Časový vývoj v kvantové mechanice

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

Dva obecné případy

1) je-li $|\Psi(t_0)\rangle$ vlastním vektorem hamiltoniánu

$$\hat{H}|\Psi(t_0)\rangle = E\,|\Psi(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t_0)\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}} \quad \ldots \text{ řešení časové Schrödingerovy rovnice}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}E\,\underbrace{|\Psi(t_0)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}}_{|\Psi(t)\rangle} \Leftrightarrow -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}E\,|\Psi(t)\rangle$$

Jak se to projeví na měření:

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t_0)|\,\cancel{e^{\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}}\,\hat{A}\,\cancel{e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}}\,|\Psi(t_0)\rangle$$

$$= \langle\Psi(t_0)|\hat{A}|\Psi(t_0)\rangle$$

Vlastní vektory hamiltoniánu odpovídají stacionárním stavům.

2) je-li $|\Psi(t_0)\rangle$ superpozicí vlastních stavů $\Rightarrow$

$$|\Psi_1\rangle\,,\ |\Psi_2\rangle \qquad \hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle\ ;\ n=1,2$$

$$|\psi(t_0)\rangle = a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle \Leftarrow \text{superpozice}$$

Řešení Schrödingerovy rovnice

$$|\psi(t)\rangle = a_1\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t-t_0)}|\psi_1\rangle + a_2\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_2(t-t_0)}|\psi_2\rangle$$

Ověříme, že je to řešení

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}E_1 a_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t-t_0)}|\psi_1\rangle - \frac{i}{\hbar}E_2 a_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2(t-t_0)}|\psi_2\rangle$$

$$-\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}E_1 a_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t-t_0)}|\psi_1\rangle - \frac{i}{\hbar}E_2 a_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2(t-t_0)}|\psi_2\rangle$$

Střední hodnoty veličin $\quad A_{nm} = \langle\psi_n|\hat{A}|\psi_m\rangle$

$$\hat{A} = \sum_{nm} A_{nm}|\psi_n\rangle\langle\psi_m|$$

$\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \longrightarrow$ 3 členy

$$\langle\psi(t)|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi(t)\rangle = a_1^* e^{+\frac{i}{\hbar}E_1(t-t_0)}\, a_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1(t-t_0)} = |a_1|^2$$

$$\langle\psi(t)|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\psi(t)\rangle = |a_2|^2$$

3. člen

$$\boxed{\langle\psi(t)|\psi_1\rangle\langle\psi_2|\psi(t)\rangle} = a_1^* e^{+\frac{i}{\hbar}E_1(t-t_0)}\, a_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2(t-t_0)} = \boxed{a_1^* a_2\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)(t-t_0)}}$$

frekvence

$$\boxed{\omega_{12} = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}}$$

- V časovém vývoji veličin hrají roli pouze rozdíly energie $\Rightarrow$ absolutní hodnota energie je nepodstatná

- Pravděpodobnost vlastních stavů se v čase nemění (v uzavřeném systému)

- V reprezentaci vlastních stavů energie je časový vývoj systému extrémně jednoduchý

Evoluční operátor

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

Schrödingerova rovnice:

poč. stav $|\psi(t_0)\rangle$ je libovolný

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \underline{\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)\right)}|\psi(t_0)\rangle = \underline{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,\hat{U}(t,t_0)}|\psi(t_0)\rangle$$

Pohybová rovnice

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

Poč. podmínka

$$\boxed{\hat{U}(t_0,t_0) = \mathbb{1}}$$

obecné řešení

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

ověření

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$

Unitární operátor

$$\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle \Psi(t_0)|\overbrace{\hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\, U(t,t_0)}^{\mathbb{1}}|\Psi(t_0)\rangle$$

$$= \langle \Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle = 1$$

$$\boxed{\hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\,\hat{U}(t,t_0) = \hat{\mathbb{1}}}$$

Reprezentace $\hat{U}$ ve vlastních vektorech $\hat{H}$

$\hat{U}(t,t_0)$ je diagonální v bázi vlastních vektorů $\hat{H}$

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

Časový vývoj:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0) \overbrace{\sum_n a_n^0 |n\rangle}^{|\Psi(t_0)\rangle}$$

$$= \sum_n a_n^0\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} |n\rangle$$

Časově nezávislý $\hat{H}$ $\Rightarrow$ $\hat{U}(t,t_0)$ ... exponenciála operátoru $\hat{H}$

Pro časově závislý $\hat{H} \Rightarrow \hat{H}(t) \Rightarrow \hat{U}(t,t_0)$ ... časově uspořádaná exponenciála