

3 Ewolucja układu w czasie, trajektorie kwantowe

Pytanie: jak ewoluuje funkcja falowa stanu kwantowego $|\psi\rangle$? W tym rozdziale zajmiemy się ruchem cząstki w jednym wymiarze.

3.1 Trajektorie klasyczne

Klasyczne równania trajektorii cząstki opisanej funkcją Lagrange'a

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) \quad (3.1)$$

wyprowadza się z zasady najmniejszego działania. Działanie zdefiniowane jest jako

$$S[x] = \int_{t_1}^{t_2} L(\dot{x}, x, t) dt. \quad (3.2)$$

Klasyczną trajektorię $\bar{x}(t)$ otrzymuje się z żądania, aby dla S było minimalne. Rozważmy inną trajektorię

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t), \quad y(t_1) = y(t_2) = 0, \quad (3.3)$$

przy czym

$$\bar{x}(t_1) = x_1, \quad \bar{x}(t_2) = x_2.$$

Wyliczmy działanie dla trajektorii (3.3) z dokładnością do wyrazów liniowych w y :

$$\begin{aligned} S[\bar{x} + y] &= \int_{t_1}^{t_2} L(\dot{\bar{x}} + \dot{y}, \bar{x} + y, t) dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left[L(\dot{\bar{x}}, \bar{x}, t) + \dot{y} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + y \frac{\partial L}{\partial x} \right] dt \\ &= S[\bar{x}] + \int_{t_1}^{t_2} \left[-\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial L}{\partial x} \right] y dt. \end{aligned}$$

Zarządamy teraz aby człon liniowy w y zerował się:

$$\delta S \equiv S[\bar{x} + y] - S[\bar{x}] = 0 \quad (3.4)$$

dla dowolnego y . Stąd otrzymujemy klasyczne równania ruchu

$$-\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial L}{\partial x} = 0,$$

których rozwiązaniem jest klasyczna trajektoria $\bar{x}(t)$. Odpowiadające jej działanie nazywamy działaniem klasycznym:

$$S_{\text{cl}} = S[\bar{x}]$$

Trajektorie różne od $\bar{x}(t)$ charakteryzują się na ogół działaniem znacznie większym od S_{cl} , za wyjątkiem trajektorii bardzo bliskich $\bar{x}(t)$, dla których na mocy warunku (3.4) działanie jest praktycznie równe S_{cl} .

3.2 Ewolucja jako sumowanie po trajektoriach

W mechanice klasycznej stwierdzenie, że cząstka w chwili t_a znajduje się w punkcie x_a jest jak najbardziej uprawnione, w mechanice kwantowej możemy mówić tylko o prawdopodobieństwie znalezienia cząstki w punkcie x_a . W mechanice klasycznej w chwili t_b cząstka znajdzie się w punkcie $x_b = \bar{x}(t_b)$. Postawmy pytanie: jak w mechanice kwantowej wygląda prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w punkcie x_b w chwili t_b , jeśli znamy amplitudę prawdopodobieństwa w chwili t_a ? Odpowiedź na to pytanie podał R.P. Feynman, który zapostulował, że szukana amplituda prawdopodobieństwa $\psi(x_b, t_b)$ dana jest wzorem

$$\psi(x_b, t_b) = \int dx_a \sum_{\substack{\text{trajektorie} \\ \text{od } x_a \text{ do } x_b}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_a \rightarrow x_b]} \psi(x_a, t_a). \quad (3.5)$$

gdzie $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$.

Przeanalizujmy wzór (3.5). Najpierw ustalamy punkt x_a i konstruujemy *wszystkie* trajektorie prowadzące od $x_a \rightarrow x_b$. Dla każdej takiej trajektorii wyliczamy działanie $S[x_a \rightarrow x_b]$. Następnie wykonujemy sumę czynników fazowych dla wszystkich trajektorii i mnożymy wynik przez $\psi(x_a, t_a)$. Całą tę procedurę powtarzamy dla *wszystkich* x_a . Interpretując tę procedurę w języku fizyki klasycznej, możemy powiedzieć, że cząstka dochodzi do x_b po wszystkich możliwych trajektoriach. Z kolei największy przyczynek pochodzi od trajektorii klasycznej i bliskich jej trajektorii, ponieważ dla nich działanie jest prawie stałe. Dla pozostałych trajektorii działanie zmienia się i czynniki fazowe $\exp(i/\hbar S)$ będą się w praktyce znosić. Wielkość

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{\substack{\text{trajektorie} \\ \text{od } x_a \text{ do } x_b}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_a \rightarrow x_b]} \quad (3.6)$$

nazywamy *propagatorem*.

3.3 Interferencja fal materii

Przeanalizujmy teraz prosty przykład jednowymiarowy, który pozwoli nam zrozumieć istotę eksperymentu z interferencją fal materii. Rozważmy propagację od $t_a \rightarrow t_b$ i dalej $t_b \rightarrow t_c$. Zgodnie z (3.5) i (3.6)

$$\psi(x_c, t_c) = \int dx_b K(c, b) \psi(x_b, t_b) = \int dx_b K(c, b) \int dx_a K(b, a) \psi(x_a, t_a). \quad (3.7)$$

Jest to bardzo ważny wzór określający prawo składania propagatorów:

$$K(c, a) = \int dx_b K(c, b) K(b, a). \quad (3.8)$$

Załóżmy teraz, że w chwili t_b „oświetlamy” nagle oś x za wyjątkiem 2 małych obszarów wokół ξ i $-\xi$. Jeśli zobaczymy cząstkę to przypadek taki odrzucamy. Następnie w chwili t_c obserwujemy rozkład cząstek na osi x . Przy tak zrealizowanym eksperymencie mamy pewność, że cząstka przeszła przez którąś ze „szczelin” w $\pm\xi$. Wzór (3.7) przyjmuje wówczas postać

$$\begin{aligned} \psi(x_c, t_c) = & \int_{-\xi-\varepsilon}^{-\xi+\varepsilon} dx_b K(c, b) \int dx_a K(b, a) \psi(x_a, t_a) \\ & + \int_{\xi-\varepsilon}^{\xi+\varepsilon} dx_b K(c, b) \int dx_a K(b, a) \psi(x_a, t_a). \end{aligned}$$

A zatem funkcja falowa w chwili t_c ma dwie składowe: jedną odpowiadającą przejściu przez szczelinę $-\xi$ i drugą odpowiadającą przejściu przez szczelinę ξ :

$$\psi(x_c, t_c) = \psi_{-\xi}(x_c, t_c) + \psi_{\xi}(x_c, t_c).$$

Jest to odpowiednik znanego nam już wzoru na dodawanie amplitud. Obliczając $|\psi(x_c, t_c)|^2$ otrzymujemy 4 człony

$$\begin{aligned} |\psi(x_c, t_c)|^2 = & |\psi_{-\xi}(x_c, t_c)|^2 + |\psi_{\xi}(x_c, t_c)|^2 \\ & + \psi_{-\xi}^*(x_c, t_c) \psi_{\xi}(x_c, t_c) + \psi_{\xi}^*(x_c, t_c) \psi_{-\xi}(x_c, t_c). \end{aligned}$$

Dwa ostatnie człony odpowiedzialne są za interferencję.

Warto w tym miejscu zrobić dwie uwagi. Po pierwsze przez cały czas rozpatrywaliśmy propagację *jednej* cząstki. Interferencja jest tu wynikiem faktu nieistnienia toru cząstki w mechanice kwantowej i konieczności uwzględnienia wszystkich trajektorii między punktem początkowym a końcowym. Po drugie, jeśli w jakiś sposób stwierdzilibyśmy, że cząstka w chwili t_b przeszła np. przez szczelinę ξ , to wówczas nie mielibyśmy całkowania wokół $-\xi$ i tym samym nie byłoby interferencji.

Na koniec podamy jakościowy argument za tym, że interferencja zachodzi tylko dla bardzo wąskich szczelin, tj. dla małych ε . Jeżeli ε jest „duże”, to przez szczelinę przechodzi wiązka trajektorii bliskich klasycznej, dla których działanie jest prawie stałe i w związku z tym możemy zaniedbać przyczynki od trajektorii dalekich od trajektorii klasycznej. Wówczas uzyskany obraz nie będzie różnił się od klasycznego i falowa natura cząstek się nie ujawni. Z kolei wąska szczelina „odfiltruje” większość trajektorii bliskich trajektorii klasycznej i w związku z tym powstały za nią obraz będzie w pełni kwantowy, tzn. wszystkie trajektorie dadzą jednakowy przyczynek i powstanie obraz interferencyjny.

3.4 Równanie Schrödingera

Aby poprawnie matematycznie zapisać sumę występującą w definicji propagatora K

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{\substack{\text{trajektorie} \\ \text{od } x_a \text{ do } x_b}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_a \rightarrow x_b]}. \quad (3.9)$$

podzielmy odcinek czasowy $T = t_b - t_a$ na N odcinków o długości ε każdy:

$$t_0 = t_a, t_1 = t_0 + \varepsilon, \dots, t_{N-1} = t_0 + (N-1)\varepsilon, t_N = t_b = t_0 + N\varepsilon.$$

Wówczas

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ N\varepsilon = \text{const}}} \left(\frac{1}{A}\right)^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_a \rightarrow x_b]}, \quad (3.10)$$

gdzie A jest czynnikiem normalizacyjnym. Warto teraz rozpisać całkę definiującą działanie

$$\begin{aligned} S[x] &= \int_{t_1}^{t_2} L(\dot{x}, x, t) dt \\ &= \sum_{k=1}^N L\left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon}, \frac{x_k + x_{k-1}}{2}\right) \varepsilon. \end{aligned}$$

Oznaczając

$$L\left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon}, \frac{x_k + x_{k-1}}{2}\right) = L_{k-1,k}$$

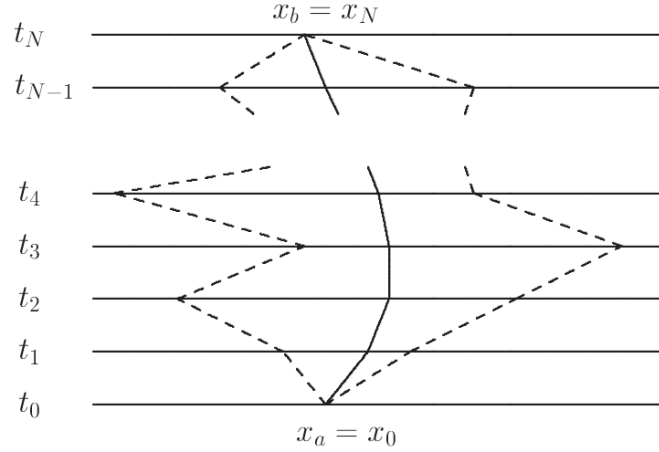
można przepisać propagator (3.6) jako

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ N\varepsilon = \text{const}}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} L_{0,1}} dx_1 \frac{1}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} L_{1,2}} dx_2 \dots \\ &\dots \frac{1}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} L_{N-2,N-1}} dx_{N-1} \frac{1}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} L_{N-1,N}}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Powstaje pytanie, czy wyrażenie (3.11) ma sens z matematycznego punktu widzenia i ile wynosi czynnik normalizacyjny A . Ściśle rzecz biorąc całki po dx_k daje się dobrze określić tylko w *przestrzeni euklidesowej*, tzn. dla *urojonego* czasu $t \rightarrow i\tau$. Nie wchodząc w szczegóły, pokażemy teraz, jak w podejściu sum po trajektoriach można otrzymać równanie Schrödingera.

Rozpatrzmy ewolucję funkcji falowej o jeden „krok” czasowy ε

$$K(x, t + \varepsilon; y, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} L_{0,1}},$$



Rysunek 1: Trajektorie w zdyskretyzowanym czasie

gdzie

$$L_{0,1} = \frac{m}{2} \frac{(x-y)^2}{\varepsilon^2} - V\left(\frac{x+y}{2}\right).$$

Zgodnie z (3.5) funkcja falowa w chwili końcowej przyjmuje postać

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{A} \exp\left\{-\frac{m}{2i\hbar} \frac{(x-y)^2}{\varepsilon}\right\} \exp\left\{\frac{\varepsilon}{i\hbar} V\left(\frac{x+y}{2}\right)\right\} \psi(y, t). \quad (3.12)$$

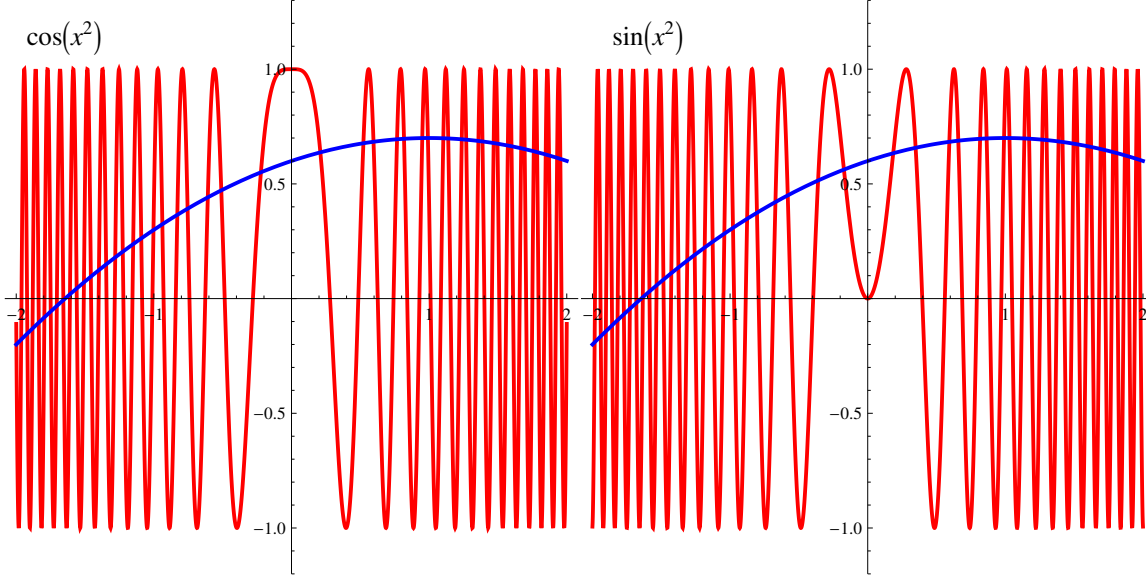
Rozwiniemy lewą i prawą stronę (3.12) z dokładnością do wyrazów rzędu ε . Rozwinięcie lewej strony nie przedstawia problemu

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t). \quad (3.13)$$

Aby rozwinąć prawą stronę wprowadźmy nową zmienną $y = x - \eta$ i zmieńmy zmienne całkowania

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{A} \exp\left\{-\frac{m}{2i\hbar} \frac{\eta^2}{\varepsilon}\right\} \exp\left\{\frac{\varepsilon}{i\hbar} V\left(x - \frac{\eta}{2}\right)\right\} \psi(x - \eta, t). \quad (3.14)$$

Pierwszy czynnik w całce (3.14) przypomina czynnik gaussowski o szerokości proporcjonalnej do $\sqrt{\varepsilon}$. Zatem pozostałe czynniki możemy rozwinąć w szereg potęgowy w η , gdyż przyczynki od dużych η będą tłumione przez czynnik „gaussowski”. Aby tę procedurę lepiej zrozumieć, przyjrzyjmy się bliżej czynnikowi „gaussowskiemu”. Do całki po $d\eta$ niezerowy przyczynek, jak to jest wyjaśnione na rysunku 2 pochodzi od $\eta \sim 0$.



Rysunek 2: Przy całkowaniu gładkiej funkcji $f(x)$ z oscylującymi funkcjami $\cos(\alpha x^2)$ oraz $\sin(\alpha x^2)$, gdzie $\alpha \sim 1/\varepsilon \rightarrow \infty$, niezerowy przyczynek pochodzi tylko od $x \sim 0$ z całki z $\cos(\alpha x^2)$. Dlatego funkcję $f(x)$ można rozwinąć wokół zera.

Ponieważ całość chcemy rozwinąć z dokładnością do ε , w szeregu w η będziemy potrzebować wyrazy liniowe i kwadratowe. Z kolei V jest już mnożone przez ε , wystarczy więc przyjąć $V(x - \eta/2) = V(x)$. Ostatecznie otrzymujemy:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{A} \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar} \frac{\eta^2}{\varepsilon} \right\} \left[1 - \frac{\varepsilon}{i\hbar} V(x) \right] \left[\psi(x, t) - \eta \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) \right].$$

Ponieważ całka gaussowska z η znika, dostajemy tylko trzy człony

$$\begin{aligned} & \psi(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{A} \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar} \frac{\eta^2}{\varepsilon} \right\} \\ & + \frac{\varepsilon}{i\hbar} V(x) \psi(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{A} \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar} \frac{\eta^2}{\varepsilon} \right\} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{A} \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar} \frac{\eta^2}{\varepsilon} \right\} \eta^2. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Pierwszy człon jest rzędu ε^0 i powinien odtworzyć $\psi(x, t)$ z równania (3.13). Warunek ten pozwala nam na wyliczenie stałej A :

$$A = \sqrt{i \frac{2\pi\hbar\varepsilon}{m}}.$$

Stąd druga całka w (3.15) jest równa 1, a trzecia

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{A} \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar} \frac{\eta^2}{\varepsilon} \right\} \eta^2 = i \frac{\hbar \varepsilon}{m}.$$

Widzimy, że rzeczywiście człony kwadratowe w η po wycalkowaniu dają człony liniowe w ε . Porównując (3.13) i (3.15) otrzymujemy

$$\psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \psi(x, t) + \varepsilon \left\{ -\frac{i}{\hbar} V(x) + i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} \psi(x, t).$$

Wyrazy rzędu ε po pomnożeniu przez $i\hbar$ dają zależne od czasu równanie Schrödingera:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x, t). \quad (3.16)$$

3.5 Operator energii

Równanie Schrödingera opisuje ewolucję funkcji falowej w czasie. Wyrażenie po prawej stronie ma sens operatora energii (hamiltonianu)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (3.17)$$

Rzeczywiście, jeśli przyjąć, że operator pędu ma postać (znak, konwencja)

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.18)$$

to

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x). \quad (3.19)$$

W tym przedstawieniu operatorowi położenia odpowiada $\hat{x} = x$.

3.6 Uogólnienie na przypadek trójwymiarowy

Jest dość oczywiste, jak uogólnić równanie Schrödingera do 3 wymiarów:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \implies \hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla} = -i\hbar \begin{bmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

oraz

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right). \quad (3.21)$$

3.7 Separacja zmiennych

Zależne od czasu równanie Schrodingera

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}, t) \quad (3.22)$$

daje się dla potencjałów niezależnych od czasu *rozseparować* na dwa równania. Rzeczywiście, przyjmując, że:

$$\psi(\vec{r}, t) = A(t)u(\vec{r}) \quad (3.23)$$

otrzymujemy

$$i\hbar \frac{1}{A(t)} \frac{\partial A}{\partial t}(t) = \frac{1}{u(\vec{r})} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right\} u(\vec{r}). \quad (3.24)$$

Ponieważ prawa strona tego równania jest tylko funkcją czasu, a lewa funkcją tylko położenia, więc równość może zachodzić tylko wtedy, gdy są one obie równe stałej, którą nazwiemy E . Wówczas (3.24) *rozseparowuje się* na dwa równania

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial A}{\partial t}(t) &= E A(t), \\ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right\} u(\vec{r}) &= E u(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Drugie z tych równań nosi nazwę *niezależnego od czasu równania Schrodingera*. Jego rozwiązania zależą od formy potencjału i w gruncie rzeczy niniejszy wykład w dużej mierze poświęcony będzie właśnie zagadnieniu poszukiwania rozwiązań równania (3.25). Pierwsze równanie daje się łatwo rozwiązać

$$A(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}. \quad (3.26)$$

Stała E ma wymiar energii i, jak się wkrótce okaże, ma sens całkowitej energii układu fizycznego.

Pełne rozwiązanie równania Schrödingera przyjmuje zatem postać

$$\psi_E(\vec{r}, t) = \mathcal{N} e^{-i\frac{Et}{\hbar}} u_E(\vec{r}), \quad (3.27)$$

gdzie \mathcal{N} jest stałą normalizacyjną. Funkcja u_E jest rozwiązaniem niezależnego od czasu równania Schrödingera o energii E . Wygodnie wprowadzić jest częstość kołową $\omega = E/\hbar$.

3.8 Fala płaska

Rozważmy na początek najprostszy przypadek, mianowicie ruch cząstki swobodnej $V \equiv 0$. Wówczas

$$u_E(\vec{r}) = e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad \text{gdzie} \quad E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad (3.28)$$

Działając na u_E operatorem pędu (3.18) uogólnionym na przypadek trójwymiarowy: $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$

$$-i\hbar\vec{\nabla}u_E(\vec{r}) = \mp\hbar\vec{k}. \quad (3.29)$$

Ponieważ moduł $\hbar\vec{k}$ odpowiada klasycznemu pędowi $\sqrt{2mE}$ cząstki swobodnej, mamy następujące związki

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \quad \text{a} \quad E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}. \quad (3.30)$$

Niestety (3.28) nie daje się znormalizować ponieważ $u^*u = 1$ i całka po dV jest rozbieżna. Faktycznie fala płaska jest pewną idealizacją. Drgania funkcji u zachodzą równocześnie w całej przestrzeni z tą samą amplitudą, w tej sytuacji trudno mówić o zlokalizowanym obiekcie, który fala płaska mogłaby opisywać.

Dwa możliwe znaki przy wektorze falowym \vec{k} odpowiadają różnym kierunkom rozchodzenia się fali płaskiej. Rozważmy wektor $\vec{k} = [0, 0, k]$ skierowany wzdłuż ośi z ($k > 0$). Jeśli popatrzeć na pełne, zależne od czasu rozwiązanie (3.27)

$$\psi_E(\vec{r}, t) = e^{-i(\omega t \mp kz)} \quad (3.31)$$

to widać, że równanie stałej fazy implikuje, że dla rozwiązania z górnym znakiem (+ w równaniu (3.28)) *z rośnie* wraz ze wzrostem t (ruch w prawo), natomiast dla rozwiązania ze znakiem dolnym (− w równaniu (3.28)) *z maleje* wraz ze wzrostem t (ruch w lewo). Stąd konwencja znaku operatora pędu: dla dodatniego $k = p/\hbar$ ruch jest w prawo.

3.9 Niezależna od przedstawienia postać RS

Równanie Schrödingera w notacji Diraca ma postać

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle. \quad (3.32)$$

Czasami będziemy też potrzebować równanie sprzężone

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = \langle\psi|\hat{H} \quad (3.33)$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że \hat{H} jest hermitowski.

Stany własne energii ewoluują w czasie w bardzo prosty sposób:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|E_n, t\rangle = \hat{H}|E_n, t\rangle = E_n|E_n, t\rangle \implies |E_n, t\rangle = e^{-iE_n t/\hbar}|E_n, 0\rangle. \quad (3.34)$$

Stąd możemy wyliczyć ewolucję czasową dowolnego stanu

$$|\psi, t\rangle = \sum_n a_n(t)|E_n, t\rangle. \quad (3.35)$$

Podstawiając do równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = \sum_n i \left(\hbar \dot{a}_n(t) |E_n, t\rangle + a_n(t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |E_n, t\rangle \right) = \sum_n a_n(t) \hat{H} |E_n, t\rangle.$$

Dwa ostatnie wyrazy się kasują i mamy

$$\dot{a}_n(t) = 0. \quad (3.36)$$

Zatem

$$|\psi, t\rangle = \sum_n a_n |E_n, t\rangle = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} |E_n, 0\rangle, \quad (3.37)$$

gdzie a_n nie zależą od czasu.

3.10 Dodatek: całka Hopfa

Obliczmy całkę

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iax^2}, \text{ gdzie } a > 0. \quad (3.38)$$

Dobieramy kontur

$$C_R = \{-R, R\} + C_R^{(1)} + \{R\sqrt{i}, -R\sqrt{i}\} + C_R^{(2)}, \quad (3.39)$$

gdzie

$$\sqrt{i} = e^{i\pi/4}.$$

Wtedy

$$I_{C_R} = 0. \quad (3.40)$$

Na konturze $C_R^{(1)}$

$$z = R e^{i\varphi} \implies iaz^2 = iaR^2(\cos(2\varphi) + i\sin(2\varphi)), \quad \varphi = [0, \pi/8]. \quad (3.41)$$

Zatem

$$I_R^{(1)} = \int_{C_R^{(1)}} dz e^{iaz^2} = R \int_0^{\pi/4} d\varphi e^{-aR^2 \sin(2\varphi)} e^{iaR^2 \cos(2\varphi)}. \quad (3.42)$$

Ponieważ na całej drodze całkowania $\sin(2\varphi) > 0$ (za wyjątkiem $\varphi \sim 0$) całka ta znika w granicy $R \rightarrow 0$. Dla $\varphi \sim 0$ mamy

$$I_R^{(1)} \sim R \int_0^{\delta} d\varphi e^{-2aR^2\varphi} = \frac{1}{2aR} \int_0^{2a\delta R^2} d\phi e^{-\phi} = \frac{1}{2aR} (1 - e^{-2a\delta R^2}). \quad (3.43)$$

Przy $\delta \rightarrow 0$ wyrażenie to dąży do 0 dla dowolnego R . Podobnie można pokazać, że znika całka po $C_R^{(2)}$.

Pozostaje nam zatem obliczyć całkę po $\{i\infty, -i\infty\}$. Tutaj

$$z = \sqrt{ix}.$$

Stąd w granicy $R \rightarrow \infty$

$$I_{\{\sqrt{i\infty}, -\sqrt{i\infty}\}} = \sqrt{i} \int_{\infty}^{-\infty} dx e^{-ax^2} = -\sqrt{\frac{i\pi}{a}}. \quad (3.44)$$

Ostatni minus bierze się z konwencji dotyczącej kierunku całkowania. Ostatecznie mamy więc

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{-ia}} \quad (3.45)$$

zupełnie tak, jak gdybyśmy „na ślepo” wykonali całkę gaussowską.