$\boxed{\text{QMI - 7}}$ Více o časovém vývoji v QM

OPAKOVÁNÍ (z kapitoly II přednáška 7 ... 21.10.)

... postulát o časovém vývoji: $\boxed{i\hbar\,\partial_t|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle}$ ... (tSR)

⇒ pro H nezávislé na čase: • $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi_0\rangle$ ... Evoluční operátor

kde $\hat{U}(t) = \exp\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\} = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n = \sum_n \hat{P}_n \exp\{-\frac{i}{\hbar}E_n t\}$

$\longrightarrow \hat{P}_n = \sum_\alpha |E_n\alpha\rangle\langle E_n\alpha|$

• stacionární stavy: $\hat{H}|E_n,\alpha\rangle = E_n|E_n,\alpha\rangle$

→ časový vývoj $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|E_n,\alpha\rangle$ ... jen fáze ... t měření nezávisí na t

→ obecný stav $|\psi\rangle = \sum_{n\alpha} c_{n\alpha}|E_n\alpha\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_{n,\alpha} c_{n\alpha}|E_n,\alpha\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

• integrály pohybu: $[\hat{H},\hat{A}] = 0 \Rightarrow [\hat{U}(t),\hat{A}] = 0$ měření $\hat{A}$ nezávisí na t

(zachovávající se veličiny)

$\boxed{\text{Pozn:}}$ interference

$$|\psi\rangle = c\,e^{-i\omega_1 t}|E_1\rangle + c\,e^{-i\omega_2 t}|E_2\rangle \quad \dots \quad \omega_1 = \frac{1}{\hbar}E_1$$

$$\langle A\rangle = \langle\psi_t|A|\psi_t\rangle = \langle E_1|\hat{A}|E_1\rangle + \langle E_2|\hat{A}|E_2\rangle$$

$$+ \langle E_1|\hat{A}|E_2\rangle e^{i\boxed{\omega_1-\omega_2}t} + \langle E_2|\hat{A}|E_1\rangle e^{-i\boxed{\omega_1-\omega_2}t}$$

interference

$\boxed{\text{Pozn:}}$ integrály pohybu pro volnou částici: $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$ ... $\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{L}}$

• $\boxed{\text{časově závislý } \hat{H}(t)}$

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

Lineární dif. rov. $|\psi_0\rangle = |\psi(t=0)\rangle$

$$\dots \quad |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi_0\rangle \qquad \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t) = \hat{H}(t)\hat{U}(t)} \dots$$

$|\psi_0\rangle = U|\psi_0\rangle$ ...

Evoluční operátor

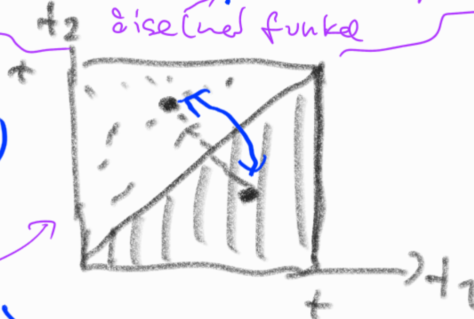
řešení Dysonovou řadou:

$$\hat{U}(t) = \int_0^t \frac{d\hat{U}}{d\tau}d\tau + \hat{U}(0) = \hat{I} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(\tau)\hat{U}(\tau)\,d\tau$$

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{U}(t) = \hat{I} &+ \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t_1)dt_1 + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\,\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) + \dots \\ &\dots + \frac{1}{(i\hbar)^n}\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\dots\int_0^{t_{n-1}}dt_n\,\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\dots\hat{H}(t_n) + \dots\end{aligned}}$$

$$[\hat H(t_1), \hat H(t_2)] = 0 \quad \forall\, t_1, t_2$$ ← zjednodušený případ

NAPŘ: $\hat H(t) = f(t)\,\hat H_0$ — číselná funkce, operátorová konst.

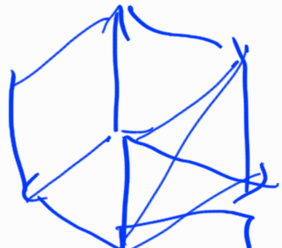


$$-\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, \hat H(t_1)\hat H(t_2)$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2\, \boxed{\hat H(t_1)\hat H(t_2)}$$

symetrický výraz $\quad \{ H(t_2)H(t_1),\ H(t_1)H(t_2) \}$

$$H(t_1)H(t_2)H(t_3) \qquad \frac{1}{6}$$



OBECNĚ:

$$= \frac{1}{n!}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \cdots \int_0^t dt_n\, H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)$$

$$= \frac{1}{n!}\left[\int_0^t H(\tau)d\tau\right]^n$$

řešení pro speciální případ $[\hat H(t_1), \hat H(t_2)] = 0 \ \forall t_1, t_2$

$$\boxed{U(t) = \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \left[\int_0^t H(\tau)d\tau\right]^n = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(\tau)d\tau\right\}}$$

zobecnění $\quad U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

• obecně: $T\left(\hat H(t_1)\hat H(t_2)\right) = \hat H(t_<)\,\hat H(t_>)$ $\qquad t_< = \min(t_1,t_2)$, $\ t_> = \max(t_1,t_2)$

$$\int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n\, H(t_1)\cdots H(t_n) = \frac{1}{n!}\int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_n\, T\left(\hat H(t_1)\cdots \hat H(t_n)\right)$$

$$= \frac{1}{n!}\, T\left(\left[\int_0^t d\tau\, H(\tau)\right]^n\right)$$

$$\boxed{U(t) = T\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(\tau)d\tau\right\}}$$ T-exponenciála ← OBECNÉ FORMÁLNÍ ŘEŠENÍ

Pohyb bodové částice 3D (1D)

• hustota a tok pravděpodobnosti – rovnice kontinuity

$\psi(\vec x) \ \dots\ |\vec x\rangle \qquad p_x = \langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle = |\psi(x)|^2 = \rho(x)$

Hustota pravděp.

$\int \rho(x)\,dx = 1 \quad \dots \quad \psi(x,t) \quad \dots \quad \rho(x,t)$

$\longrightarrow \quad \dot\psi = \frac{1}{i\hbar} H\psi \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$

rovnice kontinuity $\boxed{\partial_t \rho(x) + \mathrm{div}\, \vec{j}(x,t) = 0}$ (const)

$$\partial_t \rho = \partial_t \psi^* \psi = \dot{\psi}^* \psi + \underline{\psi^* \dot{\psi}} = -\nabla\cdot\vec{j}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[\psi^* \Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right] + \cancel{\frac{\psi^* V\psi - V\psi^*\psi}{i\hbar}}$$

$$\nabla\cdot\left(\frac{\hbar i}{2m}\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right]\right) = -\nabla\cdot\vec{j}$$

$$\boxed{\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\left\{\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right\} = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\, \psi^*\nabla\psi}$$

$v \quad - \quad v^*$ hustota toku pravděpodob.

srovn. POZNÁMKY:

operátor rychlosti ... $\hat{v} = \frac{\hat{p}}{m} = -\frac{i\hbar}{m}\nabla$

$$\vec{j} = \mathrm{Re}\ \psi^* \hat{v}\psi \qquad \langle\psi|\hat{v}|\psi\rangle = \int \vec{j}\, d^3x$$

pozorování: $\psi(x,t) = R(x,t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}S(x,t)}$ ... $\rho = R^2$

$$\vec{j} = R^2 \frac{1}{m}\vec{\nabla} S = \rho \boxed{\frac{1}{m}\vec{\nabla} S} \qquad (\rho\cdot\vec{v})$$

stacionární stavy $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathrm{div}\, \vec{j} = 0$

PŘ: rovinná vlna $\psi = N e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$ ... $\vec{j} = |N|^2 \frac{\vec{p}}{m}$

$$\psi = A_+ e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} + A_- e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \qquad \vec{j} = \frac{\vec{p}}{m}\left\{|A_+|^2 - |A_-|^2\right\}$$

obecně neplatí ... tok obecně není aditivní

- **Evoluční operátor v souřadnicové reprezentaci**

(propagátor) $\boxed{t_2 > t_1}$

$$|\psi(t_2)\rangle = \hat{G}^{(+)}(t_2,t_1)|\psi(t_1)\rangle = \Theta(t_2-t_1)\hat{U}(t_2,t_1)|\psi(t_1)\rangle$$

$$(*) \quad \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} - \hat{H}\right)\hat{G}^{(+)}(t_2,t_1) = i\hbar\,\delta(t_2-t_1) \quad \hat{1}$$

Greenův operátor (+SR) ... RETARDOVANÝ

ADVANCOVANÝ G-operátor (TSR) $\hat{G}^{(-)}(t_2,t_1) = -\theta(t_1-t_2)\hat{U}(t_2,t_1)$

(řeší (*))

v x-reprez. $\langle x_2|\psi(t_2)\rangle = \langle x_2|\hat{G}^{(+)}(t_2,t_1)|\psi(t_1)\rangle$

$\int |x_1\rangle\langle x_1|\, dx_1 = \hat{I}$

$$\psi(x_2,t_2) = \int dx_1\, G^{(+)}(x_2,t_2,x_1,t_1)\,\psi(x_1,t_1) \leftarrow$$

propagátor $\langle x_2|\hat{G}^{(+)}(t_2,t_1)|x_1\rangle \equiv G^{(+)}(x_2,t_2,x_1,t_1)$

časový vývoj vln fce $t=t_1$ $\psi = \delta(x-x_1)$

-- amplituda pravd. že částice se z bodu (x_1,t_1) přesune do (x_2,t_2)

Propagátor volné částice:

$$G_0^{(+)}(\vec{x}_2,t_2,\vec{x}_1,t_1) = \theta(t_2-t_1)\langle\vec{x}_2|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t_2-t_1)}|\vec{x}_1\rangle$$

$\langle x|p\rangle = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}$ $\quad I = \int|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\,d^3p$

$$= \theta(t_2-t_1)\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\exp\Big\{\frac{i}{\hbar}\Big[\vec{p}\cdot\underbrace{(\vec{x}_2-\vec{x}_1)}_{\vec{x}} - \frac{p^2}{2m}\underbrace{(t_2-t_1)}_{t}\Big]\Big\}$$

$\hookrightarrow p_x x + p_y y + p_z z$ $\quad p_x^2+p_y^2+p_z^2$

součin 3 podobných $I_x\, I_y\, I_z$

$$I_x = \int\frac{dp_x}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - \frac{p_x^2}{2m}t)}$$

$p_x \to \pm\infty$ osciluje $\lim_{\varepsilon\to 0+}\int \Big|_{t\to t-i\varepsilon} \sim e^{-\varepsilon\frac{p_x^2}{2m}}$

$$\boxed{p^2\frac{t}{2m} - px} = \frac{t}{2m}\Big(\underbrace{p - \frac{x}{2}\frac{2m}{t}}_{y}\Big)^2 - \frac{x^2}{4}\frac{2m}{t}$$

$\sim e^{\frac{i}{\hbar}\frac{t}{2m}y^2}$

$\int e^{-ax}\ldots\sqrt{\frac{\pi}{a}}$

$\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{\pi\hbar 2m}{2i\,t\,\hbar\pi}}$

$$I_x = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}\cdot\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{x^2}{4}\frac{2m}{t}\right)$$

závěr: propagátor volné částice

$$\boxed{G_0^{(+)}(\vec{x}_2, t_2, \vec{x}_1, t_1) = \Theta(t_2, t_1)\left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{i m}{2\hbar}\frac{(\vec{x}_2-\vec{x}_1)^2}{t_1-t_2}\right)}$$

$$t = t_2 - t_1$$