na Rep. de Interação como:

$$\boxed{|\psi_I(t)\rangle = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\psi_S(t)\rangle}$$ (definição do estado na Rep de Interação)

A equação de movimento para $|\psi_I(t)\rangle$ será então:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = -H_0\, e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}|\psi_S(t)\rangle + e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\Big(\underbrace{i\hbar\frac{\partial|\psi_S(t)\rangle}{\partial t}}_{H|\psi_S(t)\rangle}\Big) =$$

$$e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}|\psi_I(t)\rangle$$

$$= e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\left(-H_0 + H_0 + V\right)|\psi_S(t)\rangle = \underbrace{e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\, V\, e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}}_{\equiv V_I(t)}|\psi_I(t)\rangle$$

Logo, obtemos:

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle &= V_I(t)\,|\psi_I(t)\rangle \\ V_I(t) &= e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\, V\, e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}} \end{aligned}}$$

(estado evolui com $V_I(t)$)

($V_I(t)$ evolui com H_0)

Na Rep de Interação, <u>tanto</u> o estado $|\psi_I(t)\rangle$ <u>como</u> os operadores dependem do tempo:

$$\langle\hat{A}\rangle(t) = \langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_I(t)|\underbrace{e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} A_S\, e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}}_{\boxed{\equiv A_I(t)}}|\psi_I(t)\rangle$$

$$= \underline{\langle\psi_I(t)|A_I(t)|\psi_I(t)\rangle}$$

Note ainda que

$$\frac{dA_I(t)}{dt} = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} \frac{iH_0}{\hbar} A_s e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}} + e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} \hat{A}_s \left(\frac{-iH_0}{\hbar}\right) e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$$

$$= \frac{i}{\hbar} e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} (H_0 A_s - A_s H_0) e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}} = \frac{i}{\hbar} [H_0, A]_I(t) \quad //$$

ou

$$\boxed{\frac{dA_I(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_0, A_I(t)]}$$

A questão é: como resolver a equação de evolução temporal para o estado $|\Psi_I(t)\rangle$? Note que $V_I(t)$ não é constante:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = V_I(t) |\Psi_I(t)\rangle}$$

de modo que "$|\Psi_I(t)\rangle = e^{-\frac{iVt}{\hbar}} |\Psi_I(0)\rangle$" não é uma boa solução.

Invariavelmente, a solução será da forma:

$$\boxed{|\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle}$$

onde $\hat{U}(t, t_0)$ é um operador unitário ($U^\dagger U = \mathbb{1}$) e tal que $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ (conservação de probabilidade)

Podemos escrever $U(t, t_0)$ explicitamente na forma:

$$|\Psi_s(t_0)\rangle = e^{-\frac{iH_0t_0}{\hbar}} |\Psi_I(t_0)\rangle$$

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} |\Psi_s(t)\rangle = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}} |\Psi_s(t_0)\rangle =$$

$$= \underbrace{e^{\frac{iH_0t}{\hbar}} e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0t_0}{\hbar}}}_{\equiv U(t, t_0)} |\Psi_I(t_0)\rangle$$

Temos então as seguintes propriedades de $U(t,t_0)$:

1- $U(t_0,t_0) = \mathbb{1}$

2- $U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0) = U(t,t_0)U^\dagger(t,t_0) = \mathbb{1}$

3- $U(t,t_0)\,U(t_0,t) = \mathbb{1}$ $\Rightarrow$ $\boxed{U(t_0,t) = U^{-1}(t,t_0) = U^\dagger(t,t_0)}$

4- $\boxed{U(t_1,t_2)\,.\,U(t_2,t_3) = U(t_1,t_3)}$

(o conjunto de $U(t,t')$ forma um grupo)

$$\boxed{U(t,t_0) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}}\, e^{\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}}\, e^{\frac{-iH_0 t_0}{\hbar}}}$$

No entanto, essa forma de $U(t,t_0)$ não é muito útil. Podemos escrever $U(t,t_0)$ em termos de $V_I(t)$ apenas: Note que:

$$i\hbar \frac{d|\Psi_I(t)\rangle}{dt} = V_I(t)|\Psi_I(t)\rangle \Rightarrow \frac{dU(t,t_0)}{dt} = \frac{-i}{\hbar}V_I(t)\,U(t,t_0)$$

$$\Rightarrow U(t,t_0) - \overbrace{U(t_0,t_0)}^{\equiv \mathbb{1}} = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\,U(t',t_0)\,dt'$$

ou seja

$$\boxed{U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\,U(t',t_0)\,dt'}$$

é uma equação integral para o operador $U(t,t_0)$ (com condição inicial $U(t,t_0) = \mathbb{1}$)

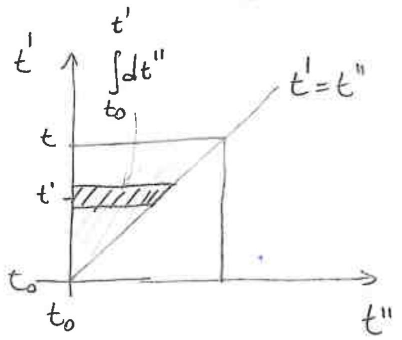
Podemos expandir o lado direito em uma série em $V_I(t)$ substituindo o lado esquerdo sucessivamente:

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} V_I(t')\,dt' + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt'\, V_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t'') + \dots$$

e é formalmente correta. Note que podemos escrever o 3º termo na seguinte forma:

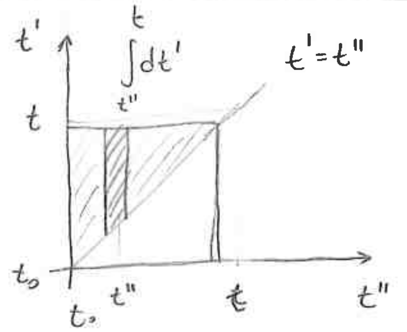
$$\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t')\, V_I(t'') = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t')\, V_I(t'') \quad \text{I} \quad (t' \geq t'')$$

$$+ \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t''}^{t} dt'\, V_I(t')\, V_I(t'') \quad \text{II}$$



$$\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \to \text{I}$$

$=$



$$\int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t''}^{t} dt' \to \text{II}$$

$(t'' \geq t')$
inversão

Trocando as variáveis em II: $\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t''}^{t} dt'\, V_I(t')V_I(t'') = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t'}^{t} dt''\, V_I(t'')V_I(t')$

e, somando, recuperamos a integral de t_0 a t em t'' mas:

$$\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt''\, V_I(t')\, V_I(t'') = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt'' \Big[\underbrace{V_I(t')\, V_I(t'')\,\theta(t'-t'')}_{t'>t''} + \underbrace{V_I(t'')\, V_I(t')\,\theta(t''-t')}_{t''>t'}\Big]$$

Sendo que as funções $\Theta(t'-t'')$ e $\Theta(t''-t')$ são necessárias pois os operadores $V_I(t')$ e $V_I(t'')$ não necessariamente comutam em tempos diferentes. Note que o operador com tempo maior aparece sempre à esquerda. Esse tipo de ordenamento de operadores é chamado de produto ordenado temporalmente:

$$T\left[A(t_3)A(t_2)A(t_1)\right] = \begin{cases} A(t_3)A(t_2)A(t_1) & \text{se } t_3 > t_2 > t_1 \\ A(t_2)A(t_1)A(t_3) & \text{se } t_2 > t_1 > t_3 \\ \vdots & \\ \text{etc.} & \end{cases}$$

e $T[\ldots]$ indica o ordenamento temporal do produto

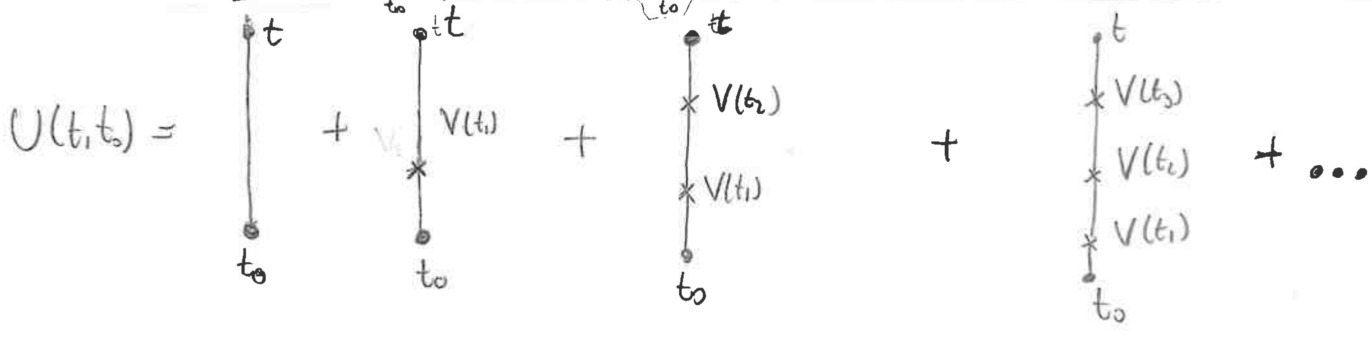
Desta forma, escrevemos:

$$\boxed{\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, V_I(t')V_I(t'') = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt''\, T\left[V_I(t')V_I(t'')\right]}$$

Podemos generalizar isso para todos os termos da série:

$$\boxed{U(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_n\, T\left[V_I(t_1)V_I(t_2)\ldots V_I(t_n)\right]}$$

$$= \mathbb{1} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} dt_1\, V_I(t_1) + \frac{1}{2}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1\, dt_2\, T\left[V(t_1)V(t_2)\right] + \frac{1}{3!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} dt_1 dt_2 dt_3\, T\left[V(t_1)V(t_2)V(t_3)\right] + \ldots$$



Dependência temporal de operadores de criação/destruição

Vimos que as relações de comutação de operadores dependentes do tempo tem que ser considerados com cuidado. Estamos particularmente interessados em comutadores do tipo:

$$[a_{\nu_1}(t_1), a^\dagger_{\nu_2}(t_2)]_\pm \qquad (t_1 \neq t_2) \qquad \begin{array}{l} + \to \text{férmions} \\ - \to \text{bósons} \end{array}$$

Na Rep. de Heisenberg, em geral, esse comutador não é trivial:

$$\boxed{a_{\nu_1}(t) \equiv e^{\frac{iHt}{\hbar}} a_{\nu_1} e^{-\frac{iHt}{\hbar}}} \quad ; \quad \boxed{a^\dagger_{\nu_2}(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}} a^\dagger_{\nu_2} e^{-\frac{iHt}{\hbar}}}$$

$$\Rightarrow \quad [a_{\nu_1}(t_1), a^\dagger_{\nu_2}(t_2)]_\pm = e^{\frac{iHt_1}{\hbar}} \underline{a_{\nu_1}} e^{-\frac{iH(t_1-t_2)}{\hbar}} \underline{a^\dagger_{\nu_2}} e^{-\frac{iHt_2}{\hbar}} \pm e^{\frac{iHt_2}{\hbar}} \underline{a^\dagger_{\nu_2}} e^{-\frac{iH(t_2-t_1)}{\hbar}} \underline{a_{\nu_1}} e^{-\frac{iHt_1}{\hbar}} = \,?$$

Em alguns casos simples, tais comutadores podem ser calculados:

Exemplo: $\boxed{H = \sum_\nu \varepsilon_\nu a^\dagger_\nu a_\nu}$ ($\hbar = 1$ daqui por diante)

então
$$\frac{d a_\nu(t)}{dt} = i\,[H, a_\nu](t) = i\, e^{iHt} (H a_\nu - \underline{\underline{a_\nu H}}) e^{-iHt}$$

Como
$$\boxed{a_\nu H = \sum_{\nu'} \varepsilon_{\nu'} \overbrace{a_\nu a^\dagger_{\nu'}}^{\delta_{\nu\nu'} \mp a^\dagger_{\nu'} a_\nu} a_{\nu'} = a_\nu \varepsilon_\nu \mp \sum_{\nu'} \varepsilon_{\nu'} a^\dagger_{\nu'} \overbrace{a_\nu a_{\nu'}}^{(\mp 1)} = a_\nu \varepsilon_\nu + \underline{\underline{H a_\nu}}}$$

$$\boxed{\frac{d a_\nu(t)}{dt} = -i\, \varepsilon_\nu\, e^{iHt} a_\nu e^{-iHt} = i\, \varepsilon_\nu\, a_\nu(t)} \Rightarrow \boxed{a_\nu(t) = e^{-i\varepsilon_\nu t} a_\nu(0)}$$

$$a^\dagger_\nu(t) = e^{+i\varepsilon_\nu t} a^\dagger_\nu(0)$$

Nesse caso simples, temos

$$[a_{\nu_1}(t_1), a^\dagger_{\nu_2}(t_2)]_\pm = e^{-i\varepsilon_{\nu_1} t_1} a_{\nu_1} e^{+i\varepsilon_{\nu_2} t_2} a^\dagger_{\nu_2} \pm e^{+i\varepsilon_{\nu_2} t_2} a^\dagger_{\nu_2} e^{-i\varepsilon_{\nu_1} t_1} a_{\nu_1}$$

$$= e^{-i(\varepsilon_{\nu_1} t_1 - \varepsilon_{\nu_2} t_2)} [a_{\nu_1}, a^\dagger_{\nu_2}] = e^{-i\varepsilon_{\nu_1}(t_1 - t_2)} \delta_{\nu_1 \nu_2} \quad //$$

E casos mais complicados como:

$$H = H_0 + V = \sum_K \varepsilon_K a^\dagger_K a_K + \frac{1}{2} \sum_{K_1 K_2} V_q a^\dagger_{K_1+q} a^\dagger_{K_2-q} a_{K_2} a_{K_1} \quad ?$$

Nesse caso, é possivel escrever as Equações de Movimento para os operadores. Por exemplo:

$$\frac{da_K(t)}{dt} = i[H, a_K](t) \quad ; \quad \frac{da^\dagger_K(t)}{dt} = i[H, a^\dagger_K](t)$$

No entanto, muitas vezes as equações não "fecham" como no caso simples anterior e obtemos coisas como (Lista 2):

$$\frac{da_K(t)}{dt} = -i\varepsilon_K a_K(t) + \frac{i}{2} \sum_{K_1 K_2} (V_{K_2-K} - V_{K-K_1}) a^\dagger_{K_1+K_2-K}(t) a_{K_2}(t) a_{K_1}(t)$$

onde aparece um produto de três operadores. Podemos então tentar calcular

$$\frac{d(a^\dagger_{K_1+K_2-K} a_{K_2} a_{K_1})(t)}{dt}$$

mas isso só complica as coisas. Veremos mais à frente alguns métodos para "fechar" equações desse tipo.

Transformada de Fourier e funções "avançadas" e "retardadas".

Os comutadores "temporais" são importantes para o cálculo de várias funções de correlação de operadores, em tempos diferentes, do tipo: $\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_\pm \rangle$. Nessas correlações, a ordem temporal é importante. Tipicamente, quando temos $\langle A(t)B(t') \pm B(t')A(t) \rangle$ e $t > t'$, denominamos a função de correlação definida por

$$\boxed{C^R_{AB}(t,t') = -i\,\theta(t-t')\,\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle}$$

como "retardada", no sentido em que "A está atrasado (retardado) em relação a B". A função de correlação "avançada" seria com $t' > t$:

$$\boxed{C^A_{AB}(t,t') = +i\,\theta(t'-t)\,\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle} \quad \text{(note o sinal)}$$

Note que um valor esperado do tipo $\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle$ envolve o Hamiltoniano tanto no traço da função densidade $\bar{\rho} = e^{-\beta H}$ como na evolução temporal (na Rep de Heisenberg):

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}\, e^{iHt}\hat{A}\, e^{-iHt}\, e^{iHt'}\hat{B}\, e^{-iHt'} \right] \leftarrow \left(\mathrm{Tr}(M_1M_2M_3) = \mathrm{Tr}(M_3M_1M_2) \right)$$

$$= \frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}\, e^{iH(t-t')}\hat{A}\, e^{-iH(t-t')}\hat{B} \right] \qquad \leftarrow \left[e^{-\beta H}, e^{iHt'} \right] = 0$$

ou seja, $\langle \hat{A}(t)B(t') \rangle$ depende apenas da diferença $\underline{t-t'}$ //

(desde que H não dependa do tempo)

Escrevendo $C^R_{AB}(t,t') = C^R_{AB}(t-t')$, podemos definir sua Transformada de Fourier:

$$C^R_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t')\, e^{i\omega(t-t')}\, C^R_{AB}(t-t')$$

Essa definição está ok desde que $C^R_{AB}(t-t') \to 0$ para $(t-t') \to \infty$.

Fisicamente, isto implica que o sistema possui algum mecanismo de relaxação que destrói as correlações em tempos longos. Caso contrário, é possível ainda definir $C^R_{AB}(\omega)$ colocando uma pequena parte imaginária em ω: $\omega \to \omega + i\eta$ onde $\eta > 0$

$$\boxed{C^R_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t')\, e^{i\omega(t-t')} \left(e^{-\eta(t-t')}\, C^R_{AB}(t-t') \right)}$$

Nesse caso, a transformação inversa é obtida fazendo $\eta \to 0^+$:
($t'=0$ por simplicidade)

$$C^R_{AB}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega t}\, C^R_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt'\, e^{i\omega t'}\, C_{AB}(t')\, e^{-\eta t'}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt' \underbrace{\left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{i\omega(t'-t)} \right]}_{=\delta(t'-t)} e^{-\eta t'}\, C_{AB}(t') = e^{-\eta t}\, C^R_{AB}(t) \xrightarrow[\eta \to 0^+]{} C^R_{AB}(t)$$

Logo, é necessário fazer $\eta \to 0^+$ se $C^R_{AB}(t)$ não decai a tempos longos.

Para funções avançadas $C^A_{AB}(t)$, a mesma análise leva a $\boxed{\omega \to \omega - i\eta}$
$(\eta \to 0^+)$