Časový vývoj v kvantové mechanice

Martin Štefaňák

3. listopadu 2020

Schrödingerova rovnice

- Uzavřený systém — částice neinteraguje s okolím
- Částice má hamiltonián $\hat{H}$
- Stav částice v čase t_0 je $|\psi\rangle$

Postulát 4

Stav částice v čase $t > t_0$ je popsán řešením Schrödingerovy rovnice

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

s počáteční podmínkou $|\psi(t_0)\rangle = |\psi\rangle$

- Platí až do okamžiku měření

Zachování normy vektoru

- Norma vektoru se časovým vývojem nemění

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle &= \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)|\right)}_{\frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle\right)}_{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle} \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle\right) = 0
\end{aligned}
$$

- Důležité pro pravděpodobnostní interpretaci kvantové mechaniky

$$
\begin{aligned}
\hat{A}|\phi_j\rangle &= a_j|\phi_j\rangle, \quad |\psi(t)\rangle = \sum_j \langle\phi_j|\psi(t)\rangle|\phi_j\rangle \\
\|\psi(t)\|^2 &= \sum_j |\langle\phi_j|\psi(t)\rangle|^2 = \sum_j W_{\psi(t),A=a_j} = 1
\end{aligned}
$$

Zachování normy vlnové funkce

- Hustota pravděpodobnosti

$$\rho(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x},t)|^2 = \overline{\psi}(\vec{x},t)\psi(\vec{x},t)$$

- Hustota toku pravděpodobnosti

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{i\hbar}{2M}\left(\psi(\vec{x},t)\vec{\nabla}\overline{\psi}(\vec{x},t) - \overline{\psi}(\vec{x},t)\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t)\right)$$

Rovnice kontinuity

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0$$

- Zachovávající se náboj — norma vlnové funkce

$$q = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \rho(\vec{x},t)d^3x = \|\psi(t)\|^2 \implies \frac{dq}{dt} = \frac{d}{dt}\|\psi(t)\|^2 = 0$$

Stacionární stavy

- $\hat{H}$ nezávisí na čase $\Longrightarrow$ vlastní funkce jsou stacionární stavy

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n = \hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \implies \psi_n(\vec{x},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\psi_n(\vec{x})$$

- Globální fáze $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$ nemá fyzikální význam
- Pravděpodobnosti výsledků všech měření nezávisí na čase

$$W_{\psi_n(t),A=a_j} = |(\phi_j,\psi_n(t))|^2 = |(\phi_j,\psi_n)|^2$$

- Analogie rovnovážných stavů v klasické mechanice ($x(t) = x_0$)

Řešení Schrödingerovy rovnice — bodové spektrum

- Nechť $\hat{H}$ má čistě bodové spektrum

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}, \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{I}$$

- Počáteční podmínku v čase t_0 rozložím do báze

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle|n\rangle$$

- Schrödingerova rovnice je lineární — stav v čase $t > t_0$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|n\rangle$$

Znám vlastní vektory $\hat{H} \Longrightarrow$ umím vyřešit Schrödingerovu rovnici

Superpozice stacionárních stavů

- Superpozice stacionárních stavů s různou energií není stacionární stav

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= a|1\rangle + b|2\rangle, \quad E_1 \neq E_2 \\
|\psi(t)\rangle &= a\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t-t_0)}|1\rangle + b\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_2(t-t_0)}|2\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t-t_0)}\left(a|1\rangle + b\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)(t-t_0)}|2\rangle\right) \neq |\psi\rangle
\end{aligned}
$$

- Pravděpodobnosti měření pozorovatelných nekompatibilních s $\hat{H}$ mohou záviset na čase

$$
\begin{aligned}
W_{\psi(t),A=a_j} &= |\langle\phi_j|\psi(t)\rangle|^2 \\
&= \left|a\langle\phi_j|1\rangle + b\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)(t-t_0)}\langle\phi_j|2\rangle\right|^2
\end{aligned}
$$

Řešení Schrödingerovy rovnice — volná částice

- $\hat{H}$ má jen spojité spektrum

$$\hat{H}\psi_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2M}\psi_{\vec{p}}, \quad \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}, \quad (\psi_{\vec{p}}, \psi_{\vec{p}'}) = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

- Počáteční podmínku v čase t_0 rozložím do spojité báze

$$\psi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} (\psi_{\vec{p}}, \psi)\psi_{\vec{p}}(\vec{x})\, d^3p$$

- Stav v čase $t > t_0$

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} (\psi_{\vec{p}}, \psi) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}(t-t_0)}\psi_{\vec{p}}(\vec{x})\, d^3p$$

Časový vývoj je unitární

- Linearita Schrödingerovy rovnice $\Longrightarrow \exists$ lineární operátor $\hat{U}(t, t_0)$

$$\hat{U}(t, t_0)|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle, \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$$

- Časový vývoj nemění skalární součin vektorů

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle = \langle\psi|\frac{d}{dt}\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0)|\phi\rangle = 0$$

- Evoluční operátor $\hat{U}(t, t_0)$ je unitární

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{I}$$

Evoluční operátor

- Evoluční operátor je určený rovnicí

$$\hat{H}\hat{U}(t,t_0) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0), \quad \hat{U}(t_0,t_0) = \hat{I}$$

- $\hat{H}$ nezávisí na čase

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$$

- Pokud $\hat{H}$ má čistě bodové spektrum

$$\hat{H} = \sum_n E_n|n\rangle\langle n| \quad \Longrightarrow \quad \hat{U}(t,t_0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|n\rangle\langle n|$$

$$\hat{U}(t,t_0)|\psi\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\langle n|\psi\rangle|n\rangle$$

Integrály pohybu

- $\hat{A}$ je integrál pohybu $\Longleftrightarrow$ střední hodnota nezávisí na čase

$$\forall|\psi(t)\rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{\psi(t)} = 0$$

- Z definice střední hodnoty a Schrödingerovy rovnice lze odvodit

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}] + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \right\rangle_{\psi(t)}$$

$\hat{A}$ je integrál pohybu $\Longleftrightarrow$ $\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}] + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} = 0$

- Pokud $\hat{A}$ nezávisí parametricky na čase

$\hat{A}$ je integrál pohybu $\Longleftrightarrow$ je kompatibilní s hamiltoniánem

Ehrenfestovy teorémy

- Hamiltonián tvaru $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\vec{x})$.
- Pohybové rovnice pro střední hodnoty složek polohy a hybnosti

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{Q}_j \rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{\hat{P}_j}{M} \right\rangle_{\psi(t)}, \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{P}_j \rangle_{\psi(t)} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x_j} \right\rangle_{\psi(t)} = \langle F_j \rangle_{\psi(t)}$$

- Pokud $V(\vec{x})$ je max. kvadratický v x_i (F_j je max. lineární)

$$\langle F_j \rangle_{\psi(t)} = F_j \left(\langle \hat{Q}_i \rangle_{\psi(t)} \right)$$

- Střední hodnoty pak splňují klasické pohybové rovnice

$$\dot{\overline{q}}_j = \frac{\overline{p}_j}{M}, \quad \dot{\overline{p}}_j = F_j(\overline{q}_i)$$

Koherentní stavy LHO

- Vlastní vektory anihilačního operátoru

$$\hat{a}_-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

- Rozvoj do báze vlastních vektorů $\hat{H}$

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

- Časový vývoj koherentního stavu

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |n\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{2}\omega t} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle \end{aligned}$$