Procese QED în câmpuri laser intense
tema 44

M. Penţia

July 23, 2022

.

”Verbum sapienti sat est”

Cuprins

1.1 Descrieri cuantice

<table>
<tr><th>Descrieri</th><th>Stările $|\psi\rangle$</th><th>Observabilele $\hat{A}$</th><th>Ecuaţia de evoluţie</th></tr>
<tr>
<td>Schrödinger
$\boxed{|\psi\rangle=|\psi_S(t)\rangle \quad \hat{A}\neq\hat{A}_S(t)}$
Hamiltonian $\hat{H}$</td>
<td>Stările $|\psi_S(t)\rangle$ soluţii ec. Schrödinger (4)
√ $|\psi_S(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,|\psi_S(0)\rangle$ (1)
şi soluţiile complex conjugate:
√ $\langle\psi_S(t)| = \langle\psi_S(0)|\,e^{i\hat{H}t/\hbar}$ (2)</td>
<td>√ $\hat{A}_S(t)=\hat{A}_S(0)\equiv\hat{A}_S=const.$ (3)</td>
<td>Ecuaţia Schrödinger
$i\hbar\frac{\partial|\psi_S(t)\rangle}{\partial t}=\hat{H}|\psi_S(t)\rangle$
şi ecuaţia complex conjugată (4)
$-i\hbar\frac{\partial\langle\psi_S(t)|}{\partial t}=\langle\psi_S(t)|\,\hat{H}$</td>
</tr>
<tr>
<td>Heisenberg
$\boxed{|\psi\rangle\neq|\psi_H(t)\rangle \quad \hat{A}=\hat{A}_H(t)}$
Hamiltonian $\hat{H}$</td>
<td>Definiţie: √ $\boxed{|\psi_H\rangle = |\psi_S(0)\rangle = const.}$
cu $|\psi_S(0)\rangle$ din (1)
$|\psi_H\rangle=|\psi_S(0)\rangle=e^{i\hat{H}t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle$ (5)</td>
<td>$\boxed{\hat{A}_H(t) \text{ se obţine din } \langle\hat{A}_S\rangle \text{ cu } \hat{A}_H(0)=\hat{A}_S}$
√ $\hat{A}_H(t)=e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_S\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ (6)
vezi Demonstraţia (1) (transfer dependenţă t)</td>
<td>Ecuaţia Heisenberg
din (6) $i\hbar\frac{d\hat{A}_H}{dt}=\left[\hat{A}_H,\hat{H}\right]$
vezi Demonstraţia (2)</td>
</tr>
<tr>
<td>de Interacţie
$\boxed{|\psi\rangle=|\psi_I(t)\rangle \quad \hat{A}=\hat{A}_I(t)}$
Hamiltonian $\hat{H}$
= liber $\hat{H}_0$ +
interacţie $\hat{H}'$
$\boxed{\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'}$</td>
<td>Definiţie: $\boxed{|\psi_I(t)\rangle=|\psi_H\rangle|_{H_0}}$
√ $|\psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle =$ (7)
$=\underbrace{e^{i\hat{H}_0t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\hat{U}=e^{-i\hat{H}'t/\hbar}}|\psi_S(0)\rangle=\hat{U}|\psi_S(0)\rangle$
$|\psi_I(t)\rangle=e^{-i\hat{H}'t/\hbar}|\psi_S(0)\rangle$ (8)
Stările $|\psi_I(t)\rangle$ evoluează Schrödinger cu $\hat{H}'$</td>
<td>Definiţie: $\boxed{\hat{A}_I(t)=\hat{A}_H(t)|_{H_0}}$
(6) cu $\hat{H}_0$ √ $\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{A}_S\,e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}$ (9)
Operator $\hat{A}_I(t)$ evoluează Heisenberg cu $\hat{H}_0$
din (6) $\hat{A}_S = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_H\,e^{i\hat{H}t/\hbar}$
$\hat{A}_I(t)=\underbrace{e^{i\hat{H}_0t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\hat{U}}\hat{A}_H(t)\underbrace{e^{i\hat{H}t/\hbar}e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}}_{\hat{U}^{-1}}$
$\hat{A}_I(t)=\hat{U}\,\hat{A}_H(t)\,\hat{U}^{-1}$ (10)</td>
<td>din (7) $i\hbar\frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\hat{H}_0t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle\right)=$
$=-\hat{H}_0\,e^{i\hat{H}_0t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle+i\hbar e^{i\hat{H}_0t/\hbar}\frac{\partial|\psi_S(t)\rangle}{\partial t}$ din (4)
$=-\hat{H}_0\,e^{i\hat{H}_0t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle+e^{i\hat{H}_0t/\hbar}\left(\hat{H}_0+\hat{H}'\right)|\psi_S(t)\rangle$
$=\underbrace{e^{i\hat{H}_0t/\hbar}\,\hat{H}'\,e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}}\,|\psi_I(t)\rangle=\hat{H}'_I|\psi_I(t)\rangle$
unde $\hat{H}'_I=e^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{H}'\,e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}$ $\hat{H}_0$ comută cu $e^{i\hat{H}_0t/\hbar}$
Deci, $|\psi_I(t)\rangle$ evoluează Schrödinger cu $\hat{H}'_I$.
vezi Demonstraţia (2), dar pentru A_I cu $\hat{H}_0$ din (9) $\boxed{i\hbar\frac{d\hat{A}_I}{dt}=\left[\hat{A}_I,\hat{H}_0\right]}$
$\Longrightarrow$ $\hat{A}_I$ evoluează Heisenberg cu $\hat{H}_0$</td>
</tr>
<tr>
<td colspan="2">Elemente de matrice (Valori medii observabile)
Descrierea Schrödinger: $\langle\hat{A}_S\rangle=\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S\,|\psi_S(t)\rangle$
Descrierea Heisenberg: $\langle\hat{A}_H\rangle=\langle\psi_H|\hat{A}_H(t)\,|\psi_H\rangle=$
$=\langle\psi_S(0)|e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_S\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,|\psi_S(0)\rangle$
$=\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle\equiv\langle\hat{A}_S\rangle$
Descrierea de Interacţie: $\langle\hat{A}_I\rangle=\langle\psi_I(t)|\hat{A}_I(t)|\psi_I(t)\rangle=$
$=\langle\psi_S(t)|e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}\,e^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{A}_S\,e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}\,e^{i\hat{H}_0t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle$
$=\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle\equiv\langle\hat{A}_S\rangle$</td>
<td>Demonstraţia (1), folosim (1) şi (2)
din $\langle\hat{A}_S\rangle=\langle\psi_S(t)|\hat{A}_S|\psi_S(t)\rangle$
$=\underbrace{\langle\psi_S(0)|}_{\langle\psi_H|}\underbrace{e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_S\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\hat{A}_H(t)}\underbrace{|\psi_S(0)\rangle}_{|\psi_H\rangle}$
$=\langle\psi_H|\hat{A}_H(t)|\psi_H\rangle\equiv\langle\hat{A}_H(t)\rangle$ (11)
$\Longrightarrow$ $\boxed{\hat{A}_H(t)=e^{i\hat{H}\,t/\hbar}\hat{A}_S\,e^{-i\hat{H}\,t/\hbar}}$</td>
<td>Demonstraţia (2): folosim (6) cu (4)
$\frac{d\hat{A}_H}{dt}=\frac{i}{\hbar}\underbrace{\hat{H}\,e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_S\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\hat{H}\hat{A}_H}+$ $\hat{H}$ comută cu $e^{i\hat{H}t/\hbar}$
$+\,e^{i\hat{H}t/\hbar}\underbrace{\frac{\partial\hat{A}_S}{\partial t}}_{=0}e^{-i\hat{H}t/\hbar}-\frac{i}{\hbar}\underbrace{e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_S\hat{H}\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\hat{A}_H\hat{H}}$
$=\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}_H-\hat{A}_H\hat{H}\right)=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H,\hat{H}\right]$
$\boxed{i\hbar\frac{d\hat{A}_H}{dt}=\left[\hat{A}_H,\hat{H}\right]}$</td>
</tr>
</table>

1.2 Evoluţia stărilor în mecanica cuantică ($\hat{H}$ comutativ)

- Variaţia temporală a stării cuantice $\big|\psi(t)\big\rangle$ este dată de ecuaţia Schrödinger

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\big|\psi(t)\big\rangle = \hat{H}\,\big|\psi(t)\big\rangle} \tag{1.1}$$

- Experimental nu se măsoară starea cuantică $\big|\psi\big\rangle$, ci o valoare medie (expectation value) sau o probabilitate, date de un produs $\big\langle bra\big|$ şi $\big|ket\big\rangle$ cu eventual un operator $\hat{A}$ la mijloc

$$\mathcal{P} = \big\langle f(t)\big|\,\hat{A}\,\big|i(t)\big\rangle$$
sau explicit
$$\mathcal{P} = \int \big(f^*(t)\,\hat{A}\,i(t)\big)\,dx \tag{1.2}$$

- In descrierea Schrödinger starea cuantică $\big|\psi(t)\big\rangle$ este cea care evoluează în timp, conform ecuaţiei (1.1). Operatorii mărimilor fizice măsurabile în schimb, nu au nici o ecuaţie de mişcare. Ei sunt constanţi în timp. Totuşi, noi suntem interesaţi de a urmări evoluţia în timp a mărimilor fizice măsurabile de genul (1.2), pentru care va trebui să apelăm la o altă ”descriere”, echivalentă celei Schrödinger.

- Dacă în mecanica cuantică ordinară abordarea alternativă este doar un aspect pur echivalent, în teoria câmpurilor cuantice, abordarea alternativă este esenţială. In particular, în teoria cuantică a câmpurilor, acestea sunt operatori, pe care suntem interesaţi de data asta să le urmărim evoluţia în timp.

- Pentru a transfera dependenţa de timp de la starea cuantică $\big|\psi(t)\big\rangle$ spre operatorul $\hat{A}(t)$, vom introduce întâi operatorul de evoluţie $\hat{U}(t_0, t)$ care leagă starea $\big|\psi(t)\big\rangle$ la momentul t, de starea $\big|\psi(t_0)\big\rangle$ la un moment anterior t_0, adică definim:

- Operatorului de evoluţie $\hat{U}(t_0, t)$ în mecanica cuantică este definit ca

$$\begin{cases} \big|\psi(t)\big\rangle = \hat{U}(t_0, t)\,\big|\psi(t_0)\big\rangle \\ \big\langle\psi(t)\big| = \big\langle\psi(t_0)\big|\,\hat{U}^\dagger(t_0, t) \end{cases} \tag{1.3}$$

- $\big|\psi(t)\big\rangle$ este o stare Schrödinger normată

$$\big\langle\psi(t)\big|\psi(t)\big\rangle = 1 \tag{1.4}$$

- Inlocuind (1.3) în (1.4)

$$1 = \big\langle\psi(t)\big|\psi(t)\big\rangle = \big\langle\psi(t_0)\big|\,\hat{U}^\dagger\hat{U}\,\big|\psi(t_0)\big\rangle \tag{1.5}$$

- Deci operatorul de evoluţie este unitar:

$$\boxed{\hat{U}^\dagger\,\hat{U} = I} \tag{1.6}$$

- Operatorul de evoluţie de la $t_1 \to t_2$ şi de la $t_2 \to t_3$ este egal cu operatorul de evoluţie de la $t_1 \to t_3$.

$$\hat{U}(t_1, t_2)\,\hat{U}(t_2, t_3) = \hat{U}(t_1, t_3) \tag{1.7}$$

- Pentru evoluţia inversă folosim (1.6) $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$

$$\hat{U}(t_1, t_2) = \hat{U}^{-1}(t_2, t_1) = \hat{U}^\dagger(t_2, t_1) \tag{1.8}$$

- Dacă evoluţia în timp a stării $|\psi(t_0)\rangle$ este (1.3) $\boxed{|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t_0,t)\,|\psi(t_0)\rangle}$

- Atunci

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \dot{\hat{U}}(t_0,t)\,\psi(t_0)\rangle &= \dot{\hat{U}}(t_0,t)\,\overbrace{\hat{U}^{-1}(t,t_0)|\psi(t)\rangle}^{|\psi(t_0)\rangle}\\ &= \underbrace{\dot{\hat{U}}(t_0,t)\,\hat{U}^{\dagger}(t,t_0)}_{\sim\hat{H}}\,|\psi(t)\rangle\end{aligned}} \tag{1.9}$$

- Comparând cu ecuaţia Schrödinger (1.1)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle \tag{1.1}$$

rezultă

$$\boxed{\hat{H} = i\hbar\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}} \tag{1.10}$$

- Pe de altă parte, din condiţia de unitaritate (1.6): $\hat{U}\,\hat{U}^{\dagger} = I$

prin derivare avem:

$$\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger} + \hat{U}\dot{\hat{U}}^{\dagger} = 0 \quad \text{sau} \quad \dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger} + \big(\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}\big)^{\dagger} = 0 \tag{1.11}$$

deci $\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}$ este antihermitic:

$$\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger} = -\big(\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}\big)^{\dagger} \tag{1.12}$$

iar $i\,\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}$ este hermitic, deoarece operatorul adjunct (hermitic conjugat) se obţine prin transpunere şi conjugare complxă (schimbă semnul componentei complexe):

$$i\,\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger} \xrightarrow{hc} \big(i\,\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}\big)^{\dagger} = -i\,\hat{U}\dot{\hat{U}}^{\dagger} \overbrace{=}^{(1.11)} -i\big(-\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}\big) = i\,\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}$$

deci $i\,\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}$ este hermitic:

$$\big(i\,\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger}\big)^{\dagger} = i\,\dot{\hat{U}}\hat{U}^{\dagger} \tag{1.13}$$

- Inmulţind (1.10) cu $\hat{U}$ şi folosind condiţia de unitaritate (1.6) obţinem ecuaţia de mişcare pentru operatorul de evoluţie $\hat{U}$ în mecanica cuantică, echivalentă cu ecuaţia Schrödinger (1.1).

$$\boxed{i\hbar\dot{\hat{U}} = \hat{H}\hat{U}} \tag{1.14}$$

- Să trecem să rezolvăm această ecuaţie care, deoarece $i = -1/i$, se poate rescrie,

$$i\hbar\frac{d\hat{U}}{\hat{U}} = \hat{H}dt \quad \text{prin integrare obţinem}$$

$$\ln\hat{U} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}t \quad \text{sau} \quad \boxed{\hat{U}(t) = e^{-i\,\hat{H}t/\hbar}} \tag{1.15}$$

Hamiltonian $\hat{H}$ independent de timp

- Dacă H este număr pur şi simplu, soluţia ecuaţiei (1.14) este:

$$\hat{U}(t) = e^{-iHt/\hbar} \tag{1.16}$$

- Dacă $\hat{H}$ este operator, trebuie folosită dezvoltarea în serie de puteri:

$$\boxed{\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\frac{it}{\hbar}\hat{H}\right)^n} \tag{1.17}$$

- iar derivata temporală $\dot{\hat{U}}$ va fi:

$$\dot{\hat{U}}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{n!}n}_{1/(n-1)!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right)\left(-\frac{it}{\hbar}\hat{H}\right)^{n-1} \underset{\mathrm{m=n-1}}{=} -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\underbrace{\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\left(-\frac{it}{\hbar}\hat{H}\right)^m}_{\hat{U}} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,\hat{U} \tag{1.18}$$

- In acest fel am verificat ecuaţia de mişcare iniţială (1.14). Adică, în cazul în care $\hat{H}$ nu depinde explicit de timp, dezvoltarea în serie (1.17) este soluţie valabilă pentru operatorul de evoluţie $\hat{U}(t)$. Aici avem produse $\hat{H}\hat{H}$ care evident comută, pentru acelaşi $\hat{H}$.

Hamiltonian $\hat{H}(t)$ funcţie de timp

- Dacă $\hat{H}(t)$ şi $\hat{U}(t,t_0)$ sunt funcţii de timp (numere), să verificăm că soluţia $\hat{U}$ (1.17) a ecuaţiei de tip (1.14) $\quad i\hbar\dot{\hat{U}} = \hat{H}(t)\,\hat{U} \quad$ este valabilă ca dezvoltare în serie de puteri. Adică similar (1.17):

$$\boxed{\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1)\right) = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1)\right)^n} \tag{1.19}$$

- iar derivata temporală $\dot{\hat{U}}(t,t_0)$, similar (1.18), va fi:

$$\dot{\hat{U}}(t,t_0) = \sum_n \underbrace{\frac{1}{n!}n}_{1/(n-1)!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\right)\underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_1\,\hat{H}(t_1)\right)^{n-1}} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\,\hat{U}(t,t_0) \tag{1.20}$$

deoarece aici $\quad \boxed{\left[\hat{H}(t),\hat{H}(t_1)\right] = 0}$

- Deci, ecuaţia de mişcare (1.14) pentru funcţia $\hat{U}(t,t_0)$, rămâne valabilă şi în cazul în care $\hat{H}(t,t_0)$ e funcţie de timp.

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_1\,\hat{H}(t_1)\right) \tag{1.21}$$

1.3 Operatorul de evoluţie în teoria cuantică a câmpurilor ($\hat{H}$ necomutativ)

- Fie cazul în care $\hat{H}(t)$ este operator, care luat la momente diferite de timp, nu comută $\boxed{\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t_1)\right] \neq 0}$

- Să dezvoltăm în serie operatorul $\hat{U}(t, t_0)$, similar (1.19), fără să mai purtăm $-i/\hbar$.

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0) &= \exp\left(\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1)\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1)\right)^n \\ &= I + \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1) + \frac{1}{2!}\underbrace{\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1)\int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{H}(t_2)}_{Int} + \ldots\end{aligned}} \tag{1.22}$$

- iar derivata temporală $\dot{\hat{U}}(t, t_0)$, va fi:

$$\begin{aligned}\dot{\hat{U}}(t,t_0) &= 0 + \hat{H}(t) + \frac{1}{2!}\left(\hat{H}(t)\underbrace{\int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{H}(t_2)} + \underbrace{\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1)}\ \hat{H}(t)\right) + \ldots \\ &= \hat{H}(t)\,\hat{U}(t,t_0)\end{aligned} \tag{1.23}$$

- Dacă comutatorul este egal cu zero: $$\boxed{\left[\hat{H}(t), \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1)\right] = 0} \tag{1.24}$$

valabil în mecanica cuantică, atunci termenul din paranteze ar fi

$$2\,\hat{H}(t)\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1), \qquad \text{iar} \qquad \dot{\hat{U}}(t,t_0) = \hat{H}(t)\underbrace{\left(I + \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1) + \ldots\right)}_{\hat{U}(t,t_0)\ (1.22)} = \hat{H}(t)\,\hat{U}(t,t_0),$$

deci dezvoltarea (1.22), în cazul mecanicii cuantice, unde relaţia de comutare (1.24) este valabilă, este soluţie pentru ecuaţia de mişcare (1.14).

- In teoria cuantică a câmpurilor, comutatorul nu mai este egal cu zero: $$\boxed{\left[\hat{H}(t), \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1)\right] \neq 0} \tag{1.25}$$

atunci în ultimul termen din (1.22) împărţim integrarea după t_2 în două integrale, una pentru $t_2 < t_1$ şi una pentru $t_2 > t_1$

$$Int = \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1)\int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{H}(t_2) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) \quad \text{separăm} \int_{t_0}^{t} \rightarrow \int_{t_0}^{t_1} + \int_{t_1}^{t}$$

$$= \int_{t_0}^{t} dt_1 \left\{\int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) + \int_{t_1}^{t} dt_2\, \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\right\}$$

facem ordonarea temporală cu $\hat{H}(t_1)$ la stânga pt. $t_1 > t_2$ şi $\hat{H}(t_2)$ la stânga pt. $t_2 > t_1$

$$= \int_{t_0}^{t} dt_1 \underbrace{\boxed{\int_{t_0}^{t_1} dt_2}}_{t_2 < t_1} \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) + \int_{t_0}^{t} dt_1 \underbrace{\boxed{\int_{t_1}^{t} dt_2}}_{t_2 > t_1} \hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1) \tag{1.26}$$

ultima integrală se poate scrie:

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \underbrace{\boxed{\int_{t_1}^{t} dt_2}}_{t_2>t_1} \hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1) \underbrace{=}^{Fig.1.2} \int_{t_0}^{t} dt_2 \underbrace{\boxed{\int_{t_0}^{t_2} dt_1}}_{t_1<t_2} \hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1)$$
$$\underbrace{=}^{t_1 \leftrightarrow t_2} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) \tag{1.27}$$

adică este egală cu prima integrala (1.26)

Atunci integrala completă (1.26) se poate scrie:

$$Int = \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1) \int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{H}(t_2) = 2\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) \tag{1.28}$$

unde acum avem ordonarea temporală a integralelor cu $t_2 < t_1 < t$. De asemenea, domeniul de integrare al celei de-a II-a integrale $\int_{t_0}^{t_1} dt_2$ este cuprins în domeniul I-ei integrale $\int_{t_0}^{t} dt_1$. In acest fel, factorul 2 din faţa integralei (1.28) se simplifică cu $1/2$ din dezvoltarea (1.22), vezi şi Fig.1.3.

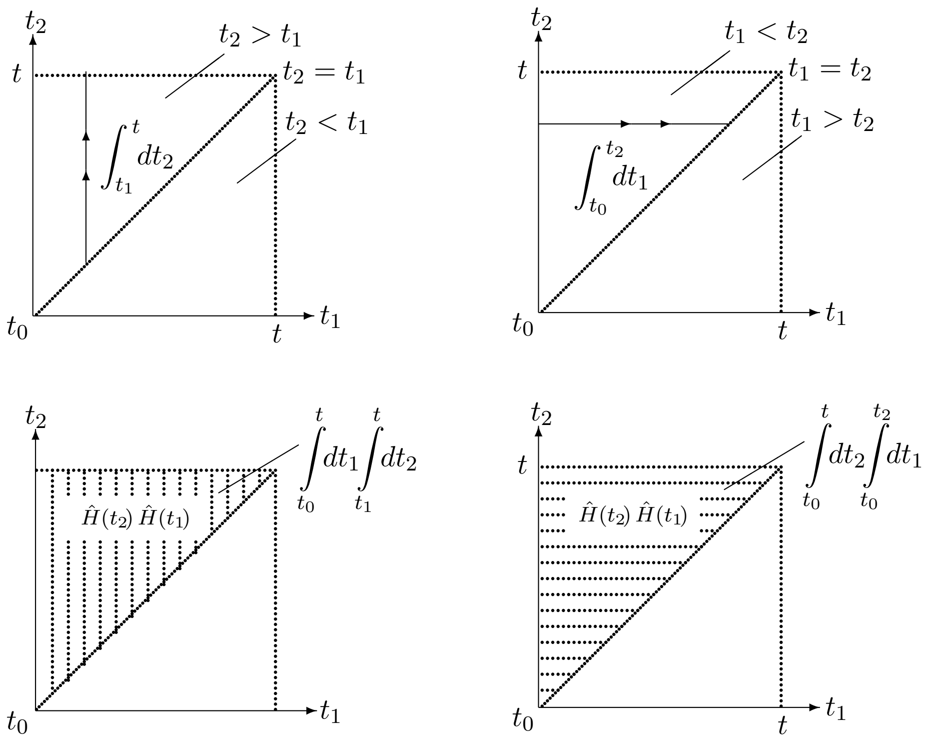

Figura 1.2: Integrările pe domeniile marcate cu $\square$ în relaţia (1.27) pentru $t_2 > t_1$ (partea haşurată vertical) şi pentru $t_1 < t_2$ (partea haşurată orizontal)

Pentru a exprima soluţia $\hat{U}(t,t_0)$ exprimăm termenul general de ordin n al dezvoltării în serie de puteri (1.22), similar cu cel de ordin 2 din (1.22), sub forma (1.28):

$$\frac{1}{n!}\Bigg(\int_{t_0}^{t} dt_1 \hat{H}(t_1)\Bigg)^n =$$

$$= \frac{1}{n}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \left\{\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\ldots\hat{H}(t_n)\right\} \quad + \quad \text{permutări similar (1.26)}$$

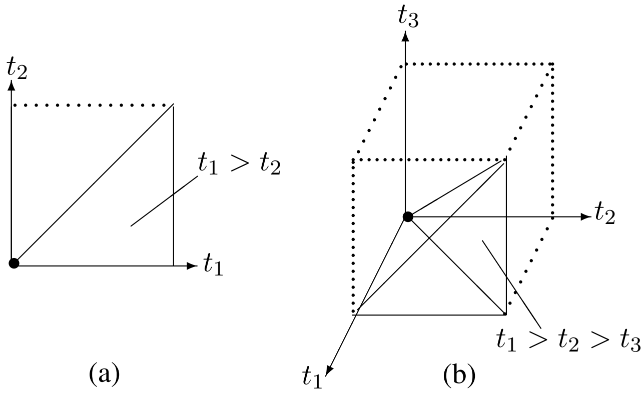

Figura 1.3: Domeniile de integrare sunt în număr de $n!$ pentru fiecare termen al dezvoltării în serie Dyson. (a) pentru termenul de ordin II. (b) pentru termenul de ordin III

pentru a satisface ecuaţia (1.14) $\dot{U} = H(t)U$ trebuie să ordonăm temporal termenii între acolade, astfel ca $\hat{H}(t_1)$ să fie întotdeauna la stânga.

In final, repunem şi coeficientul $-i/\hbar$ omis intenţionat la începutul paragrafului, astfel dezvoltarea operatorului de evoluţie (1.22) devine (atenţie, la numitorul factorului multiplicativ este n (fără !), şi provine de la ultimul termen din serie):

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{U}(t,t_0) &= \sum_n \frac{(-i/\hbar)^n}{n} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \, \hat{T}\left\{\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\ldots\hat{H}(t_n)\right\} \\ &= \hat{T}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t_1)\right\} \end{aligned}} \tag{1.29}$$

unde $\hat{T}$ este operatorul de ordonare temporală $t_1 > t_2 > t_3 \cdots > t_n$.

Aceasta este seria Dyson ca soluţia generală a ecuaţiei Schrödinger pentru operatorul de evoluţie $\hat{U}(t,t_0)$.

1.4 Descrierea de interacţie şi Matricea S

Am văzut că în mecanica cuantică avem diverse descrieri posibile (vezi Descrieri cuantice).

- In *descrierea Schrödinger*, stările $\big|\psi_S(t)\big\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\big|\psi_S(0)\big\rangle$ variază în timp, iar operatorii (observabilele) sunt constante $\hat{A}_S = const.$
- In *descrierea Heisenberg*, prin definiţie, stările $\big|\psi_H\big\rangle = \big|\psi_S(0)\big\rangle = const.$, iar observabilele depind de timp: $\hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}_S\, e^{-i\hat{H}t/\hbar}$
- In *descrierea de Interacţie*, depind de timp atât stările $\big|\psi_I(t)\big\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\big|\psi_S(t)\big\rangle$. cât şi observabilele $\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{A}_S\, e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$. Dependenţa de timp este exprimată cu ajutorul diverselor componente ale Hamiltonian-ului $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, unde $\hat{H}_0$ este componenta de Hamiltonian liber, iar $\hat{H}'$ este Hamiltonian-ul de interacţie (perturbaţie).

Stările $\big|\psi_I(t)\big\rangle$ evoluează Schrödinger cu Hamiltonian-ul de interacţie $\hat{H}'$:

$$\big|\psi_I(t)\big\rangle = e^{-i\hat{H}'t/\hbar}\big|\psi_S(0)\big\rangle \tag{1.30}$$

iar observabilele $\hat{A}_I(t)$ variază Heisenberg cu Hamiltonian-ul liber $\hat{H}_0$:

$$\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{A}_S\, e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \tag{1.31}$$

- Să arătăm că descrierea de interacţie este aplicabilă şi în teoria câmpurilor cuantice.

  In primul rând, câmpurile cuantice în interacţie, bosonice (sau fermionice), satisfac aceleaşi relaţii de comutare (sau anticomutare) la acelaşi timp în descrierea de Interacţie, ca în descrierea Heisenberg.

$$\Big[\hat{\varphi}_H(\vec{x},t), \hat{\pi}_{\varphi_H}(\vec{x}\,',t)\Big] = i\hbar\,\delta(\vec{x}-\vec{x}\,') \tag{1.32}$$

- Folosind legătura între operatorii Heisenberg şi de Interacţie prin operatorul $\hat{U}$:

$$\hat{A}_I(t) = \underbrace{e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\hat{U}}\hat{A}_H(t)\;\underbrace{e^{i\hat{H}t/\hbar}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}}_{\hat{U}^{-1}} = \hat{U}\,\hat{A}_H(t)\,\hat{U}^{-1} \tag{1.33}$$

facem trecerea relaţiei de comutare la acelaşi timp (1.32) între câmpurile din descrierea Heisenberg, la cele din descrierea de Interacţie:

$$\hat{U}\overbrace{\Big[\hat{\varphi}_H(\vec{x},t), \hat{\pi}_{\varphi_H}(\vec{x}\,',t)\Big]}^{\text{operator tip } \hat{A}_H}\hat{U}^{-1} = \hat{U}i\hbar\,\delta(\vec{x}-\vec{x}\,')\,\hat{U}^{-1}$$

$$\hat{U}\Big(\hat{\varphi}_H(\vec{x},t)\hat{\pi}_{\varphi_H}(\vec{x}\,',t) - \hat{\pi}_{\varphi_H}(\vec{x}\,',t)\hat{\varphi}_H(\vec{x},t)\Big)\hat{U}^{-1} = i\hbar\,\delta(\vec{x}-\vec{x}\,')$$

$$\Big(\underbrace{\hat{U}\overbrace{\hat{\varphi}_H(\vec{x},t)}^{\text{op.tip } \hat{A}_H}\hat{U}^{-1}}_{\hat{\varphi}_I}\underbrace{\hat{U}\overbrace{\hat{\pi}_{\varphi_H}(\vec{x}\,',t)}\hat{U}^{-1}}_{\hat{\pi}_I} - \underbrace{\hat{U}\overbrace{\hat{\pi}_{\varphi_H}(\vec{x}\,',t)}\hat{U}^{-1}}_{\hat{\pi}_I}\underbrace{\hat{U}\overbrace{\hat{\varphi}_H(\vec{x},t)}\hat{U}^{-1}}_{\hat{\varphi}_I}\Big) = i\hbar\,\delta(\vec{x}-\vec{x}\,')$$

$$\Big(\hat{\varphi}_I(\vec{x},t)\hat{\pi}_{\varphi_I}(\vec{x}\,',t) - \hat{\pi}_{\varphi_I}(\vec{x}\,',t)\hat{\varphi}_I((\vec{x},t)\Big) = i\hbar\,\delta(\vec{x}-\vec{x}\,')$$

$$\boxed{\Big[\hat{\varphi}_I(\vec{x},t), \hat{\pi}_{\varphi_I}(\vec{x}\,',t),\Big] = i\hbar\delta(\vec{x}-\vec{x}\,')} \tag{1.34}$$

In acest fel am demonstrat valabilitatea relaţiilor de comutare în *descrierea de Interacţie*, iar abordarea câmpurilor în interacţie, fezabilă în teoria cuantică a câmpurilor (QFT).

- Să trecem să studiem întâi operatorul de evoluţie $\hat{U}(t)$ în *descrierea de Interacţie*, introdus în (1.33).

$$\boxed{\hat{U}(t) = e^{i\,\hat{H}_0 t/\hbar}\, e^{-i\,\hat{H}\,t/\hbar}} \tag{1.35}$$

- Să căutăm ecuaţia diferenţială pentru operatorul $\hat{U}(t)$.

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt} &= i\hbar\frac{d}{dt}\Big(e^{i\,\hat{H}_0 t/\hbar}\, e^{-i\,\hat{H}t/\hbar}\Big) = i\hbar\left[\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\, e^{-i\hat{H}t/\hbar} + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\Big(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Big)e^{-i\hat{H}t/\hbar}\right] \\
&= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\Big(-\hat{H}_0\Big)e^{-i\hat{H}t/\hbar} + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}\, e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\underbrace{\Big(-\hat{H}_0+\hat{H}\Big)}_{\hat{H}'}\, e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\
&= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}'\, e^{-i\hat{H}t/\hbar}
\end{aligned}$$

Cu ajutorul relaţiei (1.31) între operatorul în *descrierea Schrödinger* şi cel în *descrierea de Interacţie*, avem,

$$\hat{H}'_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\,\hat{H}'\, e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad\Longrightarrow\quad e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\,\hat{H}'_I(t)\, e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} = \hat{H}' \tag{1.36}$$

atunci înlocuind $\hat{H}'$, obţinem: $\quad i\hbar\dfrac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}'_I(t)\, e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\, e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{H}'_I\,\hat{U}$

obţinem ecuaţia diferenţială pentru $\hat{U}$ este:

$$\boxed{i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}'_I(t)\,\hat{U}} \tag{1.37}$$

- Să trecem la rezolvarea acestei ecuaţii pentru $\hat{U}$.

Dacă $\hat{H}'_I$ ar fi o funcţie, atunci am putea rezolva simplu (1.37), adică,

$$\hat{U}(t) \stackrel{?}{=} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')\,dt'\right) \tag{1.38}$$

Dar aici apare o problemă. Hamiltonian-ul $\hat{H}'_I$ este operator. De aceea pentru a putea acţiona, exponenţiala trebuie dezvoltată în serie de puteri. Dar şi aici apare o problemă, legată de ordinea de acţiune a operatorilor.

- Să studiem aceste probleme. Pentru aceasta facem dezvoltarea exponenţialei (1.38):

$$\begin{aligned}
\hat{U}(t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{H}'_I(t')\right) \\
&= \hat{I} + \left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{H}'_I(t')\right) + \frac{1}{2}\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{H}'_I(t')\right)^2 + \ldots
\end{aligned} \tag{1.39}$$

De exemplu, dacă vrem să verificăm ecuaţia (1.37), trebuie să facem diferenţierea în raport cu t. Atunci termenul pătratic, ca produs a doi termeni $(ab)' = a'b + ab'$, va da:

$$-\frac{1}{2\hbar^2}\hat{H}'_I(t)\left(\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}'_I(t')\right) - \frac{1}{2\hbar^2}\left(\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{H}'_I(t')\right)\hat{H}'_I(t) \tag{1.40}$$

Al doilea termen pare în regulă, deoarece $\hat{H}'_I$ se va plasa lângă $\hat{U}(t)$ asupra căruia acţionează în (1.37). Dar în primul termen $\hat{H}'_I$ nu mai este plasat bine, fiind înaintea integralei, iar comutatorul $\left[\hat{H}'_I(t'), \hat{H}'_I(t)\right] \neq 0$, dacă $t' \neq t$.

- Soluţia este furnizată de dezvoltarea Dyson. Adică, relaţia (1.38) devine:

$$\hat{U}(t) = \hat{T}\,\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}'_I(t')\,dt'\right) \tag{1.41}$$

unde $\hat{T}$ este introdus ca operator de ordonare temporală, prin care operatorii luaţi la timpul cel mai mare sunt plasaţi la stânga. De exemplu, pentru doi operatori $\hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2)$, avem

$$\hat{T}\left(\hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2)\right) = \begin{cases}\hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2) & t_1 > t_2\\ \hat{A}_2(t_2)\hat{A}_1(t_1) & t_2 > t_1\end{cases} \tag{1.42}$$

Atunci termenul pătratic (aproximaţia de ordin II) din (1.39), folosind schimbarea domeniilor de integrare (1.28) din dezvoltarea Dyson, se va scrie

$$\begin{aligned}\left(\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{H}'_I(t')\right)^2 &\equiv \int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}'_I(t_1)\int_{t_0}^{t} dt_2\,\hat{H}'_I(t_2) = \int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t} dt_2\,\hat{H}'_I(t_2)\hat{H}'_I(t_1)\\ &= 2\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{H}'_I(t_2)\hat{H}'_I(t_1) \qquad \text{unde} \quad t > t_1 > t_2\end{aligned}$$

Cel mai important lucru este faptul că în ultima relaţie operatorii $\hat{H}'(t_i)$ sunt ordonaţi temporal, pentru a efectua integralele la rând, dinspre dreapta spre stânga. Atenţie şi la limitele de integrare.

Inlocuind termenul pătratic exprimat mai sus, în (1.39), obţinem expresia operatorului de evoluţie pentru primii doi termeni ai dezvoltării Dyson:

$$\hat{U}(t) = \hat{I} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} dt_1\hat{H}'_I(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{H}'_I(t_1)\,\hat{H}'_I(t_2) \tag{1.43}$$

Dacă în (1.39) facem şi dezvoltările de ordin $3, 4, \ldots$ obţinem:

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\,\hat{H}'_I(t_1)\,\hat{H}'_I(t_2)\ldots\hat{H}'_I(t_n) \tag{1.44}$$

$$t_n < t_{n-1} < \cdots < t_2 < t_1 < t$$

In acest fel am obţinut soluţia explicită în locul celei definită prin exponenţială (1.35). Am regăsit dezvoltarea în serie Dyson (1.29) pentru operatorul de evoluţie $\hat{U}(t)$, de data asta exprimat prin Hamiltonian-ul de Interacţie $\hat{H}'_I(t)$, şi cu originea timpului t_0:

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0) &= \sum_n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \; \hat{T}\Big\{\hat{H}'_I(t_1)\hat{H}'_I(t_2)\ldots\hat{H}'_I(t_n)\Big\} \\ &= \hat{T}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}'_I(t_1)\right\}\end{aligned}} \tag{1.45}$$

unde $\hat{T}$ este operatorul de ordonare temporală $t > t_1 > t_2 > t_3 \cdots > t_n$.

Reamintim relaţiile (1.35) şi (1.36) de la care am pornit iniţial, cu $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$,

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{i\,\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar}\, e^{-i\,\hat{H}\,(t-t_0)/\hbar} \tag{1.35}$$

$$\hat{H}'_I(t,t_0) = e^{i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar}\, \hat{H}'\, e^{-i\hat{H}_0(t-t_0)/\hbar} \tag{1.36}$$

1.4.1 Operatorul de evoluţie în descrierea de Interacţie

Să vedem cum acţionează operatorul de evoluţie $\hat{U}(t,t_0)$ asupra stărilor cuantice în descrierea de Interacţie $\psi_I(t)$. Aceasta ne conduce în final la expresia operatorului $\hat{S}$ de împrăştiere şi a matricii S.

- In descrierea de interacţie, am văzut, stările $\psi_I(t)$ evoluează conform ecuaţiei de mişcare tip Schrödinger (1.1), cu Hamiltonian-ul de Interacţie $\hat{H}'_I(t)$:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\big|\psi_I(t)\big\rangle = \hat{H}'_I\,\big|\psi_I(t)\big\rangle \tag{1.46}$$

Rezolvarea acestei ecuaţii se face similar cu cea (1.37) pentru operatorul $\hat{U}$, având soluţia similară (1.38):

$$\big|\psi_I(t)\big\rangle = \big|\psi_I(t_0)\big\rangle + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}'_I(t_1)\,\big|\psi_I(t_1)\big\rangle \tag{1.47}$$

De asemenea, ca în cazul operatorului $\hat{U}(t,t_0)$ (1.45), folosind acelaşi proces de iteraţie, putem scrie soluţia explicit ca o exponenţială cu operatorul $\hat{H}'_I(t)$:

$$\big|\psi_I(t)\big\rangle = \hat{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\hat{H}'_I(t_1)\right)\big|\psi_I(t_0)\big\rangle = \hat{U}(t,t_0)\big|\psi_I(t_0)\big\rangle \tag{1.48}$$

Am ajuns în acest fel, să controlăm evoluţia temporală a stărilor $\psi_I(t)$. Operatorul $\hat{S}$ este un caz particular al operatorului $\hat{U}(t,t_0)$. Pentru calculele de împrăştiere am considerat:

$$\begin{aligned}\big|i\big\rangle &= \lim_{t\to-\infty}\big|\psi_I(t)\big\rangle \\ \big|f\big\rangle &= \lim_{t\to+\infty}\big|\psi_I(t)\big\rangle\end{aligned} \tag{1.49}$$

Aceaste limite de timp infinite, simplifică calculele şi sunt o bună aproximaţie pentru experimentele reale, în care stările iniţiale sunt preparate departe de punctul de interacţie, iar măsurărarea stărilor finale se face foarte departe. Regiunea unde au loc procesele de împrăştiere este foarte redusă ca dimensiune, astfel că distanţele macroscopice, ce separă diversele componente ale experimentului sunt efectiv infinite.
Cu aceste condiţii, expresia (1.48) cu operatorului de evoluţie, se poate scrie:

$$\begin{aligned}\big|\psi_I(t)\big\rangle &= \hat{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1 \hat{H}_I'(t_1)\right)\big|i\big\rangle \\ \big|\psi_I(\infty)\big\rangle &= \hat{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt_1 \hat{H}_I'(t_1)\right)\big|i\big\rangle\end{aligned} \tag{1.50}$$

Din aceste relaţii putem în final exprima operatorul de împrăştiere $\hat{S}$. Se ştie că probabilitatea de împrăştiere într-o stare finală particulară $\big|f\big\rangle$, este proiecţia pe această stare:

$$\big\langle f\big|\psi_I(\infty)\big\rangle = \left\langle f\middle|\hat{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt_1 \hat{H}_I'(t_1)\right)\middle|i\right\rangle = \left\langle f\middle|\hat{S}\middle|i\right\rangle \tag{1.51}$$

Dacă exprimăm starea $\big|\psi(\infty)\big\rangle$ prin operatorul de evoluţie, avem,

$$\boxed{\hat{S} = \hat{T}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\, \hat{H}_I'(t)\right)\right] = \hat{T}\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d^4x\, \hat{\mathcal{H}}_I'(x)\right)\right]} \tag{1.52}$$

In acest fel am obţinut o descriere completă a matricii $\hat{S}$ cu elementul de matrice:

$$S_{fi} = \left\langle f\middle|\hat{S}\middle|i\right\rangle \tag{1.53}$$