§ Propagadores na Mecânica Ondulatória

Vamos traduzir a evolução temporal dos kets-estado (em Schrödinger) para a Mecânica Ondulatória, introduzindo a função de Onda:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t-t_0)}|\alpha, t_0\rangle \,, \qquad (1)$$

para o caso que o Hamiltoniano não depende do tempo. Expandimos em autokets de $\mathcal{H}$, $\{|a'\rangle\}$

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} . \qquad (2)$$

Agora projetamos na base da posição $\{|\vec{x}'\rangle\}$ para gerar a função de onda:

$$\psi(\vec{x}'', t) \equiv \langle \vec{x}'|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} u_{a'}(\vec{x}'') \; C_{a'}(t_0) \times \qquad (3)$$
$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)\right]$$

onde

$$u_{a'}(\vec{x}'') = \langle \vec{x}''|a'\rangle \qquad (4)$$

é a função de onda dos estados estacionários (de energia $E_{a'}$) e $C_{a'}(t_0) = \langle a'|\alpha, t_0\rangle$ são os coeficientes lineares.

Eles podem ser escritos em termos das funções de onda:

$$C_{a'}(t_0) = \langle a'|\alpha, t_0\rangle = \int d^3x' \, \langle a'|\vec{x}'\rangle\langle \vec{x}'|\alpha, t_0\rangle = \qquad (5)$$

TAMOIO Boas Impressões

Resulta:

$$C_{a'}(t_0) = \int d^3x' \, u^*_{a'}(\vec{x}')\, \psi(\vec{x}', t_0) \quad . \qquad (6)$$

Substituindo (6) em (4), obtemos:

$$\psi(\vec{x}'',t) = \int d^3x' \left[\sum_{a'} u^*_{a'}(\vec{x}')\, u_{a}(\vec{x}'')\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)}\right] \psi(\vec{x}',t_0) \qquad (7)$$

Def Propagador

$$\boxed{\begin{aligned} K(\vec{x}'',t;\vec{x}',t_0) &\equiv \sum_{a'} u_{a'}(\vec{x}'')\, u^*_{a'}(\vec{x}')\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)} \\ &= \sum_{a'} \langle \vec{x}''|a'\rangle\langle a'|\vec{x}'\rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_{a'}(t-t_0)\right] \qquad (8) \end{aligned}}$$

Com a definição escrevemos (7) como:

$$\boxed{\psi(\vec{x}'',t) = \int d^3x' \, K(\vec{x}'',t;\vec{x}',t_0)\, \psi(\vec{x}',t_0) ,} \qquad (9)$$

tendo assim reduzido a Eq. de Schrödinger a uma eq. integral com núcleo $K(\vec{x}'',t;\vec{x}',t_0)$.

O propagador independe da condição inicial e pode ser construído, uma vez dadas as autofunções e os autovalores da energia.

Cód 1702

Da definição também obtemos que:

$$K(\vec{x}'',t;\vec{x}',t_0)=\sum_{a'}\langle\vec{x}''|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t-t_0)}|a'\rangle\langle a'|\vec{x}'\rangle$$

e usando a completeza do sistema $\{|a'\rangle\}$, obtemos:

$$\boxed{K(\vec{x}'',t;\vec{x}',t_0)=\langle\vec{x}''|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t-t_0)}\,|\vec{x}'\rangle}$$

$$=\langle\vec{x}''|\Big(U(t-t_0)|\vec{x}'\rangle\Big),$$

de maneira que o propagador pode ser interpretado como a função de onda (função de $\vec{x}''$) no tempo t de uma partícula que estava exatamente localizada em $\vec{x}'$, no tempo inicial t_0.

Propriedades de K

i)
$$\lim_{t\to t_0} K(\vec{x}'',t;\vec{x}',t_0)=\sum_{a'}\langle\vec{x}''|a'\rangle\langle a'|\vec{x}'\rangle$$

$$=\langle\vec{x}''|\vec{x}'\rangle=\delta^{(3)}(\vec{x}''-\vec{x}')\ ;$$

ii) K satisfaz a eq. de Schrödinger, para $t>t_0$, em função de $(\vec{x}'',t)$, para $(\vec{x}',t_0)$ fixos. A demonstração é evidente porque

$$u_{a'}(\vec{x}'')\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_{a'}t}$$

é solução da eq. de Schrödinger.

D 60 bis

Note que $\delta^{(3)}(\vec{x}'' - \vec{x}')$ é a função de onda de uma partícula que está exatamente em $\vec{x}'$. Para resolver o problema mais geral de uma função de onda inicial estendida no espaço $\psi(\vec{x}', t_0)$ usamos o propagador como em (a):

$$\psi(\vec{x}'', t) = \int d^3x' \, K(\vec{x}'', t; \vec{x}', t_0)\, \psi(\vec{x}' t_0).$$

Nas páginas seguintes mudamos a notação para as funções de onda dos estados estacionários:

$$\left[u_{a'}(\vec{x}'),\ E_{a'} \right] \longrightarrow \left[\phi_n(\vec{x}'),\ E_n \right]$$

As fórmulas usadas são válidas apenas para $t > t_0$. É conveniente considerar que $K \equiv 0$ para $t < t_0$, de maneira que a forma compacta de escrever o propagador é (Propagador Retardado):

$$K(\vec{x}',t;\vec{x}'',t_0) = \langle \vec{x}' | e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t-t_0)} | \vec{x}'' \rangle \, \theta(t-t_0),$$

onde $\theta(t-t_0)$ é a função degrau. Escrevemos também

$$\mathcal{H}(\vec{x}', -i\hbar\nabla_{\vec{x}'}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\vec{x}'} + V(\vec{x}')$$

As funções $\phi_n(\vec{x}')$ satisfazem a equação de Schrödinger, isto é

$$\left[\mathcal{H}(\vec{x}', -i\hbar\nabla') - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right] \phi_n(\vec{x}') \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = 0$$

Aplicamos este operador $(\mathcal{H}_{x'} - i\hbar\partial_t)$ sobre o propagador

$$\left[\mathcal{H}(\vec{x}', -i\hbar\nabla_{\vec{x}'}) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right] K(\vec{x}',t;\vec{x}'',t_0) =$$

$$= \theta(t-t_0) \sum_n \phi_n^*(\vec{x}'') \, e^{\frac{i}{\hbar}E_n t_0} \, \overbrace{\left[\mathcal{H}_{x'} - i\hbar\partial_t\right] \phi_n(\vec{x}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}^{0}$$

$$- i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\theta(t-t_0) \left[\sum_n \phi_n^*(\vec{x}'') \, \phi_n(\vec{x}') \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\right]$$

e usando que

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(t-t_0) = \delta(t-t_0)$$

obtemos

$$\left[\mathcal{H}(\vec{x}', -i\hbar\nabla_{\vec{x}'}) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right] K(\vec{x}', t; \vec{x}'', t_0) =$$

$$= -i\hbar\,\delta(t-t_0)\sum_n \phi_n^*(\vec{x}'')\phi_n(\vec{x}')\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} .$$

Levando em conta a função $\delta(t-t_0)$ podemos substituir $t = t_0$ na soma. Assim:

$$\left[\mathcal{H}(\vec{x}', -i\hbar\nabla_{\vec{x}'}) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right] K(\vec{x}', t; \vec{x}'', t_0) = -i\hbar\,\delta(t-t_0)\,\delta(\vec{x}' - \vec{x}''),$$

que é a equação diferencial satisfeita pelo propagador.

Resulta que o Propagador não mais que a função de Green da equação de Schrödinder dependente do tempo.

Exemplos de propagadores

1. Partícula livre em 1-dim

O observável que comuta com $\mathcal{H}$ é o momentum p

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle\,, \quad \mathcal{H}|p'\rangle = \frac{p'^2}{2m}|p'\rangle\,,$$

e as autofunções na representação de coordenadas são

$$\phi_{p'}(x') = \langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{i\frac{p'x'}{\hbar}}$$

Neste caso a variável p' é contínua:

$$K(x',t;x'',t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dp' \,\frac{e^{-\frac{ip'x''}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\frac{e^{\frac{ip'x'}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p'^2}{2m}(t-t_0)}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp' \,\exp\left[\frac{ip'}{\hbar}(x'-x'')\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{p'^2}{2m}(t-t_0)\right].$$

Esta integral pode ser feita no plano complexo. É a transformada de Fourier de uma gaussiana (sabemos que é outra gaussiana):

$$K(x',t;x'',t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\,\exp\left[\frac{im(x'-x'')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]$$

Este exemplo mostra que se no instante inicial a partícula estava em x'' com função de onda $\delta(x'-x'')$, para tempos posteriores temos dispersão do pacote em torno à x'', com largura proporcional à $\sqrt{t-t_0}$

8. <u>Oscilador harmônico em 1-dim</u>

$$K(x',t;x'',t_0) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\, \text{sen}[\omega(t-t_0)]}\right)^{1/2} \times$$

$$\times \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\, \text{sen}[\omega(t-t_0)]}\left[(x'^2+x''^2)\cos[\omega(t-t_0)] - 2x'x''\right]\right\}$$

Fazer a demonstração como exercício. Notar que o propagador é uma função periódica de t com freqüência ω. Assim, o propagador volta a seu valor inicial para tempos que são múltiplos inteiros do período

$$T = \frac{2\pi}{\omega} \ .$$

Sem perda de generalidade, tomemos $t_0 = 0$. Procuramos a amplitude de probabilidade para a partícula <u>voltar</u> a sua posição inicial x'' depois de um tempo <u>t</u>. Colocamos então $x''=x'$, e integrando sobre todas as possibilidades temos:

$$G(t) \equiv \int d^3x' \, K(\vec{x}', t; \vec{x}', 0)$$

$$= \int d^3x' \sum_{a'} |\langle \vec{x}' | a' \rangle|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{a'} t\right)$$

$$= \sum_{a'} \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_{a'} t\right) \int d^3x' \underbrace{|\langle x' | a' \rangle|^2}_{1}$$

e se o estado $|a'\rangle$ está normalizado obtemos:

$$\boxed{G(t) = \sum_{a'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{a'} t\right)}$$

A operação descrita é no fundo um traço sobre $\vec{x}'$. Como o traço é um invariante, ele não depende da representação. Assim temos:

$$G(t) = \sum_{a'} \langle a' | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | a' \rangle = \sum_{a'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{a'} t\right)$$

obtendo-se de imediato a expressão anterior. A forma de $G(t)$ é uma soma sobre todos os estados e lembra o cálculo de uma função partição da Mecânica Estatística, com a substituição

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \longleftrightarrow \frac{it}{\hbar}$$

Consideremos a transformada de Fourier de $G(t)$ para o propagador retardado

$$\mathcal{G}^{(R)}(E) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \; \theta(t)\, G(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E t\right)$$

$$= -i \int_{0}^{\infty} dt \sum_{a'} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E - E_{a'})t\right\}$$

$$= -i \sum_{a'} \int_{0}^{\infty} dt \; e^{\frac{i}{\hbar}(E-E_{a'})t}$$

a integral pode ser feita convergente para $t \to \infty$, adicionando uma pequena parte imaginária para a variável E (energia):

$$E \to E + i\varepsilon \;, \quad \varepsilon > 0 \;, \quad \varepsilon/|E| \ll 1$$

Temos $$e^{\frac{i}{\hbar}Et} \longrightarrow e^{\frac{i}{\hbar}Et}\, e^{-\varepsilon t} \xrightarrow[t \to \infty]{} 0$$

Assim:

$$-i \int_{0}^{\infty} dt \; e^{\frac{i}{\hbar}(E + i\varepsilon - E_{a'})t} = \frac{-i\hbar}{i(E + i\varepsilon - E_{a'})}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon-E_{a'})t}\Bigg|_{0}^{\infty}$$

$$= \frac{\hbar}{E + i\varepsilon - E_{a'}}$$

$$\lim_{\varepsilon \to 0^+} \mathcal{G}^{(R)}_{\varepsilon}(E) = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \sum_{a'} \frac{\hbar}{E - E_{a'} + i\varepsilon}$$

Temos a representação:

$$\lim_{\varepsilon\to 0^+} \frac{1}{E-E_{a'}+i\varepsilon} = \mathcal{P}_c\left(\frac{1}{E-E_{a'}}\right) - i\pi\,\delta(E-E_{a'}) \,,$$

onde $\mathcal{P}_c$ é a Parte principal segundo Cauchy, e é sempre finita. A singularidade é levada em conta na função delta de Dirac. Assim temos:

$$\lim_{\varepsilon\to 0^+} \frac{1}{\hbar}\,\mathcal{G}_\varepsilon^{(R)}(E) = \sum_{a'} \mathcal{P}_c\left(\frac{1}{E-E_{a'}}\right) - i\pi\sum_{a'}\delta(E-E_{a'})$$

A função

$$\mathcal{D}(E) \equiv \sum_{a'} \delta(E-E_{a'})$$

é a Densidade de Estados. Obtemos o resultado (importante!)

$$\boxed{\mathcal{D}(E) = \sum_{a'} \delta(E-E_{a'}) = -\frac{1}{\pi\hbar}\,\mathrm{Im}\left[\mathcal{G}_{0^+}^{(R)}(E)\right]}$$

A função $\frac{1}{\hbar}\mathcal{G}_\varepsilon^{(R)}(E)$ é analítica no semiplano superior da variável complexa E e tem polos exatamente nos autovalores da energia $\Longrightarrow$ Idéia: estudar as propriedades analíticas de $\mathcal{G}(E)$ para obter o espectro de energias.

• **Def**: Operador Resolvente (da variável E)

$$\boxed{\frac{1}{\hbar} G(E) \equiv \frac{1}{E-\mathcal{H}}}$$

Seja $\{|a'\rangle\}$ a base que diagonaliza o Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle$$

O Resolvente tem a descomposição espectral:

$$\frac{1}{\hbar} G(E) = \sum_{a'} \frac{|a'\rangle\langle a'|}{E - E_{a'}} \ ,$$

e a funçaõ $\mathcal{G}(E)$ é obtida como um Traço:

$$\mathcal{G}(E) = Tr\left[G(E)\right] = \sum_{a'} \frac{1}{E-E_{a'}} \ .$$

Ex: Partícula livre

a) Normalizar a função de onda de uma partícula livre no interior de uma caixa de volume L^d, com condições periódicos de contorno

$$e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{L^d}} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}$$

Condição periódica: $e^{\frac{i}{\hbar} p_j (x_j+L)} = e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j}$

$j = 1, 2, \dots, d$

$$\Rightarrow \qquad e^{\frac{i}{\hbar} p_j L} = 1$$

valores possíveis de p_j :

$$p_j = \frac{2\pi}{(L/\hbar)} n_j \; , \qquad n_j = 0, 1, 2, \ldots$$

Obtemos um espectro quase-contínuo no limite $L \to \infty$. O volume elementar de um estado no espaço de momentum é :

$$\Omega_p = \left(\frac{2\pi}{L/\hbar}\right)^d$$

No limite quase-clássico, podemos substituir uma soma discreta sobre os estados por uma integral :

$$\sum_{\vec{p}} = \frac{1}{\Omega_p} \sum_{\vec{p}} \Omega_p \xrightarrow[\lim L\to\infty]{} \cdots \longrightarrow \frac{1}{\Omega_p} \int d^d p$$

Teorema :

$$\boxed{\lim_{L\to\infty} \sum_{\vec{p}} \cdots = \left(\frac{L/\hbar}{2\pi}\right)^d \int d^d p \, \cdots}$$

b) Densidade de Estados em 1-dim

$$E_p = \frac{p^2}{2m} \quad , \qquad -\infty < p < +\infty$$

$$\mathcal{D}(E) = \sum_p \delta\left(E - \frac{p^2}{2m}\right)$$

No limite quase-contínuo:

$$\mathcal{D}(E) \longrightarrow \frac{(L/\hbar)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \; \delta\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)$$

$$= \frac{m(L/\hbar)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \; \delta(p^2 - 2mE)$$

- Propriedade da função delta:

$$\delta(g(x)) = \sum_i \frac{1}{|g'(x_i)|} \delta(x - x_i) \;,$$

para um polinômio $g(x)$, onde x_i são as raízes.

No nosso caso:

$$g(p) = p^2 - 2mE$$

$$x_1 = \sqrt{2mE} \quad , \quad x_2 = -\sqrt{2mE}$$

$$g'(p) = 2p$$

Assim:

$$\delta(p^2 - 2mE) = \frac{1}{2\sqrt{2mE}} \left[\delta(p - \sqrt{2mE}) + \delta(p + \sqrt{2mE}) \right]$$

Assim: $$\boxed{\mathcal{D}(E) = \frac{m(L/\hbar)}{\pi} (2mE)^{-1/2}}$$