17 Różne sformułowania mechaniki kwantowej

Dotychczasowe sformułowanie mechaniki kwantowej opierało się o:

1. obiekty opisujące *stan układu* w danej chwili t (funkcje falowe, *bra* i *kety*, wektory, dla których istnieją obiekty sprzężone po hermitowsku) w określonej *reprezentacji* (np. położeniowej czy pędowej);
2. transformacje unitarne U prowadzące od jednej reprezentacji do drugiej (macierze – nie koniecznie kwadratowe, lub transformacje całkowe typu trnasformaty Fouriera, jak dla przejścia $\left\langle \vec{k} | \vec{r} \right\rangle$), których interpretacja w języku przestrzeni Hilberta sprowadza się do zmiany bazy (stan fizyczny – wektor stanu – się nie zmienia, zmieniają się jedynie współrzędne);
3. obiekty opisujące *zmienne dynamiczne* (obserwable), które mają postać operatorów lub macierzy kwadratowych zależnych od reprezentacji (bazy) wektora stanu.

Elementy macierzowe operatorów nie zależą od reprezentacji, gdyż nie zmienia się stan układu. Elementy te jednak zmieniają się z czasem, albowiem układ ewoluuje. W dotychczasowym podejściu ewolucję układu w czasie opisywaliśmy przy pomocy zależnego od czsu równania Schrödingera, w którym obiektem ewoluującym w czasie była funkcja falowa, natomiast operatory odpowiadające obserwablom pozostawały stałe w czasie (za wyjątkiem jawnej zależności od czasu). Takie sformułowanie mechaniki kwantowej nazywamy *obrazem Schrödingera*, nie jest to jednak jedyne możliwe podejście.

17.1 Obraz Schrödingera

Zapiszmy zależne od czasu równanie Schrödingera przy u¿yciu zależnego od czasu ketu $|\alpha(t)\rangle_S$ (indeks S odnosi siê do obrazu Schrödingera):

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha_S(t)\rangle = \hat{H} |\alpha_S(t)\rangle . \tag{17.1}$$

Ponieważ $\hat{H}$ jest hermitowski

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \alpha_S(t)| = \langle \alpha_S(t)| \hat{H}. \tag{17.2}$$

Przy założeniu, ze Hamiltonian nie zależy jawnie od czasu równania (17.1,17.2) mają nadzwyczaj proste rozwiazania

$$|\alpha_S(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\alpha_S(0)\rangle , \quad \langle \alpha_S(t)| = \langle \alpha_S(0)| e^{i\hat{H}t/\hbar}, \tag{17.3}$$

gdzie eksponentę z operatora należy rozumieć jako szereg. Mimo, ze operator

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

jest unitarny, nie opisuje on zmiany bazy, ale *ewolucje stanu*, czyli uogólniony obrót w przestrzeni Hilberta. Mówimy tu o obrocie, ze względu na to, ze operator unitarny nie zmienia normy stanu (czyli „długosci” wektora stanu).

Jak w obrazie Schrödingera ewoluuje w czasie element macierzowy:

$$\frac{d}{dt} \langle \alpha_S(t)| \hat{O}_S(t) |\beta_S(t)\rangle = \langle \alpha_S(t)| \frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_S(t) |\beta_S(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \alpha_S(t)| \left[\hat{O}_S(t), \hat{H}\right] |\beta_S(t)\rangle \,. \tag{17.4}$$

Pierwszy wyraz występuje jedynie dla operatorów zależnych jawnie od czasu. Widzimy, ze gdy $\hat{O}_S$ jest niezależny od czasu i w dodatku komutuje z hamiltonianem, to wtedy elementy macierzowe pozostaja stałe w czasie. Odpowiadajaca operatorowi $\hat{O}_S$ zmienna dynamiczna nazywamy *stalą (calką) ruchu*.

17.2 Obraz Heisenberga

Podstawiajac do równania (17.4) rozwiaząnia (17.3) otrzymujemy

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \alpha_S(0)| e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_S(t)e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\beta_S(0)\rangle &= \langle \alpha_S(0)| e^{i\hat{H}t/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_S(t)\, e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\beta_S(0)\rangle \\ &+\frac{1}{i\hbar} \langle \alpha_S(0)| \left[e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_S(t)e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \hat{H}\right] |\beta_S(0)\rangle\end{aligned} \tag{17.5}$$

Definiując *zależne* od czasu operatory w obrazie Heisenberga

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_S(t)e^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{17.6}$$

i *niezależne* od czasu wektory stanu:

$$|\alpha_H\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\alpha_S(0)\rangle \tag{17.7}$$

możemy przepisać równanie (17.5)

$$\langle \alpha_H| \frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) |\beta_H\rangle = \langle \alpha_H| \frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H(t)\ |\beta_H\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \alpha_H| \left[\hat{O}_H(t), \hat{H}\right] |\beta_H\rangle \,, \tag{17.8}$$

gdzie przez pochodną cząstkową operatora $\hat{O}_H$ rozumiemy

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_S(t)\, e^{-i\hat{H}t/\hbar}.$$

Zwróćmy uwagę, że nawt jeśli wyjściowy operator w obrazie Schrödingera nie zależał od czasu $\hat{O}_S(t) \equiv \hat{O}_S$, to $\hat{O}_H$ będzie zależeć od t jeżeli $\hat{O}_S$ nie komutuje z $\hat{H}$.

Ponieważ równanie (17.8) jest prawdziwe dla dowolnych wktorów stanu, można go przepisać w formie operatorowej

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) = \frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{O}_H(t), \hat{H}\right]. \tag{17.9}$$

Jak widać, ewolucję czasową układu fizycznego można opisywać albo w obrazie, gdzie ewoluują wektory stanu, albo operatory. Nie należy mylić obrazu z reprezentacją.

17.3 Obraz oddziaływania (Tomonagi)

Załóżmy, że

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \tag{17.10}$$

gdzie $\hat{H}'$ może jawnie zależeć od czasu. Na ogół $\hat{H}_0$ i $\hat{H}'$ nie komutują musimy je oznaczyć indeksem, wskazującym na obraz. Jak zwykle startujemy z obrazu Schrödingera, aby zdefiniować obraz oddziaływania (interakcji, Tomonagi):

$$\begin{aligned} |\alpha_I(t)\rangle &= e^{i\hat{H}_{S0}t/\hbar} |\alpha_S(t)\rangle , \\ \hat{O}_I(t) &= e^{i\hat{H}_{S0}t/\hbar} \hat{O}_S e^{-i\hat{H}_{S0}t/\hbar}. \end{aligned} \tag{17.11}$$

Gdyby $\hat{H}_0$ i $\hat{H}'$ komutowały, to ewolucja czasowa w obrazie interakcji byłaby dana jedynie przez hamiltonian $\hat{H}'$:

$$|\alpha_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_{S0}t/\hbar} |\alpha_S(t)\rangle = e^{i\hat{H}_{S0}t/\hbar} e^{-i\left(\hat{H}_{S0}+\hat{H}'_S\right)t/\hbar} |\alpha_S(0)\rangle = e^{-i\hat{H}'_S t/\hbar} |\alpha_S(0)\rangle . \tag{17.12}$$

Z kolei dla $\hat{H}' = 0$ obraz oddziaływania redukuje się do obrazu Heisenberga.

Napiszmy równanie ruchu

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha_I(t)\rangle &= -\hat{H}_{0S} |\alpha_I(t)\rangle + e^{i\hat{H}_{S0}t/\hbar} \hat{H}_S e^{-i\hat{H}_{S0}t/\hbar} |\alpha_I(t)\rangle \\ &= e^{i\hat{H}_{S0}t/\hbar} \left(-\hat{H}_{0S} + \hat{H}_S\right) e^{-i\hat{H}_{S0}t/\hbar} |\alpha_I(t)\rangle \\ &= \hat{H}'_I |\alpha_I(t)\rangle . \end{aligned} \tag{17.13}$$

Podobnie różniczkując drugie równanie (17.11) otrzymujemy

$$\frac{d\hat{O}_I}{dt} = \frac{\partial \hat{O}_I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{O}_I, \hat{H}_{0S}\right] = \frac{\partial \hat{O}_I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{O}_I, \hat{H}_{0I}\right] . \tag{17.14}$$

W obrazie interakcji stany ewoluują wg hamiltonianu $\hat{H}'_I$, a zmienne dynamiczne wg hamiltonianu swobodnego (jednakże danego w obrazie interakcji).

17.4 Związek z klasycznymi równaniami ruchu

Z omawianej w ?? zasady wariacyjnej dla działania

$$S = \int L\left(q_1 \dots q_n, \dot{q}_1 \dots \dot{q}_n, t\right)\, dt \tag{17.15}$$

wynikają równania ruchu Lagrange'a –Eulera dla n stopni swobody:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0. \tag{17.16}$$

Definiując pęd kanonicznie sprzężony jako $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$ oraz funkcję Hamiltona

$$H(q_1 \ldots q_n, p_1 \ldots p_n, t) = \sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i(p) - L\left(q_1 \ldots q_n, \dot{q}_1(p) \ldots \dot{q}_n(p), t\right) \tag{17.17}$$

dostajemy równania ruchu Hamiltona–Jacobiego

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \tag{17.18}$$

Zależność od czasu dowolnej funkcji położeń, pędów i czasu ma postać

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F(q_1 \ldots q_n, p_1 \ldots p_n, t) &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ & \quad \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right). \end{aligned} \tag{17.19}$$

Przypomnijmy definicję nawiasu Poissona

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right). \tag{17.20}$$

Równanie (17.19) daje się więc zapisać jako

$$\frac{d}{dt} F = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}. \tag{17.21}$$

Równanie to ma postać analogiczną do równania Heisenberga (17.9), pod warunkiem zamiany

$$\{A, B\} \to \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{A}, \hat{B}\right]. \tag{17.22}$$

A zatem konstrukcja heisenbergowskiego modelu kwantowego dla danego układu klasycznego polegałaby na zastąpieniu nawiasów Poissona przez komutatory podzielone przez $i\hbar$. W szczególności klasyczne związki

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}, \quad \{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0 \tag{17.23}$$

przechodzą w znane nam związki kwantowe

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0 \tag{17.24}$$

niezależne od obrazu kwantowego.