Κβαντομηχανική II

Κωνσταντίνος Σφέτσος,
Καθηγητής Φυσικής

Τομέας Πυρηνικής και Στοιχειωδών Σωματιδίων,
Τμήμα Φυσικής,
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Κεφάλαιο 1: Γενικός φορμαλισμός

12 Μαρτίου 2022

Περιεχόμενα

- Διατύπωση Dirac, συμβολισμός bra-ket, ανασκόπιση.
- Αναπαραστάσεις θέσης και ορμής
- Χρονοεξέλιξη φυσικών συστημάτων

Εξίσωση του Schrödinger

Η φυσική κατάσταση ενός συστήματος προσδιορίζεται απ᾽ την κυματοσυνάρτηση $\Psi(\hat{\mathrm{x}}, t)$ που υπακούει

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \ , \qquad \Psi = \Psi(\hat{\mathrm{x}}, t) \ .$$

Για ένα σωμάτιο

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathrm{x}}, t) \ .$$

Οι τελεστές $\hat{\mathrm{x}}, \hat{\mathrm{p}}$ υπακούουν τις σχέσεις μεταθετών

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \ , \qquad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \ , \qquad i, j = 1, 2, 3 \ .$$

Θέτοντας

$$\hat{\mathrm{x}} = \mathrm{x} \ , \quad \hat{\mathrm{p}} = -i\hbar\nabla \ ,$$

αυτές ικανοποιούνται.
Εξίσωση Schrödinger: 2ης τάξης με μερικές παραγώγους ως προς τις χωρικές μεταβλητές και 1ης τάξης ώς προς το χρόνο.

Χώρος Hilbert

Ορίζουμε το εσωτερικό γινόμενο

$$(\Psi, \Phi) = \int d^3x \Psi^* \Phi$$

που υπακούει

$$\begin{aligned}
&(\Psi, \Phi)^* = (\Phi, \Psi) \ , \\
&(\Psi_1 + \Psi_2, \Phi) = (\Psi_1, \Phi) + (\Psi_2, \Phi) \ , \\
&(\lambda\Psi, \Phi) = \lambda^*(\Psi, \Phi) \ , \quad \lambda \in \mathbb{C} \ , \\
&(\Psi, \Psi) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \Psi = 0 \ .
\end{aligned}$$

Άρα ο χώρος αυτός έχει όλες τις ιδιότητες του χώρου Hilbert.
Αποτελεί γενίκευση διανυσματικών χώρων σε περισσότερες ή και άπειρες διαστάσεις.

Συμβολισμός bra-ket του Dirac

Σε κάθε Ψ αντιστοιχεί ένα διάνυσμα στήλης $|\Psi\rangle$ (ket) και ένα διάνυσμα γραμμής $\langle\Psi|$ (bra) που συνδέονται με σχέση συζυγίας

$$\langle\Psi| = |\Psi\rangle^\dagger \ .$$

Δηλαδή

$$|\Psi\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \\ \vdots \end{pmatrix} \ , \qquad \langle\Psi| \leftrightarrow \begin{pmatrix} \dots & \dots \end{pmatrix} \ .$$

Το εσωτερικό γινόμενο ορίζεται ως

$$(\Psi,\Phi) = \langle\Psi|\cdot|\Phi\rangle = \langle\Psi||\Phi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle \ .$$

και έχουμε

$$\begin{aligned}
&\langle\Psi|\Phi\rangle^* = \langle\Psi|\Phi\rangle^\dagger = \langle\Phi|\Psi\rangle \ ,\\
&\langle\Psi_1+\Psi_2|\Phi\rangle = \langle\Psi_1|\Phi\rangle + \langle\Psi_2|\Phi\rangle \ ,\\
&\langle\lambda\Psi|\Phi\rangle = \lambda^*\langle\Psi|\Phi\rangle \ , \quad \lambda\in\mathbb{C} \ ,\\
&\langle\Psi|\Psi\rangle = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad |\Psi\rangle = 0 \ .
\end{aligned}$$

- Το μέτρο του ket $|\Psi\rangle$ ορίζεται ως

$$||\Psi\rangle| = \sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle} \ .$$

- Σημειώνω ότι $|\Phi\rangle\langle\Psi|$ είναι τελεστής. Σχηματικά

$$|\Phi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} \vdots \\ \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dots & & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots & \dots \\ & \\ \vdots & \dots \end{pmatrix} \ .$$

Τελεστές στο χώρο Hilbert

Αν αλλάξουμε ένα ket $|\Psi\rangle$ σε $|\tilde{\Psi}\rangle$ αναπαραστούμε το αποτέλεσμα μέσω της δράσης ενός τελεστή $\hat{A}$

$$\text{Ορισμός}: \qquad |\tilde{\Psi}\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle \ .$$

- Ο τελεστής είναι γραμμικός αν ισχύει

$$\hat{A}|\Psi_1 + \Psi_2\rangle = \hat{A}|\Psi_1\rangle + \hat{A}|\Psi_2\rangle \ .$$

- Δύο τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{B}$ είναι Ερμιτιανοί συζυγείς αν

$$\langle\Phi|\hat{B}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Phi\rangle^* \ , \quad \forall\ |\Psi\rangle, |\Phi\rangle \ .$$

  Συμβολίζουμε $B = A^\dagger$. Αν $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ τότε ο τελεστής είναι Ερμιτιανός ή αυτοσυζυγής.

- Ένας τελεστής U ονομάζεται μοναδιακός αν

$$\text{Ορισμός}: \qquad U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{I} \ .$$

Φάσμα τελεστών

Όλα τα (ιδιο)διανύσματα $|\Phi_k\rangle$ και (ιδιο)τιμές λ_k που υπακούουν

$$\hat{A}|\Phi_k\rangle = \lambda_k|\Phi_k\rangle \ .$$

Ιδιότητες αυτοσυζυγών τελεστών:

- Έχουν πραγματικές ιδιοτιμές

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \implies \langle\Psi|\underbrace{\hat{A}^\dagger}_{=\hat{A}} = \lambda^*\langle\Psi|$$

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \lambda^*\langle\Psi|\Psi\rangle \implies \lambda\langle\Psi|\Psi\rangle = \lambda^*\langle\Psi|\Psi\rangle \ .$$

  Άρα $\lambda^* = \lambda$.

- Τα διαφορετικών ιδιοτιμών ιδιοδιανύσματα είναι ορθογώνια.
  Έχουμε $\hat{A}|\Phi_i\rangle = \lambda_i|\Phi_i\rangle$, με $\lambda_1 \neq \lambda_2$ και

$$\langle\Phi_1|\hat{A}|\Phi_2\rangle = \langle\Phi_2|\hat{A}^\dagger|\Phi_1\rangle^* \implies (\lambda_2 - \lambda_1)\langle\Phi_1|\Phi_2\rangle = 0 \ ,$$

  απ' την οποία $\langle\Phi_1|\Phi_2\rangle = 0$.

- N ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές του τελεστή $\hat{A}$ αποτελούν ένα πλήρες σύνολο μοναδιαίων διανυσμάτων σε έναν N-στατο χώρο Hilbert

$$\sum_{i=1}^{N} |\Phi_i\rangle\langle\Phi_i| = \mathbb{I} \ .$$

Απόδειξη: N ορθογώνια διανύσματα χαρακτηρίζουν ένα N-άστατο χώρο.Άρα πρέπει να συνιστούν βάση για την αναπαράσταση του μοναδιαίου τελεστή.

Φυσικά συστήματα και οι καταστάσεις τους

- Περιγράφονται από διανύσματα $|\Psi\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi\rangle \ .$$

- Με βάση ένα ορθοκανονικό και πλήρες σύστημα $|i\rangle \equiv |\Psi_i\rangle$

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \ , \qquad \sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{I} \ ,$$

ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής, δηλαδή $\hat{H}|i\rangle = E_i|i\rangle$ η Ψ αναλύεται ως γραμμικός συνδυασμός

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle \quad \Longrightarrow \quad c_i = \langle i|\Psi\rangle \ .$$

- Τότε c_i είναι το πλάτος πιθανότητας η κατάσταση $|\Psi\rangle$ να βρίσκεται στην ιδιοκατάσταση $|i\rangle$. Αν $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$, τότε $|c_i|^2$ είναι η αντίστοιχη πιθανότητα.
- Η έννοια του τελεστή προβολής

$$P_n = |n\rangle\langle n| \ ,$$

είναι χρήσιμη. Τότε

$$P_n|\Psi\rangle = c_n|n\rangle \ ,$$

είναι η προβολή του $|\Psi\rangle$ πάνω στο $|n\rangle$. Ισχύουν

$$P_m P_n = \delta_{mn} P_n \ , \qquad \sum_n P_n = \mathbb{I} \ .$$

- Διαφορετικές καταστάσεις ίδιας ενέργειας ονομάζονται εκφυλισμένες. π.χ. Σωμάτιο σε κύκλο ακτίνας R.

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2\Psi}{d\phi^2} = E\Psi \ ,$$

Οι περιοδικές ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές είναι

$$\Psi = \frac{e^{in\phi}}{\sqrt{2\pi}} \ , \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2}n^2 \ , \quad n \in \mathbb{Z} \ .$$

Έχουμε $E_{-n} = E_n$.

- Φυσικές ποσότητες $\Longleftrightarrow$ Ερμιτιανοί τελεστές $\hat{A}$.
- Αν $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ και $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, τότε οι καταστάσεις $|\Psi\rangle$ και $\hat{A}|\Psi\rangle$ είναι ενεργειακά εκφυλισμένες.

- Το σύνολο το αυτοσυζυγών τελεστών που μετατίθενται μεταξύ τους και με την Χαμιλτονιανή έχουν κοινό σύστημα ιδιοκαταστάσεων. Δηλαδή αν

$$A_a^\dagger = A_a \ , \quad [A_a, A_b] = [A_a, H] = 0 \ , \quad \forall \ a, b = 1, 2, \dots \ ,$$

τότε υπάρχει $|\Psi_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots$, έτσι ώστε

$$A_a|\Psi_i\rangle = \lambda_{a,i}|\Psi_i\rangle \ , \qquad H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle \ .$$

- Η μέση τιμή

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_i = |c_i|^2\lambda_i \ .$$

- Οι ιδιοτιμές λ_i είναι οι μόνες που μπορεί να προκύψουν από μια μέτρηση του φυσικού μεγέθους A καθεμία με πιθανότητα $|c_i|^2$.

- Έστω δύο πλήρεις ορθοκανονικές βάσεις $|\Psi_i\rangle$ και $|\Phi_i\rangle$. Συνδέονται ως

$$|\Psi_i\rangle = \sum_j U_{ij}|\Phi_j\rangle \ , \qquad |\Phi_i\rangle = \sum_j U^*_{ji}|\Psi_j\rangle \ ,$$

όπου

$$U_{ij} = \langle\Phi_j|\Psi_i\rangle \ .$$

- Ο πίνακας U με στοιχεία U_{ij} είναι μοναδιακός.

$$\begin{aligned}(UU^\dagger)_{ij} &= \sum_k U_{ik}(U^\dagger)_{kj} = \sum_k \langle\Phi_k|\Psi_i\rangle \overbrace{\langle\Phi_k|\Psi_j\rangle^*}^{=\langle\Psi_j|\Phi_k\rangle} \\ &= \langle\Psi_j \sum_k |\Phi_k\rangle\langle\Phi_k|\Psi_i\rangle = \langle\Psi_j|\Psi_i\rangle = \delta_{ij}\end{aligned}$$

- Οι μέσες τιμές τελεστών είναι ανεξάρτητες της βάσης.

Αναπαραστάσεις θέσης και ορμής

Οι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών θέσης και ορμής ορίζονται ως

$$\hat{\mathrm{x}}|\mathrm{x}\rangle = \mathrm{x}|\mathrm{x}\rangle \ , \qquad \hat{\mathrm{p}}|\mathrm{p}\rangle = \mathrm{p}|\mathrm{p}\rangle \ .$$

Υπακούουν τις σχέσεις ορθογωνιότητας

$$\langle \mathrm{x}|\mathrm{x}'\rangle = \delta^{(3)}(\mathrm{x}-\mathrm{x}') \ , \qquad \langle \mathrm{p}|\mathrm{p}'\rangle = \delta^{(3)}(\mathrm{p}-\mathrm{p}')$$

και πληρότητας

$$\int d^3\mathrm{x}|\mathrm{x}\rangle\langle \mathrm{x}| = \mathbb{I} \ , \qquad \int d^3\mathrm{p}|\mathrm{p}\rangle\langle \mathrm{p}| = \mathbb{I} \ .$$

Εξαιτίας των βασικών σχέσεων μεταθετών

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \ , \qquad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \ , \qquad i,j = 1,2,3 \ ,$$

οι τελεστές $\hat{\mathrm{x}}$ και $\hat{\mathrm{p}}$ δεν έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις.

Αναπαράσταση θέσης: Η συνάρτηση

$$\Psi(t,\mathrm{x}) = \langle \mathrm{x}|\Psi(t)\rangle \ ,$$

πλάτος πιθανότητας το σωμάτιο στη θέση x τη στιγμή t.

- Κάνοντας χρήση της (σε μια διάσταση)

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\delta'(x-x') \ ,$$

έχουμε

$$\begin{aligned} p\langle x|p\rangle = \langle x|\hat{p}|p\rangle &= \int dy \ \langle x|\hat{p}|y\rangle\langle y|p\rangle \\ &= -i\hbar\int dy \ \frac{d\delta(x-y)}{dx}\langle y|p\rangle = -i\hbar\frac{d\langle x|p\rangle}{dx} \ . \end{aligned}$$

- Άρα, ελεύθερο σωμάτιο στη θέση x με ορμή p

$$\Psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{ipx/\hbar} \ .$$

Για την κανονικοποίηση: $\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}$.

- Η γενίκευση σε 3-διαστάσεις είναι

$$\langle \mathrm{x}|\mathrm{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathrm{p}\cdot\mathrm{x}/\hbar} \ .$$

Αναπαράσταση ορμής: Η συνάρτηση

$$\Psi(t,\mathrm{p}) = \langle \mathrm{p}|\Psi(t)\rangle \ ,$$

πλάτος πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο με ορμή p τη στιγμή t.

Άρα έχουμε, ελεύθερο σωμάτιο με ορμή p στη θέση x

$$\Psi_x(p) = \langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-ipx/\hbar} \ .$$

Μετασχηματισμός μεταξύ των δύο αναπαραστάσεων:

- Απ' την αναπαράσταση ορμής στην αναπαράσταση θέσης

$$\Psi(t,\mathrm{x}) = \langle \mathrm{x}|\Psi(t)\rangle = \int d^3\mathrm{p}\langle \mathrm{x}|\mathrm{p}\rangle\langle \mathrm{p}|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3\mathrm{p}\; e^{i\mathrm{p}\cdot\mathrm{x}/\hbar}\Psi(t,\mathrm{p})\,.$$

- Απ' τη αναπαράσταση θέσης στην αναπαράσταση ορμής

$$\Psi(t,\mathrm{p}) = \langle \mathrm{p}|\Psi(t)\rangle = \int d^3\mathrm{x}\langle \mathrm{p}|\mathrm{x}\rangle\langle \mathrm{x}|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3\mathrm{x}\; e^{-i\mathrm{p}\cdot\mathrm{x}/\hbar}\Psi(t,\mathrm{x})\,.$$

Αρμονικός ταλαντωντής στις αναπαραστάσεις θέσης/ορμής

Η Χαμιλτονιανή είναι:

- Στην αναπαράσταση θέσης

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \ .$$

- Στην αναπαράσταση ορμής

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{d^2}{dp^2} \ .$$

- Άρα αν γνωρίζουμε τις ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_n(x)$ μπορούμε να βρούμε αμέσως τις ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_n(p)$ με απλή αντικατάσταση

$$x \to p \ , \quad m \to \frac{1}{m\omega^2} \ .$$

- Για την βασική κατάσταση

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} , \qquad \Psi_0(p) = \left(\frac{1}{\pi m\omega\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}$$

- Πράγματι, με χρήση του

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy\ e^{-y^2} = \sqrt{\pi} ,$$

τελικά επιβεβαιώνεται ότι

$$\Psi_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-ipx/\hbar}\Psi_0(x) .$$

Χρονοεξέλιξη Φυσικών Συστημάτων I

- Η χρονική εξέλιξη από $|\Psi(t_1)\rangle$ σε $|\Psi(t_2)\rangle$ καθορίζεται απ' τη δράση ενός τελεστή $U(t_2, t_1)$ ως

$$\boxed{|\Psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle} \quad \Longrightarrow \quad \langle\Psi(t_2)| = \langle\Psi(t_1)|U^\dagger(t_2, t_1) \ .$$

- Βασική ιδιότητα του $U(t_2, t_1)$

$$\begin{aligned} |\Psi(t_3)\rangle &= U(t_3, t_1)|\Psi(t_1)\rangle \\ &= U(t_3, t_2)|\Psi(t_2)\rangle = U(t_3, t_2)U(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle \ . \end{aligned}$$

Άρα

$$\boxed{U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2)U(t_2, t_1)} \ .$$

- Επειδή

$$U(t_1,t_1) = \mathbb{I} \quad \Longrightarrow \quad U(t_1,t_2)U(t_2,t_1) = \mathbb{I}\ .$$

- Διατήρηση της πιθανότητας

$$\langle \Psi(t_2)|\Psi(t_2)\rangle = \langle \Psi(t_1)|U^\dagger(t_2,t_1)U(t_2,t_1)\Psi(t_1)\rangle = \langle \Psi(t_1)|\Psi(t_1)\rangle\ .$$

'ρα

$$\boxed{U^\dagger(t_2,t_1)U(t_2,t_1) = \mathbb{I}}\ .$$

- Ο υπολογισμός του U αποτελεί το κεντρικό πρόβλημα στην Κβαντική Φυσική. Ειδικότερα:
  - Σε περιοδικά συστήματα η απόκριση μετά από μιά περίοδο: $U(T,0)$.
  - Σε σκέδαση ο λεγόμενος πίνακας: $S = U(\infty,-\infty)$.

Η εξίσωση του Schrödinger

- Για απειροστή χρονική εξέλιξη

$$|\Psi(t+dt)\rangle = U(t+dt,t)|\Psi(t)\rangle \ , \quad U(t+dt,t) \simeq \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\ dt \ ,$$

όπου $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ η Χαμιλτονιανή. Έτσι προκύπτει η

$$\text{Schrodinger}: \qquad i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi\rangle \ .$$

- Η παραπάνω και η $|\Psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$ δίνουν

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}U \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}U^\dagger\hat{H} \ .$$

- Αν δεν υπάρχει άμεση χρονοεξάρτηση της Ηαμιλτονιανής, τότε
$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \quad \Longrightarrow \quad U(t_1, t_2) = e^{-i/\hbar \hat{H}(t_1 - t_2)} \ .$$
- Αν $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \neq 0$ το παραπάνω δεν ισχύει, διότι $e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} \neq e^{\hat{A}+\hat{B}}$. Σίγουρα δεν ισχύει ότι
$$U(t_1, t_2) = e^{-i/\hbar \int_{t_1}^{t_2} dt \ \hat{H}(t)} \ .$$
Η λύση δίνεται απ΄ τον τύπο του Dyson.

- Αναπτύσσοντας ως $|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t)|\Psi_k\rangle$ έχουμε για τα πλάτη ένα σύστημα ΔΕ 1ης τάξεως

$$i\hbar \frac{dc_k}{dt} = \sum_\ell H_{k\ell} c_\ell \ , \qquad H_{k\ell} = \langle \Psi_k|\hat{H}|\Psi_\ell\rangle \ .$$

- Αν οι $\hat{H}|\Psi_\ell\rangle = E_k|\Psi_\ell\rangle$, τότε $c_k(t) = e^{-i\hbar E_k t} c_k(0)$. Λόγω του ότι $|c_k(t)| = |c_k(0)|$ καταστάσεις αυτές ονομάζονται στάσιμες.

Συστήματα δύο καταστάσεων

Έστω ότι ένα σύστημα μπορεί να βρίσκεται σε δύο ενεργειακές ιδιοκαταστάσεις $|k\rangle$, $k = 1, 2$ με ενέργειες E_k.
Δύο μικτές ορθοκανονικοποιημένες καταστάσεις είναι

$$\begin{pmatrix} |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} .$$

Οι $|\Psi_i\rangle$ δεν είναι ιδιοκαταστάσεις της $\hat{H}$. Αν $|\Psi(0)\rangle = |\Psi_1\rangle$, τότε

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi(0)\rangle = \cos\theta e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle + \sin\theta e^{-iE_2t/\hbar}|2\rangle \\ &= (\cos^2\theta e^{-iE_1t/\hbar} + \sin^2\theta e^{-iE_2t/\hbar})|\Psi_1\rangle + \frac{1}{2}\sin 2\theta \left(e^{-iE_2t/\hbar} - e^{-iE_1t/\hbar}\right)|\Psi_2\rangle \end{aligned}$$

Πιθανότητα μετάβασης απ' την $|\Psi_1\rangle$ στην $|\Psi_2\rangle$

$$P_{1\to 2}(t) = |\langle\Psi_2|\Psi(t)\rangle|^2 = \sin^2 2\theta \sin^2\frac{(E_1 - E_2)t}{2\hbar} .$$

Χρονοεξέλιξη Φυσικών Συστημάτων II

Στρέφουμε την προσοχή μας στους τελεστές $\hat{A}$.
Μπορούμε να προσδιορίσουμε/μετρήσουμε στοιχεία πίνακα

$$A_{12}(t) = \langle \Psi_1(t)|\hat{A}|\Psi_2(t)\rangle \ .$$

Λόγω της $|\Psi_i(t)\rangle = U(t)\Psi_i(0)\rangle$, $i = 1, 2$ με $U(t) \equiv U(t, 0)$, έχουμε

$$A_{12}(t) = \langle \Psi_1(0)|U^\dagger(t)\hat{A}U(t)|\Psi_2(0)\rangle \ .$$

- Εικόνα Schrôdingher: Οι καταστάσεις $|\Psi(t)\rangle$ αλλάζουν με το χρόνο, ενώ οι τελεστές $\hat{A}$ παραμένουν σταθεροί.
- Εικόνα Heisenberg: Οι καταστάσεις $|\Psi(0)\rangle$ δεν αλλάζουν με το χρόνο, ενώ οι τελεστές μεταβάλλονται

$$\hat{A}_H(t) = U^\dagger(t)\hat{A}U(t) \ .$$

Προφανώς τα στοιχεία $A_{12}(t)$ είναι ίδια και στις δύο εικόνες.

Χρονοεξέλιξη στην εικόνα Schrôdingher: Με τον συμβολισμό $\langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \langle\hat{A}\rangle$, έχουμε

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} &= \frac{\partial\langle\Psi(t)|}{\partial t}|\hat{A}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\hat{A}|\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} + \langle\Psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\Psi(t)\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|\hat{H}\hat{A}|\Psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|\hat{A}\hat{H}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t))|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\Psi(t)\rangle \ .\end{aligned}$$

- Άρα

$$\boxed{\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \langle\Psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\Psi(t)\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\Psi(t)|[\hat{H},\hat{A}]|\Psi(t)\rangle \ .}$$

- Αν $\partial_t\hat{A} = 0$, τότε ο 1ος όρος παραλείπεται. Σημαντικοί τελεστές έχουν άμεση χρονοεξάρτηση, π.χ. $\hat{A} = \hat{x}\sin\omega t$.

Χρονοεξέλιξη στην εικόνα Heisenberg: Έχουμε

$$\frac{\partial \hat{A}_H(t)}{\partial t} = \frac{\partial U^\dagger}{\partial t}\hat{A}U + U^\dagger \hat{A}\frac{\partial U}{\partial t} + U^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}U$$
$$= \frac{i}{\hbar}U^\dagger \hat{H}\hat{A}U - \frac{i}{\hbar}U^\dagger \hat{A}\hat{U} + U^\dagger \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}U \ ,$$

οπότε

$$\frac{\partial \hat{A}_H(t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right)_H + \frac{i}{\hbar}[H_H, \hat{A}_H] \ .$$

- Σημειώνω ότι $[\hat{H}_H, \hat{A}_H] = U^\dagger[\hat{H}, \hat{A}]U$.
- Αν $\partial_t \hat{A} = 0$, τότε ο 1ος όρος παραλείπεται.
- Αν

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \hat{H}_H = \hat{H} \ , \qquad U = e^{-i/\hbar \hat{H}t} \ .$$