Časový vývoj v kvantové mechanice

Martin Štefaňák

9. dubna 2021

Přehled

Schrödingerova rovnice

- Uzavřený systém — částice neinteraguje s okolím
- Částice má hamiltonián $\hat{H}$
- Stav částice v čase $t_0 = 0$ je $|\psi\rangle$
- Pro $t > 0$ je stav popsán řešením Schrödingerovy rovnice s počáteční podmínkou

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle, \quad |\psi(0)\rangle = |\psi\rangle$$

- Časový vývoj popsaný Schrödingerovou rovnicí platí až do okamžiku měření

Stacionární stavy

- Uvažujeme $\hat{H}$ nezávislý na čase
- Vlastní vektory $\hat{H}$ jsou stacionární stavy

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|n\rangle \implies |n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle$$

- Globální fáze $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ nemá fyzikální význam
- V každém čase je to vlastní vektor hamiltoniánu

$$\hat{H}|n(t)\rangle = E_n|n(t)\rangle$$

- Pravděpodobnosti přechodu do libovolného stavu $|\phi\rangle$ nezávisí na čase

$$W_{n(t)\to\phi} = |\langle\phi|n(t)\rangle|^2 = |\langle\phi|n\rangle|^2$$

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

Řešení Schrödingerovy rovnice pomocí stacionárních stavů

- Vlastní vektory $\hat{H}$ tvoří ONB

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}, \quad \mathscr{H} = [|n\rangle | n = 1 \ldots N]_\lambda$$

- Počáteční podmínku v čase $t_0 = 0$ rozložím do báze

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

- Schrödingerova rovnice je lineární — stav v čase $t > 0$

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

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

Superpozice stacionárních stavů

- Superpozice stacionárních stavů s různou energií není stacionární stav

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= a|1\rangle + b|2\rangle, \quad E_1 \neq E_2, \quad \text{pro jednoduchost předp.} \quad a, b \in \mathbb{R} \\
|\psi(t)\rangle &= a\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|1\rangle + b\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}|2\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\left(a|1\rangle + b\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_1)t}|2\rangle\right) \neq |\psi\rangle
\end{aligned}
$$

- Relativní fáze mezi stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ závisí na čase
- Pr. přechodu do stavu ϕ bude záviset na čase (pro jednoduchost předp. $\langle\phi|n\rangle \in \mathbb{R}$)

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

Zachování normy a skalárního součinu

- Časový vývoj zachovává velikost vektoru

$$\begin{aligned}\|\psi(t)\|^2 &= \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\langle n|\psi\rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_m t}\overline{\langle m|\psi\rangle}\,\underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} \\ &= \sum_{n=1}^{N}|\langle n|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2\end{aligned}$$

- Zachování normy je důležité pro pravděpodobnostní interpretaci stavu
- Stejným postupem se ukáže, že časový vývoje nemění skalární součin dvou vektorů

Časový vývoj v kvantové mechanice lze popsat unitárním operátorem — evoluční operátor $\hat{U}(t)$

Přehled

1. Schrödingerova rovnice a její důsledky

2. Spin v homogenním magnetickém poli

Časový vývoj spinu v homogenním magnetickém poli

- Hamiltonián spinu v magnetickém poli, speciálně pro pole $\vec{B} = (0, 0, B)$

$$\hat{H} = \frac{2\mu_B}{\hbar}\hat{\vec{S}} \cdot \vec{B} = \frac{2\mu_B}{\hbar} B\hat{S}_z$$

- Matice hamiltoniánu ve standardní bázi — násobek Pauliho matice σ_3

$$H = \frac{2\mu_B}{\hbar} BS_3 = \mu_B B\sigma_3 = \begin{pmatrix} \mu_B B & 0 \\ 0 & -\mu_B B \end{pmatrix}$$

- Vlastní čísla hamiltoniánu — $E_\pm = \pm\mu_B B$
- Vlastní vektory — shodné s vlastními vektory projekce spinu do osy z

$$\hat{H}|z, \pm\rangle = E_\pm|z, \pm\rangle, \quad |z, +\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z, -\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Kety $|z, \pm\rangle$ jsou stacionární stavy

Řešení Schrödingerovy rovnice

- Počáteční podmínka — např. spin má v čase $t = 0$ kladnou projekci do osy x

$$|\psi(t=0)\rangle = |x,+\rangle$$

- Rozklad do báze stacionárních stavů

$$|x,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z,+\rangle + |z,-\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

- Stav spinu v čase $t > 0$ — popsaný vektorem $|\psi(t)\rangle$

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}|z,+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}|z,-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_B Bt}|z,+\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}\mu_B Bt}|z,-\rangle)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\frac{\omega}{2}t}(e^{-i\omega t}|z,+\rangle + |z,-\rangle) \equiv \frac{e^{i\frac{\omega}{2}t}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\1\end{pmatrix}, \quad \omega = \frac{2\mu_B B}{\hbar}\end{aligned}$$

Řešení Schrödingerovy rovnice

- Vektor $|\psi(t)\rangle$ není stacionární stav — pravděpodobnosti měření závisí na čase
- Například pravděpodobnost naměření kladné/záporné projekce spinu do osy x se harmonicky mění s časem

$$
\begin{aligned}
W_{\psi(t),x+} &= |\langle x,+|\psi(t)\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}\left(e^{-i\omega t}+1\right)\right|^2 = \frac{1}{4}\left(1+e^{-i\omega t}+e^{i\omega t}+1\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(1+\cos\left(\omega t\right)\right) \\
W_{\psi(t),x-} &= 1 - W_{\psi(t),x+} = \frac{1}{2}\left(1-\cos\left(\omega t\right)\right)
\end{aligned}
$$

- Dochází k precesi spinu okolo magnetického pole
- Larmorova frekvence — $\omega = \frac{2\mu_B B}{\hbar}$

Vlastní stav projekce spinu do směru $\vec{n}$

- Každý stav spinu lze interpretovat jako stav s kladnou projekcí do nějakého směru $\vec{n}$

$$\vec{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$$

- Matice operátoru projekce spinu do směru $\vec{n}$

$$S_{\vec{n}} = \vec{n}\cdot\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

- Vlastní čísla $\pm\frac{\hbar}{2}$, vlastní vektor odpovídající kladné projekci

$$|\vec{n},+\rangle = \mathcal{N}\left(\sin\theta e^{-i\varphi}|z,+\rangle + (1-\cos\theta)|z,-\rangle\right) \equiv \mathcal{N}\begin{pmatrix} \sin\theta e^{-i\varphi} \\ 1-\cos\theta \end{pmatrix}$$

- Normalizace — $\mathcal{N} = (2(1-\cos\theta))^{-1/2}$

Vlastní stav $|\vec{n},+\rangle$, Blochova sféra

- Vlastní vektor $|\vec{n},+\rangle$ lze upravit do tvaru

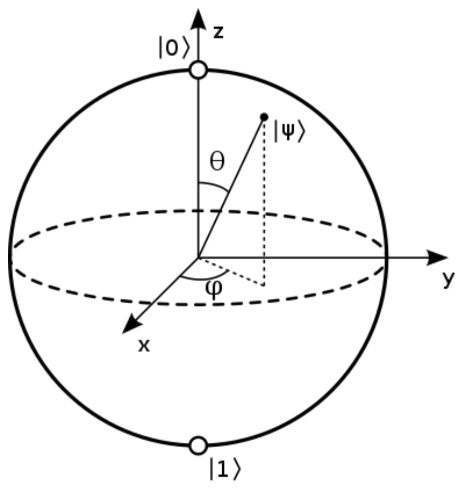
$$|\vec{n},+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}|z,+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|z,-\rangle$$

- Každý spinor lze napsat pomocí nějakého směrového vektoru $\vec{n}$ (resp. θ a φ)

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= ae^{i\alpha}|z,+\rangle + be^{i\beta}|z,-\rangle \\ &= e^{i\beta}\left(ae^{i(\alpha-\beta)}|z,+\rangle + \sqrt{1-a^2}|z,-\rangle\right) \end{aligned}$$

- Každý stav spinu $\frac{1}{2}$ odpovídá bodu na povrchu Blochovy sféry

Blochova sféra



$$|0\rangle = |z,+\rangle, \quad |1\rangle = |z,-\rangle$$

Precese spinu okolo magnetického pole

- Magnetické pole ve směru osy z, počáteční podmínka $|x,+\rangle$
- Stav spinu v čase $t > 0$ — popsaný vektorem $|\psi(t)\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\omega}{2}t}\left(e^{-i\omega t}|z,+\rangle + |z,-\rangle\right) = e^{i\frac{\omega}{2}t}|\vec{n}(t),+\rangle$$

- V čase t má kladnou projekci do směru $\vec{n}(t)$

$$\theta = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi = \omega t \implies \vec{n}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos(\omega t), \sin(\omega t), 0\right)$$

- Časový vývoj — precese spinu v rovině xy úhlovou rychlostí ω (Larmorova frekvence) okolo magnetického pole $\vec{B} = (0, 0, B)$ (osa z)

Magnetické pole v libovolném směru

- Libovolné homogenní magnetické pole $\vec{B} = (B_1, B_2, B_3) = B\vec{b}$
- Matice hamiltoniánu ve standardní bázi

$$H = \mu_B B\, \vec{b} \cdot \vec{\sigma} = \mu_B B \begin{pmatrix} b_3 & b_1 - ib_2 \\ b_1 - ib_2 & -b_3 \end{pmatrix}$$

- Můžeme najít stacionární stavy — vlastní vektory $\hat{S}_{\vec{b}}$ — $|\vec{b}, \pm\rangle$
- Jiný postup — najdeme evoluční operátor $\hat{U}(t)$ — časový vývoj z $t_0 = 0$ do t

$$\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = |\psi(t)\rangle$$

- Rovnice pro evoluční operátor — dosadíme do Schrödingerovy rovnice $\forall|\psi(0)\rangle$

$$\hat{H}\hat{U}(t) = i\hbar\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \implies \hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

Evoluční operátor pro spin v magnetickém poli

- Matice evolučního operátoru ve standardní bázi — exponenciála matice
- Můžeme definovat pomocí Taylorova rozvoje — převedeme na mocniny matice

$$U(t) = e^{-\frac{i}{2}\omega t\ \vec{b}\cdot\vec{\sigma}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{2}\omega t\right)^n \left(\vec{b}\cdot\vec{\sigma}\right)^n$$

- Součin dvou Pauliho matic

$$\sigma_i\sigma_j = I\delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \implies \left(\vec{b}\cdot\vec{\sigma}\right)^2 = b_i\sigma_i b_j\sigma_j = b_i b_j \delta_{ij} I + i b_i b_j \varepsilon_{ijk}\sigma_k = I$$

- Pro sudé a liché mocniny $\vec{b}\cdot\vec{\sigma}$ platí

$$\left(\vec{b}\cdot\vec{\sigma}\right)^{2n} = I, \quad \left(\vec{b}\cdot\vec{\sigma}\right)^{2n+1} = \vec{b}\cdot\vec{\sigma}$$

Evoluční operátor pro spin v magnetickém poli

- Sumu v Taylorově rozvoji rozdělíme na sudé a liché členy

$$U(t) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!}\left(\frac{\omega}{2}t\right)^{2n}\right] I - i\left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\left(\frac{\omega}{2}t\right)^{2n+1}\right] \vec{b}\cdot\vec{\sigma}$$

- Řady jsou Taylorův rozvoj cosinu a sinu
- Evoluční operátor spinu v magnetickém poli je roven matici

$$\begin{aligned} U(t) = \cos\left(\frac{\omega}{2}t\right) I \quad &- \quad i\sin\left(\frac{\omega}{2}t\right)\vec{b}\cdot\vec{\sigma} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\omega}{2}t\right) - ib_3\sin\left(\frac{\omega}{2}t\right) & i(b_1 - ib_2)\sin\left(\frac{\omega}{2}t\right) \\ i(b_1 + ib_2)\sin\left(\frac{\omega}{2}t\right) & \cos\left(\frac{\omega}{2}t\right) + ib_3\sin\left(\frac{\omega}{2}t\right) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Časový vývoj spinu v magnetickém poli

- Magnetické pole v libovolném směru — $\vec{B} = B\,\vec{b}$
- Počáteční podmínka — kladná projekce spinu do osy z — $|\phi(0)\rangle = |z,+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
- Stav spinu v čase $t > 0$

$$|\phi(t)\rangle = U(t)|\phi(0)\rangle = \left(\cos\left(\frac{\omega}{2}t\right) - ib_3 \sin\left(\frac{\omega}{2}t\right)\right)|z,+\rangle + i(b_1 + ib_2)\sin\left(\frac{\omega}{2}t\right)|z,-\rangle$$

- Pravděpodobnost naměření kladné nebo záporné projekce spinu do osy z čase t

$$W_{\psi(t),z+} = \cos^2\left(\frac{\omega}{2}t\right) + b_3^2 \sin^2\left(\frac{\omega}{2}t\right) = \frac{1+b_3^2}{2} + \frac{1-b_3^2}{2}\cos(\omega t)$$

$$W_{\psi(t),z-} = (b_1^2 + b_2^2)\sin^2\left(\frac{\omega}{2}t\right) = \frac{b_1^2 + b_2^2}{2}(1 - \cos(\omega t))$$

Magnetické pole ve směru osy z

- Evoluční operátor je exponenciála z diagonální matice — je to diagonální matice

$$U(t) = \cos\left(\frac{\omega}{2}t\right) I - i\sin\left(\frac{\omega}{2}t\right)\sigma_3 = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}t} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}$$

- Počáteční podmínka — kladná projekce spinu do osy x

$$|\psi(0)\rangle = |x,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z,+\rangle + |z,-\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Stav v čase $t > 0$

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}t} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \\ e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}$$

- Stejný výsledek jako jsme dostali rozkladem do stacionárních stavů
- Známe $U(t)$ — snadno najdeme časový vývoj pro libovolný počáteční stav