КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Лекция №5: Квантовая эволюция и представление Гейзенберга

А.Г. Семенов

I. КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА

На предыдущих лекциях мы с вами решали стационарное уравнение Шредингера, которое представляет собой по сути уравнение на собственные состоянии и собственные значения Гамильтониана

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{1}$$

Данные состояния выделены тем, что если систему приготовить в одном из этих состояний, то с течением времени её физическое состояние не будет меняться, а вектор состояния будет эволюционировать путем умножения на фазовый множитель $|n\rangle \to e^{-iE_nt}|n\rangle$ ('это напрямую следует из решения уравнения Шредингера). Однако, в силу самосопряженности Гамильтониана, все его собственные состояния образуют полный базис, и любое исходное состояние может быть разложено по данному базису. Это означает, что решив полностью задачу на собственные состояния Гамилтониана мы можем сразу же записать эволюцию произвольного исходного состояния

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_nt}|n\rangle\langle n|\psi(0)\rangle. \tag{2}$$

Несложно проверить, что данное выражение удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{3}$$

Выражение для состояния системы в произвольный момент времени удобно записать при помощи оператора эволюции, который определяется как

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t} = \sum_n e^{-iE_nt}|n\rangle\langle n|. \tag{4}$$

Оператор эволюции является унитарным $\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t) = \hat{1}$, тривиальным следствием чего является сохранение нормы вектора состояния

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \qquad \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle. \tag{5}$$

Таким образом, для решения задачи о динамическом поведении квантовомеханической системы следует найти её оператор эволюции. Поиск собственных состояний Гамильтониана является одним из подходов, однако в некоторых случаях бывает удобным решить уравнение, которому удовлетворяет оператор эволюции напрямую

$$i\frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t) \qquad\qquad \hat{U}(0) = \hat{1} \tag{6}$$

II. АМПЛИТУДА И ВЕРОЯТНОСТЬ ПЕРЕХОДА

Давайте рассмотрим следующую физическую ситуацию. Предположим, что мы приготовили исследуемую систему в некотором исходном состоянии $|\psi_i\rangle$. Например, произвели над ней процесс измерения, после чего система оказалась в данном состоянии. После этого мы ждем некоторое время t и хотим знать с какой вероятностью система окажется в некотором состоянии $|\psi_f\rangle$. Для этого мы снова измеряем её. При этом измеряем такую наблюдаемую, для которой состояние $|\psi_f\rangle$ является собственным. Вероятность того, что система окажется в этом состояния равна

$$P_{i\to f} = |\langle\psi_f|\hat{U}(t)|\psi_i\rangle|^2 \tag{7}$$

Данная величина называется вероятностью перехода, а величина $F_{i\to f} = \langle\psi_f|\hat{U}(t)|\psi_i\rangle$ называется амплитудой вероятности перехода. Очевидно, что $P_{i\to f} = |F_{i\to f}|^2$. Допустим теперь, что в эксперименте мы исследуем среднее значение некоторой наблюдаемой $\hat{A}$, которое в момент времени t равно

$$\langle\hat{A}\rangle_t = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \langle\psi_i|\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)|\psi_i\rangle \tag{8}$$

По подобной схеме можно построить описание более сложных экспериментов. Заметим, что в ответ входит комбинация $\hat{A}(t) = U^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)$. Ответ, на то, почему данная комбинация существенна дает представление Гейзенберга.

III. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Как мы могли заметить в предыдущей части в ответ для среднего значения вошла комбинация $\hat{A}(t) = U^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)$, но усреднение происходит при этом по исходному состоянию. Это наводит нас на мысль, о том, что данное наблюдение можно развить далее, и в каждый момент времени t производить унитарное преобразование Гильбертова пространства таким образом, чтобы вектор состояния был бы постоянным и равным исходному. При этом операторы, описывающие наблюдаемые начинают зависеть от времени, а вектор состояния системы стоит на месте. Данное представление называется представлением Гейзенберга и оно полностью эквивалентно исходному, которое называется представлением Шредингера. Зависимость операторов от времени дается выражением

$$\hat{A}(t) = U^{\dagger}(t)\hat{A}\hat{U}(t) = e^{i\hat{H}t}\hat{A}e^{-i\hat{H}t} \tag{9}$$

Несложно проверить, что в этом представлении Гамильтониан по прежнему не зависит от времени. Дифференцируя выражение для оператора по времени получаем, что в представлении Гейзенберга операторы удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} = i[\hat{H}, \hat{A}(t)] \tag{10}$$

При этом легко заметить, что $(\hat{A}\hat{B})(t) = \hat{A}(t)\hat{B}(t)$, а значит входящий в данное выражение коммутатор может быть вычислен в представлении Шредингера, после чего следует совершить в представление Гейзенберга. В частности для частицы массы m в потенциале $V(x)$ уравнения движения имеют вид

$$\frac{\partial \hat{x}(t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}(t)}{m} \tag{11}$$

$$\frac{\partial \hat{p}(t)}{\partial t} = -V'(\hat{x}(t)) \tag{12}$$

Несложно видеть, что данные уравнения по форме совпадают с уравнениями Гамильтона, после чего может показаться, что задача о квантовой эволюции может быть решена с использованием знания о решении соответствующей задачи. Однако это не так. Дело в том, что в силу того, что коммутатор $[\hat{x}(t), \partial_t \hat{x}(t)] \neq 0$, вычислять производные следует более аккуратно, и в частности $\partial_t f(\hat{x}(t)) \neq \partial_t \hat{x}(t) f'(\hat{x}(t))$. Исключение составляют линейные системы, такие как, например, гармонический осциллятор. В этом случае легко проверить, что

$$\hat{x}(t) = \hat{x}\cos(\omega t) + \frac{\hat{p}}{m}\sin(\omega t), \tag{13}$$

$$\hat{p}(t) = -m\omega\hat{x}\sin(\omega t) + \omega\hat{p}\cos(\omega t). \tag{14}$$

Таким образом классический и квантовый осцилляторы эволюционируют одинаковым образом.