Kapitola 14

Různé obrazy časového vývoje v kvantové mechanice

Přehled teorie

Schrödingerův obraz

Dosud jsme pracovali s kvantovou mechanikou v tzv. Schrödingerově obraze, kdy se s časem vyvíjí stavy a operátory pozorovatelných jsou typicky na čase nezávislé (maximálně se mohou měnit s časem podle nějakého předepsaného způsobu, ale ne v důsledku dynamiky). Časový vývoj stavů je dán Schrödingerovou rovnicí

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle, \tag{14.1}$$

s počáteční podmínkou $|\psi(t_0)\rangle$ v nějakém čase t_0. Časový vývoj stavů lze alternativně popsat pomocí evolučního operátoru $\hat{U}(t, t_0)$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \tag{14.2}$$

který je lineární, unitární

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t_0, t) = \hat{U}^{\dagger}(t_0, t), \tag{14.3}$$

a splňuje vlastnost

$$\hat{U}(t_3, t_1) = \hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1). \tag{14.4}$$

Evoluční operátor ve Schrödingerově obrazu je určen řešením diferenciální rovnice

$$\hat{H}\hat{U}(t, t_0) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}. \tag{14.5}$$

V případě, že je hamiltonián na čase nezávislý má evoluční operátor tvar

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}. \tag{14.6}$$

V dalším budou pozorovatelné a kety bez horního indexu značit Schrödingerův obraz. V nějakém čase t_1 (nemusí být nutně roven t_0) se různé obrazy budou shodovat.

Heisenbergův obraz

V Heisenbergově obraze je časový vývoj převeden ze stavů na pozorovatelné. Stavy v Heisenbergově obraze jsou definovány předpisem

$$|\psi^H(t;t_1)\rangle = \hat{U}^{-1}(t,t_1)|\psi(t)\rangle = |\psi(t_1)\rangle, \tag{14.7}$$

tj. vektory se s časem nemění. Vztah mezi pozorovatelnou v Heisenbergově a Schrödingerově obraze je

$$\hat{A}^H(t;t_1) = \hat{U}^{-1}(t,t_1)\hat{A}(t)\left(\hat{U}^{-1}(t,t_1)\right)^\dagger = \hat{U}^\dagger(t,t_1)\hat{A}(t)\hat{U}(t,t_1). \tag{14.8}$$

Předpovědi výsledků měření, jako např. střední hodnoty, jsou v obou obrazech ve všech časech shodné

$$\langle\hat{A}\rangle_{\psi(t)} = \langle\hat{A}^H(t;t_1)\rangle_{\psi(t_1)}. \tag{14.9}$$

Časovou derivací rovnice (14.8) a použitím rovnice pro evoluční operátor ve Schrödingerově obrazu (14.5) dostaneme pohybovou rovnici pro pozorovatelné v Heisenbergově obrazu

$$\frac{d}{dt}\hat{A}^H(t;t_1) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}^H(t;t_1),\hat{H}^H(t)\right] + \hat{U}^\dagger(t,t_1)\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\hat{U}(t,t_1), \tag{14.10}$$

s počáteční podmínkou

$$\hat{A}^H(t_1;t_1) = \hat{A}(t_1). \tag{14.11}$$

Tato rovnice je analogií Hamiltonovy pohybové rovnice v klasické mechanice

$$\frac{da}{dt} = \{a,H\} + \frac{\partial a}{\partial t}. \tag{14.12}$$

Pokud je hamiltonián $\hat{H}$ nezávislý na čase, pak komutuje s $\hat{U}(t,t_1)$ a tedy

$$\hat{H}^H(t) \equiv \hat{H}. \tag{14.13}$$

V takovém případě můžeme pohybovou rovnici (14.10) zapsat ve tvaru

$$\frac{d}{dt}\hat{A}^H(t;t_1) = \hat{U}^\dagger(t,t_1)\left(\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}(t),\hat{H}\right] + \frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\right)\hat{U}(t,t_1). \tag{14.14}$$

Pokud $\hat{A}$ je integrál pohybu, tj.

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}(t),\hat{H}\right] + \frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t} = 0, \tag{14.15}$$

pak je v Heisenbergově obraze konstatní

$$\hat{A}^H(t;t_1) = \hat{A}(t_1). \tag{14.16}$$

Diracův (interakční) obraz

Diracův (interakční) obraz je kombinací Schrödingerova a Heisenbergova obrazu, kde na čase závisí stavy i pozorovatelné. Uvažujeme hamiltonián tvaru

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{14.17}$$

kde $\hat{H}_0$ je hamiltonián nezávislý na čase, pro který známe operátor časového vývoje

$$\hat{U}_0(t, t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_1)}. \tag{14.18}$$

Operátor $\hat{V}$ popisuje např. interakci s vnějším polem, které může být závislé na čase.

Stavy a pozorovatelné v Diracově obraze jsou definovány vztahy

$$|\psi^D(t; t_1)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t, t_1)|\psi(t)\rangle, \tag{14.19}$$
$$\hat{A}^D(t; t_1) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_1)\hat{A}(t)\hat{U}_0(t, t_1). \tag{14.20}$$

Pohybová rovnice pro stavy v Diracově obraze je

$$\hat{V}^D(t; t_1)|\psi^D(t; t_1\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi^D(t; t_1)\rangle. \tag{14.21}$$

Stavy se tedy vyvíjí podle interakčního členu v Diracově obraze. Pohybová rovnice pro pozorovatelné v Diracově obraze

$$\frac{d}{dt}\hat{A}^D(t; t_1) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}^D(t; t_1), \hat{H}_0\right] + \hat{U}_0^\dagger(t, t_1)\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\hat{U}_0(t, t_1), \tag{14.22}$$

má stejný tvar jako v Heisenbergově obraze s časově nezávislým hamiltoniánem $\hat{H}_0$ (14.14).

Můžeme také zavést evoluční operátor v Diracově obraze $\hat{U}^D(t, t_0; t_1) \equiv \hat{S}(t, t_0; t_1)$ vztahem

$$|\psi^D(t; t_1)\rangle = \hat{S}(t, t_0; t_1)|\psi^D(t_0; t_1)\rangle. \tag{14.23}$$

$\hat{S}(t, t_0; t_1)$ je řešením rovnice

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{S}(t, t_0; t_1) = \hat{V}^D(t; t_1)\hat{S}(t, t_0; t_1), \tag{14.24}$$

s počáteční podmínkou

$$\hat{S}(t_0, t_0; t_1) = \hat{I}. \tag{14.25}$$

Porovnáním (14.2) a (14.19) vidíme, že evoluční operátor v Diracově obraze můžeme zapsat jako součin

$$\hat{S}(t, t_0; t_1) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_1)\hat{U}(t, t_0)\hat{U}_0(t_0, t_1), \tag{14.26}$$

kde $\hat{U}(t, t_0)$ je evoluční operátor pro celkový hamiltonián (14.17).

V Heisenberově a Diracově obrazu je parametr t_1, který určuje, kdy se obrazy shodují se Schrödingerovým. V praxi se setkáme se dvěma případy. Buď zkoumáme časový vývoj o konečný čas, pak se typicky volí $t_1 = t_0$. V takovém případě t_1 v předchozích vztazích nemusíme vypisovat. Evoluční operátor v Diracově obraze se zjednoduší na

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0).$$

Ve druhém případě, který odpovídá rozptylu, uvažujeme $t_0 \to -\infty$, $t \to +\infty$, a t_1 se typicky volí rovné nule a opět se explicitně nevypisuje. Evoluční operátor v Diracově obraze v limitě definuje tzv. operátor S-matice

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to +\infty}} \hat{S}(t, t_0) = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to +\infty}} \hat{U}_0^\dagger(t, 0)\hat{U}(t, t_0)\hat{U}_0(t_0, 0)$$

Příklady

Cvičení 44. *Nalezněte $\hat{X}^H(t)$ a $\hat{P}^H(t)$ pro LHO. Určete časový vývoj středních hodnot polohy a hybnosti v libovolném stavu $|\psi(t)\rangle$. Čemu je rovno $\hat{a}^H(t)$, resp. $\hat{a}^{H\dagger}(t)$? Z tvaru $\hat{a}^H(t)$ určete časový vývoj koherentních stavů. Uvažujte, že v čase $t_0 = 0$ se Schrödingerův a Heisenbergův obraz shodují.*

Návod: Hamiltonián LHO je

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{X}^2.$$

Pro komutátory $\hat{X}$ a $\hat{P}$ s hamiltoniánem nalezneme

$$\begin{aligned}
\left[\hat{X}, \hat{H}\right] &= \left[\hat{X}, \frac{\hat{P}^2}{2M}\right] = i\hbar\frac{\hat{P}}{M}, \\
\left[\hat{P}, \hat{H}\right] &= \left[\hat{X}, \frac{1}{2}M\omega^2\hat{X}^2\right] = -i\hbar M\omega^2\hat{X}.
\end{aligned}$$

Pohybové rovnice pro operátory polohy a hybnosti v Heisenbergově obraze pak mají tvar

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\hat{X}^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\left[\hat{X}, \hat{H}\right]\hat{U} = \frac{\hat{P}^H}{M}, \\
\frac{d}{dt}\hat{P}^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\left[\hat{P}, \hat{H}\right]\hat{U} = -M\omega^2\hat{X}^H.
\end{aligned}$$

Postup řešení těchto rovnic je stejný jako v klasické mechanice, jen integrační konstanty budou operátory. První rovnici zderivujeme podle času a dosadíme za $\frac{d}{dt}\hat{P}^H$ ze druhé

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{X}^H = -\omega^2\hat{X}^H.$$

Řešením rovnice je

$$\hat{X}^H(t) = \hat{A}\cos\omega t + \hat{B}\sin\omega t,$$

kde $\hat{A}$ a $\hat{B}$ jsou na čase nezávislé operátory. Pro $\hat{P}^H(t)$ pak dostaneme

$$\hat{P}^H(t) = -M\omega\hat{A}\sin\omega t + M\omega\hat{B}\cos\omega t.$$

Operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ určíme z počátečních podmínek

$$\begin{aligned}\hat{X}^H(0) &= \hat{X} = \hat{A}, \\ \hat{P}^H(0) &= \hat{P} = M\omega\hat{B}.\end{aligned}$$

Pro LHO jsou tedy operátory polohy a hybnosti v Heisenbergově obraze rovny

$$\begin{aligned}\hat{X}^H(t) &= \hat{X}\cos\omega t + \frac{\hat{P}}{M\omega}\sin\omega t, \\ \hat{P}^H(t) &= -M\omega\hat{X}\sin\omega t + \hat{P}\cos\omega t.\end{aligned}$$

Tyto výsledky jsou přesnou analogií řešení klasických pohybových rovnic (důvodem je, že hamiltonián LHO je kvadratický v poloze i hybnosti). Díky vztahu (14.9) odsud snadno nalezneme časový vývoj středních hodnot polohy a hybnosti v libovolném stavu

$$\begin{aligned}\langle\hat{X}\rangle_{\psi(t)} &= \langle\hat{X}^H(t)\rangle_{\psi(0)} = x_0\cos\omega t + \frac{p_0}{M\omega}\sin\omega t, \\ \langle\hat{P}\rangle_{\psi(t)} &= \langle\hat{P}^H(t)\rangle_{\psi(0)} = -M\omega x_0\sin\omega t + p_0\cos\omega t,\end{aligned}$$

kde x_0 a p_0 značí počáteční střední hodnoty polohy a hybnosti

$$x_0 = \langle\hat{X}\rangle_{\psi(0)}, \quad p_0 = \langle\hat{P}\rangle_{\psi(0)}.$$

Střední hodnoty polohy a hybnosti LHO sledují klasickou trajektorii, jak ostatně plyne i z Ehrenfestova teorému.

Pro posunovací operátory platí komutační relace s hamiltoniánem

$$\left[\hat{H}, \hat{a}\right] = -\hbar\omega\hat{a}, \quad \left[\hat{H}, \hat{a}^\dagger\right] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

Pohybová rovnice pro anihilační operátor v Heisenbergově obraze je tedy

$$\frac{d}{dt}\hat{a}^H = \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\left[\hat{a}, \hat{H}\right]\hat{U} = -i\omega\hat{a}^H.$$

Jejím řešením s počáteční podmínkou $\hat{a}^H(0) = \hat{a}$ je

$$\hat{a}^H(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}.$$

Kreační operátor dostaneme hermitovským sdružením

$$\hat{a}^{H\dagger}(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}.$$

Koherentní stav v Heisenbergově obraze je nezávislý na čase

$$|\alpha^H\rangle = \hat{U}^\dagger|\alpha(t)\rangle = |\alpha(0)\rangle,$$

a platí pro něj

$$\hat{a}^H(t)|\alpha^H\rangle = \hat{a}e^{-i\omega t}|\alpha(0)\rangle = \alpha(0)e^{-i\omega t}|\alpha^H\rangle.$$

Ve Schrödingerově obraze dostaneme

$$\hat{a}|\alpha(t)\rangle \;=\; \hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{a}\hat{U}\hat{U}^\dagger|\alpha(t)\rangle = \hat{U}\hat{a}^H(t)|\alpha^H\rangle = \hat{U}\alpha(0)e^{-i\omega t}|\alpha(0)\rangle = \alpha(0)e^{-i\omega t}|\alpha(t)\rangle,$$

tj. koherentní stav zůstává koherentní v každém čase, vlastní číslo $\hat{a}$ se s časem mění

$$\alpha(t) = \alpha(0)e^{-i\omega t}.$$

Stejný výsledek jsme obdrželi v zimním semestru řešením Schrödingerovy rovnice, ale k tomu jsme potřebovali nejprve nalézt rozklad koherentního stavu do báze vlastních vektorů hamiltoniánu.

Cvičení 45. *Spin $\frac{1}{2}$ s magnetickým momentem μ je v homogenním magnetickém poli ve směru osy z $\vec{B} = (0, 0, B_0)$. Určete časový vývoj operátorů složek spinu v Heisenbergově obraze $\hat{S}_j^H(t)$. V čase $t_0 = 0$ se Schrödingerův a Heisenbergův obraz shoduje.*

Návod: Hamiltonián pro spin $\frac{1}{2}$ v magnetickém poli je

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = -\frac{\mu B_0}{\hbar}\hat{S}_3 = -\omega_0\hat{S}_3.$$

Komutátory složek spinu s hamiltoniánem jsou

$$\begin{aligned}
\left[\hat{S}_1, \hat{H}\right] &= -\omega_0 i\hbar\varepsilon_{132}\hat{S}_2 = i\hbar\omega_0\hat{S}_2, \\
\left[\hat{S}_2, \hat{H}\right] &= -\omega_0 B_0 i\hbar\varepsilon_{231}\hat{S}_1 = -i\hbar\omega_0\hat{S}_1, \\
\left[\hat{S}_3, \hat{H}\right] &= 0.
\end{aligned}$$

Třetí složka spinu je integrál pohybu, v Heisenbergově obraze je stejná jako ve Schrödingerově

$$\hat{S}_3^H(t) = \hat{S}_3.$$

Pohybové rovnice pro první dvě složky v Heisenbergově obrazu jsou

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\hat{S}_1^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\left[\hat{S}_1, \hat{H}\right]\hat{U} = \omega_0\hat{S}_2^H, \\
\frac{d}{dt}\hat{S}_2^H &= \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\left[\hat{S}_2, \hat{H}\right]\hat{U} = -\omega_0\hat{S}_1^H.
\end{aligned}$$

První rovnici zderivujeme podle času a dosadíme za $\frac{d}{dt}\hat{S}_2^H$ ze druhé

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{S}_1^H = -\omega_0^2 \hat{S}_1^H.$$

Řešením této rovnice je

$$\hat{S}_1^H(t) = \hat{A}\cos(\omega_0 t) + \hat{B}\sin(\omega_0 t).$$

Pro druhou složku spinu v Heisenbergově obrazu dostaneme

$$\hat{S}_2^H(t) = -\hat{A}\sin(\omega_0 t) + \hat{B}\cos(\omega_0 t).$$

Operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ určíme z počátečních podmínek

$$\begin{aligned} \hat{S}_1^H(0) &= \hat{S}_1 = \hat{A}, \\ \hat{S}_2^H(0) &= \hat{S}_2 = \hat{B}. \end{aligned}$$

Složky operátoru spinu v Heisenbergově obraze jsou tedy

$$\begin{aligned} \hat{S}_1^H(t) &= \hat{S}_1\cos(\omega_0 t) + \hat{S}_2\sin(\omega_0 t), \\ \hat{S}_2^H(t) &= -\hat{S}_1\sin(\omega_0 t) + \hat{S}_2\cos(\omega_0 t), \\ \hat{S}_3^H(t) &= \hat{S}_3. \end{aligned}$$

Časový vývoj odpovídá rotaci okolo osy z o úhel $\omega_0 t$.

Cvičení 46. *Uvažujte dvouhladinový atom s bazickými stavy $|e\rangle$ (excitovaný stav) a $|g\rangle$ (základní stav), které odpovídají energiím $\pm E$. Hamiltonián volného atomu má tvar*

$$\hat{H}_0 = E|e\rangle\langle e| - E|g\rangle\langle g| = \frac{\hbar\omega_0}{2}|e\rangle\langle e| - \frac{\hbar\omega_0}{2}|g\rangle\langle g|,$$

kde $\omega_0 = \frac{2E}{\hbar}$ je přechodová frekvence atomu (odpovídá úhlové frekvenci fotonu vyzářeného při přeskoku z excitované hladiny na základní). Atom je v klasickém harmonickém elektrickém poli o frekvenci ω (hvězdička značí komplexní sdružení)

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t} + \vec{E}_0^* e^{i\omega t}.$$

V dipólové aproximaci je interakce atomu s polem popsaná operátorem

$$\hat{V}(t) = -\hat{\vec{d}} \cdot \vec{E}(t),$$

kde operátor dipólového momentu atomu je

$$\hat{\vec{d}} = \vec{d}|e\rangle\langle g| + \vec{d}^*|g\rangle\langle e|.$$

Nalezněte interakční člen v Diracově obraze $\hat{V}^D(t)$. V čase $t_0 = 0$ se Schrödingerův a Diracův obraz shodují.

Návod: Nejprve upravíme interakční hamiltonián ve Schrödingerově obraze

$$\begin{aligned}\hat{V}(t) &= -\left(\vec{d}|e\rangle\langle g| + \vec{d}^*|g\rangle\langle e|\right)\cdot\left(\vec{E}_0 e^{-i\omega t} + \vec{E}_0^* e^{i\omega t}\right)\\ &= -\left(\vec{d}\cdot\vec{E}_0 e^{-i\omega t} + \vec{d}\cdot\vec{E}_0^* e^{i\omega t}\right)|e\rangle\langle g| - \left(\vec{d}^*\cdot\vec{E}_0 e^{-i\omega t} + \vec{d}^*\cdot\vec{E}_0^* e^{i\omega t}\right)|g\rangle\langle e|.\end{aligned}$$

Označíme si

$$\vec{d}\cdot\vec{E}_0 = \frac{\alpha}{\hbar},\quad \vec{d}\cdot\vec{E}_0^* = \frac{\widetilde{\alpha}}{\hbar}.$$

Interakční člen je potom

$$\hat{V}(t) = -\hbar\left(\alpha e^{-i\omega t} + \widetilde{\alpha} e^{i\omega t}\right)|e\rangle\langle g| - \hbar\left(\widetilde{\alpha}^* e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}\right)|g\rangle\langle e|.$$

Evoluční operátor pro volný atom je

$$\hat{U}_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} = e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}|e\rangle\langle e| + e^{i\frac{\omega_0}{2}t}|g\rangle\langle g| = e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}\left(|e\rangle\langle e| + e^{i\omega_0 t}|g\rangle\langle g|\right).$$

Interakční hamiltonián v Diracově obraze je potom roven

$$\begin{aligned}\hat{V}^D(t) &= \hat{U}_0^\dagger(t)\hat{V}(t)\hat{U}_0(t) = \left(|e\rangle\langle e| + e^{-i\omega_0 t}|g\rangle\langle g|\right)\hat{V}(t)\left(|e\rangle\langle e| + e^{i\omega_0 t}|g\rangle\langle g|\right)\\ &= -\hbar\left(\alpha e^{-i\omega t} + \widetilde{\alpha} e^{i\omega t}\right)e^{i\omega_0 t}|e\rangle\langle g| - \hbar\left(\widetilde{\alpha}^* e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}\right)e^{-i\omega_0 t}|g\rangle\langle e|.\end{aligned}$$

Označíme-li $\Delta = \omega - \omega_0$, pak lze $\hat{V}^D(t)$ zapsat ve tvaru

$$\hat{V}^D(t) = -\hbar\left(\alpha e^{-i\Delta t} + \widetilde{\alpha} e^{i(\omega+\omega_0)t}\right)|e\rangle\langle g| - \hbar\left(\widetilde{\alpha}^* e^{-i(\omega+\omega_0)t} + \alpha^* e^{i\Delta t}\right)|g\rangle\langle e|.$$

Ve standardní bázi

$$|g\rangle \equiv \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad |e\rangle \equiv \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

je interakční člen v Diracově obraze reprezentován maticí

$$V^D(t) = -\hbar\begin{pmatrix}0 & \widetilde{\alpha}^* e^{-i(\omega+\omega_0)t} + \alpha^* e^{i\Delta t}\\ \alpha e^{-i\Delta t} + \widetilde{\alpha} e^{i(\omega+\omega_0)t} & 0\end{pmatrix}. \tag{14.27}$$