

Rozdział 31

(U.10) Ewolucja układów kwantowych w czasie

31.1 Równanie Schrödingera i operator ewolucji

31.1.1 Podstawowe definicje

Gdy układ kwantowy nie jest zaburzany pomiarami, to jego ewolucją rządzi równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (31.1)$$

przy czym hamiltonian może być zależny od czasu lub nie. Formalnie rzecz biorąc do rozwiązania równania (31.1) potrzebujemy stanu (warunku początkowego).

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle. \quad (31.2)$$

Możemy więc próbować całkować (rozwiązywać) równanie Schrödingera. Rozwiązania, spełniającego warunek początkowy możemy szukać w postaci

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle, \quad (31.3)$$

gdzie $\mathbf{U}(t, t_0)$ jest pewnym operatorem. Możemy powiedzieć, że jeśli potrafimy znaleźć jawną postać tego operatora, to automatycznie znamy rozwiązania równania Schrödingera. Niestety jednak zdarza się to bardzo rzadko, tylko w kilku dość szczególnych wypadkach.

Relacja (31.3) i do tej pory ustalone własności równania Schrödingera pozwalają na wysnucie szeregu wniosków dotyczących operatora $\mathbf{U}(t, t_0)$. Operator ten przekształca ket początkowy w ket odpowiadający innej (zwykle późniejszej, choć niekoniecznie) chwili czasu, dlatego też operator ten nazwiemy operatorem ewolucji (w czasie).

31.1.2 Własności operatora ewolucji

Zbierzemy najważniejsze i ogólne własności operatora ewolucji. Podkreślamy, że przynajmniej na razie niczego (poza istnieniem) nie zakładamy o hamiltonianie układu fizycznego.

- Z relacji (31.3) w oczywisty sposób wynika warunek początkowy

$$\mathbf{U}(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (31.4)$$

- Z równania Schrödingera i definicji (31.3) wynika równanie ewolucji dla operatora $\mathbf{U}(t, t_0)$. A mianowicie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\mathbf{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle] = \hat{H} \mathbf{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (31.5)$$

Stan początkowy nie zależy od czasu t , więc

$$i\hbar \frac{\partial \mathbf{U}(t, t_0)}{\partial t} |\psi(t_0)\rangle = \hat{H} \mathbf{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (31.6)$$

i wobec dowolności keta $|\psi(t_0)\rangle$ mamy

$$i\hbar \frac{\partial \mathbf{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H} \mathbf{U}(t, t_0). \quad (31.7)$$

Dla porządku, zauważmy, że z powyższego równania (przez zwykłe reguły sprzęgania operatorów) wynika równanie sprzężone

$$-i\hbar \frac{\partial \mathbf{U}^\dagger(t, t_0)}{\partial t} = \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H}, \quad (31.8)$$

gdzie uwzględniliśmy fakt, że hamiltonian jest obserwabłą, a więc jest operatorem hermitowskim $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$. Zwróćmy uwagę, że w obu powyższych równaniach nie ma znaczenia, czy hamiltonian jest, czy też nie jest zależny jawnie od czasu.

- Równanie Schrödingera zachowuje normę stanu kwantowo-mechanicznego. Wobec tego operator $\mathbf{U}(t, t_0)$ musi być unitarny

$$\|\psi(t)\|^2 = 1 = \text{const.} \implies \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \hat{1}. \quad (31.9)$$

- Omówimy tu tzw. własność grupową operatora ewolucji. Rozważmy trzy momenty czasu (dla ustalenia uwagi uporządkowane wzrastająco) $t_0 \rightarrow t_1 \rightarrow t_2$. Wobec tego w naturalny sposób możemy napisać

$$|\psi(t_2)\rangle = \mathbf{U}(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle = \mathbf{U}(t_2, t_1) \mathbf{U}(t_1, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (31.10)$$

Z drugiej strony, chwila pośrednia t_1 jest nieistotna, więc bezpośrednio mamy

$$|\psi(t_2)\rangle = \mathbf{U}(t_2, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (31.11)$$

Porównując więc prawe strony obu ostatnich wyrażeń, wobec dowolności keta początkowego, dostajemy

$$\mathbf{U}(t_2, t_0) = \mathbf{U}(t_2, t_1) \mathbf{U}(t_1, t_0). \quad (31.12)$$

Właśnie ta (dość oczywista intuicyjnie) reguła nazywana jest własnością grupową: złożenie dwóch operatorów ewolucji jest nadal operatorem ewolucji. W naszym uproszczonym wyprowadzeniu przyjęliśmy uporządkowanie chwil czasu. Bardziej subtelna analiza, doprowadzi do wniosku, że uporządkowanie to nie ma znaczenia. Czasy t_0, t_1, t_2 występujące w (31.12) mogą być dowolne.

- Zbadamy teraz pewną konsekwencję własności grupowej operatorów ewolucji. Połóżmy w niej $t_2 = t_0$, zatem

$$\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{U}(t_0, t_1) \mathbf{U}(t_1, t_0). \quad (31.13)$$

Ale z warunku początkowego (31.4) wynika dalej

$$\hat{\mathbf{1}} = \mathbf{U}(t_0, t_1) \mathbf{U}(t_1, t_0), \quad (31.14)$$

czyli więc mamy kolejną własność

$$\mathbf{U}^{-1}(t_1, t_0) = \mathbf{U}(t_0, t_1), = \mathbf{U}^\dagger(t_1, t_0), \quad (31.15)$$

przy czym druga równość wynika z unitarności (31.9).

Powyższe własności operatora ewolucji nie zależą od postaci hamiltonianu rozważanego układu fizycznego.

31.1.3 Postać operatora ewolucji

$\mathbf{U}(t, t_0)$ dla \hat{H} niezależnego od czasu

Gdy hamiltonian nie zależy jawnie od czasu, wówczas równanie (31.7) można formalnie scałkować. Biorąc pod uwagę warunek początkowy (31.4) od razu mamy

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i \hat{H}}{\hbar} (t - t_0) \right). \quad (31.16)$$

Różniczkując po czasie łatwo sprawdzamy, że równanie (31.7) rzeczywiście jest spełnione. Warunek początkowy (31.4) wynika oczywiście z własności operatorowej funkcji wykładniczej. Łatwo jest też sprawdzić, że operator ewolucji dany w (31.16) posiada wszystkie omówione własności. Co więcej, skoro \mathbf{U} jest funkcją (niezależnego od czasu) hamiltonianu, to musi z nim komutować, a więc w tym przypadku mamy

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0, \quad \implies \quad [\mathbf{U}(t, t_0), \hat{H}] = 0. \quad (31.17)$$

Hamiltonian zależny od czasu

Gdy hamiltonian jest jawnie zależny od czasu sytuacja jest trudniejsza. Omówione wyżej własności operatora ewolucji pozostają w mocy. Równanie ruchu (31.7)

$$i\hbar \frac{\partial \mathbf{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \mathbf{U}(t, t_0). \quad (31.18)$$

także pozostaje słuszne (zaznaczyliśmy zależność $\hat{H} = \hat{H}(t)$), ale nie daje się łatwo scałkować. Problem polega na tym, że gdyby potraktować powyższe równanie klasycznie (to znaczy jako równanie dla funkcji, a nie dla operatorów), to możnaby napisać

$$(\text{dla funkcji}) \quad \mathbf{U}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right). \quad (31.19)$$

Mamy tu jednak do czynienia z operatorami, nie z funkcjami. Problem polega na tym, że w wykładniku eksponenty mamy sumę (całkę) hamiltonianów, branych w kolejnych chwilach czasu, a na ogół hamiltonian brany w pewnej chwili czasu nie komutuje z hamiltonianem wziętym w innej chwili

$$[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \neq 0. \quad (31.20)$$

W rezultacie nie wiadomo, jak obliczać taką funkcję wykładniczą. dlatego też piszemy

$$(\text{dla operatora } \hat{H} = \hat{H}(t)) \quad \mathbf{U}(t, t_0) \neq \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right). \quad (31.21)$$

Zwróćmy jednak uwagę, że jeśli hamiltonian nie zależy od czasu, to można go wyciągnąć przed całkę i wyrażenie (31.21) sprowadza się do wzoru (31.16). Znak \neq obowiązuje tylko dla hamiltonianów jawnie zależnych od czasu.

Warto jednak wiedzieć, że istnieją odpowiednie metody matematyczne (tzw. iloczyn chronologiczny Dysona) pozwalające szukać metod rozwiązania równania (31.18). Można też próbować je rozwiązywać metodami iteracyjnymi, co okazuje się pożyteczne w tzw. rachunku zaburzeń z czasem. Nie licząc tego ostatniego zagadnienia, będziemy praktycznie zawsze badać układy fizyczne, których hamiltonian nie zależy jawnie od czasu.

31.2 Obraz Schrödingera

Obraz Schrödingera, mówiąc najprościej, to taki sposób sformułowania mechaniki kwantowej, którym posługiwaliśmy się do tej pory (nie wiedząc, że się on tak nazywa). Ponieważ mamy jeszcze inne obrazy, trzeba uściślić pojęcia.

Zasadnicza idea obrazu Schrödingera polega na tym, że wektor stanu ewoluuje w czasie zgodnie z równaniem Schrödingera (31.1). Mówiąc obrazowo, wektor $|\psi(t)\rangle$ wraz z upływem czasu "jeździ" po przestrzeni \mathcal{H} . Obserwable, jak np. składowe położenia \hat{X}_j , czy pędu \hat{P}_j są od czasu niezależne – stacjonarne. Ich stany własne $|\vec{r}\rangle$ lub $|\vec{p}\rangle$ tworzą w \mathcal{H} bazy, które także są stacjonarne. Rzuty wektora $|\psi(t)\rangle$ na stany bazy, a więc liczby $\langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$ lub $\langle \vec{p} | \psi(t) \rangle$ (dla określonych \vec{r} lub \vec{p}) zależą od czasu. Z drugiej strony, liczby te są "współrzędnymi" wektora $|\psi(t)\rangle$ w jednej lub drugiej bazie.

Widzimy tu analogię ze zwykłą trójwymiarową geometrią, w której wektor położenia $\vec{r}(t)$ zmienia się w czasie. Wektory pewnej wybranej bazy ($\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$) są ustalone i tworzą niezależny od czasu układ współrzędnych. Składowe wektora położenia, obliczane w tej bazie, są oczywiście funkcjami czasu. W analogii tej ewolucja wektora położenia kojarzy się z ewolucją wektora stanu, zaś jednostkowe (stacjonarne) wektory bazy z bazą w przestrzeni \mathcal{H} generowaną przez wektory własne takiej czy innej obserwabli.

Obraz Schrödingera jest to więc takie sformułowanie mechaniki kwantowej, w którym $|\psi(t)\rangle$ ewoluuje w czasie, zaś obserwable wyznaczające bazę są stacjonarne (a zatem i odpowiednia baza jest stacjonarna). Dynamika układu kryje się w dynamice wektora stanu, określonej przez równanie Schrödingera. Można też powiedzieć inaczej (zgodnie z (31.3)), że operator ewolucji $\mathbf{U}(t, t_0)$ określa zmienność wektora stanu w czasie.

Zwróćmy jeszcze uwagę, że zależność od czasu dla wartości oczekiwanej pewnej wielkości fizycznej

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle, \quad (31.22)$$

pochodzi przede wszystkim od zależności $|\psi(t)\rangle$ od czasu. Mówimy tu "przede wszystkim", ponieważ można sobie wyobrazić obserwable, które od czasu zależą. Jest to jednak sytuacja zwykle związana z oddziaływaniami (pochodzącymi z zewnątrz). Jeśli obserwabla \hat{A} jest konstruowana dla układu nieoddziałującego za pomocą zasady odpowiedniości, to \hat{A} (praktycznie zawsze) będzie operatorem od czasu niezależnym. Zastrzeżenia wynikają stąd, że można zawsze próbować wymyślać nietypowe sytuacje, będące swego rodzaju wyjątkami.

31.3 Obraz Heisenberga

W obrazie Schrödingera wektory bazy (wektory własne obserwabli) są stacjonarne – nie ulegają zmianom w czasie. Stan układu dany ketem $|\psi(t)\rangle$ ewoluuje w czasie zgodnie z równaniem Schrödingera. Można podejść do tego zagadnienia odwrotnie. Wektory bazy zmieniają się wraz z upływem czasu, zaś wektor opisujący stan układu pozostaje stały. Podejście takie musi być równoważne obrazowi Schrödingera i nazywa się obrazem Heisenberga. Jasne jest, że operatory stacjonarne w obrazie Schrödingera będą zależne od czasu w obrazie Heisenberga. Musi tak być, aby oba obrazy były rzeczywiście równoważne.

31.3.1 Wektor stanu w obrazie Heisenberga

Przyjmujemy, że w chwili początkowej t_0 oba obrazy się pokrywają, w tym sensie, że wektory stany są w tej chwili sobie równe

$$|\psi_S(t_0)\rangle = |\psi_H(t_0)\rangle. \quad (31.23)$$

Wektor stanu w obrazie Schrödingera ewoluuje według prawa (31.3), gdzie stan początkowy możemy zastąpić przez $|\psi_H(t_0)\rangle$, to jest

$$|\psi_S(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\psi_H(t_0)\rangle. \quad (31.24)$$

Równanie to można zapisać inaczej

$$\begin{aligned} |\psi_H(t)\rangle &= \mathbf{U}^{-1}(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle = \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle \\ &= |\psi_H(t_0)\rangle = |const.\rangle, \end{aligned} \quad (31.25)$$

i przyjąć je za definicję wektora stanu w obrazie Heisenberga. A więc $|\psi_H(t)\rangle = |\psi_H(t_0)\rangle$ – wektor stanu jest stały, podczas gdy w obrazie Schrödingera $|\psi_S(t)\rangle$ podlega zmianom (ewolucji) zgodnej z równaniem Schrödingera. Ze względu na warunek $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ wektory stanu w obu obrazach pokrywają się w chwili początkowej, co ewidentnie wynika z definicji (31.25).

31.3.2 Operatory w obrazie Heisenberga

Jeżeli pewnej wielkości fizycznej w obrazie Schrödingera odpowiada obserwabla (operator hermitowski) \hat{A}_S , to w obrazie Heisenberga wielkości tej odpowiada operator

$$\hat{A}_H(t) = \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{U}(t_0, t) \hat{A}_S \mathbf{U}(t, t_0) \quad (31.26)$$

gdzie w drugiej równości skorzystaliśmy z własności (31.15) operatora ewolucji. Uzasadnienie relacji (31.26) jest następujące. Oba obrazy muszą dawać te same przewidywania fizyczne. Przewidywania te, to nic innego niż wartości oczekiwane obserwabli, brane w stanie, w którym znajduje się (w danej chwili) układ fizyczny. I tak, w obrazie Schrödingera mamy

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi_S(t) | \hat{A}_S | \psi_S(t) \rangle. \quad (31.27)$$

Podstawiamy relację (31.24) i dostajemy

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi_H(t_0) | \mathbf{U}^\dagger(t_0, t) \hat{A}_S \mathbf{U}(t_0, t) | \psi_H(t_0) \rangle. \quad (31.28)$$

Operator wewnątrz elementu macierzowego możemy utożsamić z operatorem w obrazie Heisenberga, w ten sposób dostajemy dokładnie relację (31.26). Wobec tego, tą samą wartość oczekiwaną możemy obliczać w obrazie Heisenberga, pisząc

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi_H(t_0) | \hat{A}_H(t_0) | \psi_H(t_0) \rangle. \quad (31.29)$$

Prawo transformacyjne jest konieczne po to, aby wartości oczekiwane obserwabli były identyczne w obu obrazach. Zapewnia to zarazem ich równoważność. Warto zauważyć, o czym nie wspomnieliśmy w jawny sposób, że transformacja (31.26) jest również słuszna, jeśli operator $\hat{A}_S = \hat{A}_S(t)$ zależy jawnie od czasu.

31.3.3 Ewolucja operatora w obrazie Heisenberga

Operator $\hat{A}_H(t)$ w obrazie Heisenberga jawnie zależy od czasu, na co wskazuje wzór (31.26) wiążący operatory w obu obrazach. Aby móc praktycznie pracować w obrazie Heisenberga, potrzebujemy równania ruchu dla operatorów. Jako punkt wyjścia weźmiemy relację (31.26), w której jawnie dopuścimy zależność operatora w obrazie Schrödingera $\hat{A}_S(t)$ od czasu. A więc mamy

$$\hat{A}_H(t) = \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S(t) \mathbf{U}(t, t_0), \quad (31.30)$$

co pomnożymy obustronnie przez $i\hbar$ i zrózniczkujemy po czasie (dla prostoty notacji pominiemy argumenty operatora ewolucji)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}^\dagger \right] \hat{A}_S(t) \mathbf{U} + i\hbar \mathbf{U}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \mathbf{U} \\ &\quad + i\hbar \mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S(t) \left[\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} \right] \end{aligned} \quad (31.31)$$

Pochodne czasowe operatora ewolucji eliminujemy za pomocą równań ruchu (31.7) i (31.8) otrzymując w ten sposób

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = -\mathbf{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{A}_S(t) \mathbf{U} + \mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S(t) \hat{H}_S \mathbf{U} + i\hbar \mathbf{U}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \mathbf{U} \quad (31.32)$$

Korzystając z unitarności operatora ewolucji, możemy pomiędzy H_S i $A_S(t)$ włożyć operator jednostkowy $\hat{1} = \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger$. A zatem

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = -\mathbf{U}^\dagger \hat{H}_S \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S(t) \mathbf{U} + \mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S(t) \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger \hat{H}_S \mathbf{U} + i\hbar \mathbf{U}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \mathbf{U}. \quad (31.33)$$

Rozpoznajemy (zgodnie z (31.26)) operatory w obrazie Heisenberga i piszemy

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= -\hat{H}_H \hat{A}_H(t) + \hat{A}_H(t) \hat{H}_H + i\hbar \mathbf{U}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \mathbf{U} \\ &= [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H] + i\hbar \mathbf{U}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \mathbf{U} \end{aligned} \quad (31.34)$$

co stanowi poszukiwane prawo ruchu (dynamiki) dla operatorów w obrazie Heisenberga. Zwróćmy uwagę, że oba operatory stojące wewnątrz komutatora są wyrażone w obrazie Heisenberga, i tak np. hamiltonian

$$\hat{H}_H(t) = \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H}_S \mathbf{U}(t, t_0), \quad (31.35)$$

może, w ogólnym przypadku stać się funkcją czasu. Równanie ruchu (31.34) jest bardzo ogólne, dopuszcza przypadek, w którym zarówno H_S jak i $A_S(t)$ mogą być jawnymi funkcjami czasu. W takiej sytuacji (jak wspominaliśmy) jest bardzo trudno znaleźć operator ewolucji, dlatego też nie będziemy zajmować się sytuacją ogólną.

Najczęściej mamy do czynienia z układami zachowawczymi, to jest takimi, których hamiltonian (w obrazie Schrödingera) nie zależy jawnie od czasu. Pojawiają się wówczas znaczne uproszczenia.

- Z samego założenia wynika, że dla układu zachowawczego

$$\frac{\partial}{\partial t} H_S = 0. \quad (31.36)$$

- Jak wiemy z (31.16), operator ewolucji dla niezależnego od czasu hamiltonianu wyraża się wzorem

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i \hat{H}}{\hbar} (t - t_0) \right). \quad (31.37)$$

- Wiemy także, że w tym wypadku hamiltonian komutuje z operatorem ewolucji, wobec tego

$$\hat{H}_H(t) = \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H}_S \mathbf{U}(t, t_0) = H_S = \hat{H}. \quad (31.38)$$

A więc w przypadku układu zachowawczego, hamiltonian w obrazie Heisenberga nie zależy od czasu i jest równy hamiltonianowi schrödingerowskiemu. Nie ma potrzeby ich więc odróżniać, dlatego w ostatniej równości pominęliśmy indeks rozróżniający obrazy.

- Ustaliliśmy już, że energia układu zachowawczego jest stałą ruchu. Przekonamy się o tym raz jeszcze. Zastosujemy do hamiltonianu takiego układu równanie (31.34). Ponieważ zachodzi (31.36) więc ostatni człon w (31.34) znika. Zostaje nam więc

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{H}_H = [\hat{H}_H, \hat{H}_H] = 0, \quad (31.39)$$

a wielkość która nie zmienia się w czasie jest, z określenia, stałą ruchu.

- Dla układów zachowawczych, i dla operatora \hat{A}_S nie zależnego (w obrazie Schrödingera) jawnie od czasu, ogólne równanie (31.34) redukuje się do

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t), \hat{H}], \quad (31.40)$$

bowiem hamiltonian jest identyczny w obu obrazach. Takie równania ruchu spotyka się wielu zastosowaniach mechaniki kwantowej, np. w optyce kwantowej. Są one nieraz wygodniejsze niż równanie Schrödingera.

31.3.4 Pewne dodatkowe własności obrazu Heisenberga

Obraz Heisenberga i Schrödingera dają inne, choć równoważne opisy układów kwantowo-mechanicznych. Ilustrują to dodatkowo dwa następujące twierdzenia

Twierdzenie 31.1 *W obrazie Heisenberga obowiązują te same reguły komutacyjne co w obrazie Schrödingera. Tzn. jeśli w obrazie Schrödingera*

$$[\hat{A}_S, \hat{B}_S] = i\hat{C}_S, \quad (31.41)$$

to po transformacji do obrazu Heisenberga mamy

$$[\hat{A}_H, \hat{B}_H] = i\hat{C}_H, \quad (31.42)$$

Dowód. W obrazie Schrödingera mamy z założenia

$$\hat{A}_S \hat{B}_S - \hat{B}_S \hat{A}_S = i\hat{C}_S. \quad (31.43)$$

Transformujemy do obrazu Heisenberga, zgodnie z definicją (31.30), otrzymując

$$\mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{B}_S \mathbf{U} - \mathbf{U}^\dagger \hat{B}_S \hat{A}_S \mathbf{U} = i \mathbf{U}^\dagger \hat{C}_S \mathbf{U}. \quad (31.44)$$

Po prawej rozpoznajemy \hat{C}_H – już w obrazie Heisenberga. Korzystając z unitarności \mathbf{U} mamy dalej

$$\mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger \hat{B}_S \mathbf{U} - \mathbf{U}^\dagger \hat{B}_S \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S \mathbf{U} = i \hat{C}_H, \quad (31.45)$$

czyli i po lewej "siedzimy" w obrazie Heisenberga. A zatem

$$\hat{A}_H \hat{B}_H - \hat{B}_H \hat{A}_H = i \hat{C}_H. \quad (31.46)$$

Widzimy więc, że komutator ma identyczną postać jak w obrazie Schrödingera, co należało wykazać. ■

Twierdzenie 31.2 *Operator w obrazie Heisenberga ma te same wartości własne co i w obrazie Schrödingera.*

Dowód. Wynika to stąd, że operacja unitarna stosowana według reguły $\hat{A}_H = \mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S \mathbf{U}$ nie zmienia własności algebraicznych, a więc i wartości własnych. Pokażemy to bezpośrednim rachunkiem. Niech w obrazie Schrödingera będzie spełnione zagadnienie własne

$$\hat{A}_S |a_S\rangle = \alpha |a_S\rangle. \quad (31.47)$$

Badamy to zagadnienie w obrazie Heisenberga. Ponieważ w/g (31.25) $|a_H\rangle = \mathbf{U}^\dagger |a_S\rangle$, więc korzystając z (31.30) dostajemy

$$\begin{aligned} \hat{A}_H |a_H\rangle &= (\mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S \mathbf{U}) \mathbf{U}^\dagger |a_S\rangle = \mathbf{U}^\dagger \hat{A}_S |a_S\rangle \\ &= \mathbf{U}^\dagger \alpha |a_S\rangle = \alpha \mathbf{U}^\dagger |a_S\rangle = \alpha |a_H\rangle, \end{aligned} \quad (31.48)$$

bowiem liczba (wartość własna) komutuje z dowolnym operatorem. Twierdzenie jest dowiedzione. ■

31.4 Obraz oddziaływania

Mówiąc niezbyt precyzyjnie, w obrazie Schrödingera cała zależność od czasu (przynajmniej dla układów zachowawczych) tkwi w ewolucji wektora stanu, podczas gdy obserwable są stacjonarne. W obrazie Heisenberga jest na odwrót, obserwable zmieniają się w czasie, zaś wektor stanu pozostaje stały. Obraz oddziaływania jest "czymś pośrednim" pomiędzy obrazem Schrödingera i Heisenberga. Aby to wyjaśnić, założmy, że w obrazie Schrödingera hamiltonian układu ma postać

$$\hat{H}_S = \hat{H}_S^{(0)} + V_S, \quad \text{przy czym} \quad \frac{\partial \hat{H}_S^{(0)}}{\partial t} = 0. \quad (31.49)$$

Zakładamy więc od razu, że $H_S^{(0)}$ zwany hamiltonianem swobodnym, nie zależy explicite od czasu. Człon V_S zwany zwykle oddziaływaniem może, ale nie musi, być funkcją czasu. Zdefiniujemy teraz tzw. operator ewolucji swobodnej wzorem

$$\mathbf{U}_0(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i \hat{H}_S^{(0)}}{\hbar} (t - t_0) \right). \quad (31.50)$$

Operator ten spełnia równanie ewolucji

$$i\hbar \frac{\partial \mathbf{U}_0(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}_S^{(0)} \mathbf{U}_0(t, t_0), \quad (31.51)$$

czyli równanie Schrödingera dla układu ewoluującego swobodnie, to znaczy takiego w którym nie ma oddziaływania ($V_S = 0$) (stąd zresztą jego nazwa). Operator ten ma wszelkie ogólne omówione na wstępie własności, jest unitarny, spełnia warunek początkowy $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \hat{\mathbf{1}}$, ma własność grupową.

31.4.1 Wektor stanu w obrazie oddziaływania

Przyjmijmy teraz, że w obrazie Schrödingera ewoluujący stan układu fizycznego jest określony przez wektor stanu $|\psi_S(t)\rangle$. Definiujemy nowy, przetransformowany wektor stanu, zwany wektorem stanu w obrazie oddziaływania, wzorem

$$|\psi_I(t)\rangle = \mathbf{U}_0^\dagger(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle. \quad (31.52)$$

Z warunku początkowego dla swobodnego operatora ewolucji oczywiście wynika, że

$$|\psi_I(t_0)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle, \quad (31.53)$$

czyli stany początkowe w obu obrazach są identyczne. Działając na obie strony definicji (31.52) operatorem \mathbf{U}_0^\dagger i korzystając z jego unitarności, określenie to możemy zapisać "odwrotnie"

$$|\psi_S(t)\rangle = \mathbf{U}_0(t, t_0)|\psi_I(t)\rangle. \quad (31.54)$$

Relacja ta przypomina nieco wzór (31.24) opisujący transformację pomiędzy obrazami Heisenberga i Schrödingera. Są tu jednak dwie, bardzo istotne różnice. Po pierwsze, wektor stanu $|\psi_I(t)\rangle$ jawnie zależy od czasu. I po drugie, operator transformacji zawiera jedynie hamiltonian swobodny, a więc tylko część całego hamiltonianu. Mówimy niekiedy obrazowo lecz nieprecyzyjnie, że operator \mathbf{U}_0 opisuje swobodną ewolucję układu (tj. tą za którą odpowiedzialny jest hamiltonian swobodny), zaś wektor stanu $|\psi_I(t)\rangle$ opisuje część ewolucji związaną z wpływem oddziaływania. Oczywiście powstaje pytanie jakie równanie rządzi ewolucją wektora stanu w obrazie oddziaływania.

31.4.2 Równanie Schrödingera w obrazie oddziaływania

Poszukujemy więc równania ruchu jakie musi spełniać wektor $|\psi_I(t)\rangle$. Punktem wyjścia jest oczywiście równanie Schrödingera z pełnym hamiltonianem (31.49)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_S(t)\rangle = (\hat{H}_S^{(0)} + V_S) |\psi_S(t)\rangle, \quad (31.55)$$

do którego podstawimy związek (31.54). Zgodnie z zasadami różniczkowania otrzymujemy

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_0 \right) |\psi_I(t)\rangle + i\hbar \mathbf{U}_0 \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle \right) = \hat{H}_S^{(0)} \mathbf{U}_0 |\psi_I(t)\rangle + V_S \mathbf{U}_0 |\psi_I(t)\rangle. \quad (31.56)$$

Na mocy równania (31.51) widzimy, że pierwszy człon po lewej pokrywa się z pierwszym składnikiem po prawej stronie, zatem znoszą się one i zostaje nam

$$i\hbar \mathbf{U}_0 \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle \right) = V_S \mathbf{U}_0 |\psi_I(t)\rangle. \quad (31.57)$$

Działając na obie strony tego równania operatorem \mathbf{U}_0^\dagger i korzystając po lewej z jego unitarności mamy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = \mathbf{U}_0^\dagger V_S \mathbf{U}_0 |\psi_I(t)\rangle. \quad (31.58)$$

Zdefiniujemy teraz operator oddziaływania w obrazie oddziaływania

$$V_I(t) = \mathbf{U}_0^\dagger(t, t_0) V_S \mathbf{U}_0(t, t_0). \quad (31.59)$$

Zauważmy przy tym, że jeśli nawet (w obrazie Schrödingera) operator V_S od czasu nie zależy, to w obrazie oddziaływania spodziewamy się, że $V_I(t)$ będzie jawnie zależny od czasu. Równanie (31.58) zapiszemy teraz za pomocą operatora $V_I(t)$ w postaci

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = V_I(t) |\psi_I(t)\rangle \quad (31.60)$$

i nazwiemy równaniem Schrödingera w obrazie oddziaływania. Poczynimy w tym miejscu pewne dodatkowe uwagi.

- Transformacja (31.59) operatora z obrazu Schrödingera do obrazu oddziaływania przypomina formułę (31.26) wiążącą operatory z obrazu Schrödingera i Heisenberga. Tutaj "przekładamy" do $V_I(t)$ tylko ewolucję swobodną (bowiem w (31.59) występuje operator \mathbf{U}_0). Natomiast w (31.26) z obrazu Schrödingera "przerzucamy" ewolucję pełną, operator \mathbf{U} zawiera cały hamiltonian. Sugeruje to, że również w obrazie oddziaływania obserwable będą jakoś zależeć czasu. Powinny spełniać równanie ruchu w jakiś sposób analogiczne do równania (31.34).
- Równanie (31.60) ma formalną postać identyczną ze zwykłym równaniem Schrödingera. Różnica polega przede wszystkim na tym, pełny hamiltonian został zastąpiony jego częścią, na dodatek przetransformowaną zgodnie z (31.59) do obrazu oddziaływania.

Uwagi te, przynajmniej w jakiejś mierze wyjaśniają, dlaczego wprowadzony tu sposób opisu dynamiki układów kwantowo-mechanicznych nazywamy obrazem oddziaływania (czasami też zwanym w literaturze obrazem Diraca).

31.4.3 Operatory i ich ewolucja w obrazie oddziaływania

Formalna zbieżność równań transformacyjnych (31.26) i (31.59) wskazuje, że w obrazie oddziaływania obserwable będą zależeć od czasu, nawet jeśli w obrazie Schrödingera są stałe. Dalsze rozumowanie będzie jak poprzednio. Przewidywania fizyczne muszą być niezależne od wybranego obrazu. A zatem, dla dowolnej obserwabli \hat{A}_S musi zachodzić

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi_S(t_0) | \hat{A}_S | \psi_H(t) \rangle = \langle \psi_I(t_0) | \hat{A}_I | \psi_I(t) \rangle. \quad (31.61)$$

Z określenia (31.54) mamy więc

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi_I(t_0) | \mathbf{U}_0^\dagger \hat{A}_S \mathbf{U}_0 | \psi_I(t) \rangle. \quad (31.62)$$

Przyrównując operatory stojące po prawych stronach (kety są dowolne), otrzymujemy

$$\hat{A}_I(t) = \mathbf{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S \mathbf{U}_0(t, t_0), \quad (31.63)$$

a więc dokładnie relację transformacyjną (31.59), która obowiązuje nie tylko dla hamiltonianu oddziaływania, ale i dla każdej innej obserwabli. Ponadto, relacja ta, poza czysto formalnym uzasadnieniem, zyskuje sens fizyczny polegający na tym, że wszystkie obrazy prowadzą do tych samych wniosków. Stosując transformację (31.63) do hamiltonianu swobodnego otrzymujemy

$$\hat{H}_I(t) = \mathbf{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{H}_S^{(0)} \mathbf{U}_0(t, t_0) = \hat{H}_S^{(0)}, \quad (31.64)$$

bowiem hamiltonian swobodny komutuje z operatorem ewolucji swobodnej (patrz (31.17), ponieważ z założenia nie zależy od czasu). Ponieważ hamiltonian niezależny od czasu jest taki sam

w obrazie Schrödingera, Heisenberga (patrz (31.38)) i oddziaływania, więc opuścimy indeks S i będziemy odtąd pisać

$$\text{jeśli } \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial t} = 0 \quad \text{to} \quad \hat{H}_S^{(0)} = \hat{H}_H^{(0)} = \hat{H}_I^{(0)} \equiv \hat{H}_0. \quad (31.65)$$

Operator $\hat{A}_I(t)$ w obrazie oddziaływania zależy od czasu. Musi więc spełniać jakieś równanie ruchu. Pracując w obrazie Heisenberga wyprowadziliśmy równanie (31.34), spodziewamy się więc, że w obrazie oddziaływania powinno obowiązywać podobne równanie.

Twierdzimy, że operator $\hat{A}_I(t) = \mathbf{U}_0^\dagger \hat{A}_S \mathbf{U}_0$ w obrazie oddziaływania spełnia równanie ruchu

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = [\hat{A}_I(t), \hat{H}_S^{(0)}] + i\hbar \mathbf{U}_0^\dagger(t, t_0) \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \mathbf{U}_0(t, t_0), \quad (31.66)$$

gdzie operator $\hat{A}_S(t)$ w obrazie Schrödingera może jawnie zależeć od czasu. Zauważmy, że stojący w komutatorze hamiltonian swobodny nie zależy od wyboru obrazu. Dowód tego twierdzenia przebiega praktycznie tak samo, jak analogiczne wyprowadzenie w obrazie Heisenberga. Różniczkując po czasie regułę transformacyjną (31.63) otrzymujemy

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) &= i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_0^\dagger \right] \hat{A}_S \mathbf{U}_0 + i\hbar \mathbf{U}_0^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S \right) \mathbf{U}_0 \\ &\quad + i\hbar \mathbf{U}_0^\dagger \hat{A}_S \left[\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_0 \right]. \end{aligned} \quad (31.67)$$

Pochodne czasowe operatora ewolucji swobodnej eliminujemy za pomocą równania ruchu (31.51) otrzymując

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = -\mathbf{U}_0^\dagger \hat{H}_S^{(0)} \hat{A}_S \mathbf{U}_0 + \mathbf{U}_0^\dagger \hat{A}_S \hat{H}_S^{(0)} \mathbf{U}_0 + i\hbar \mathbf{U}_0^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S \right) \mathbf{U}_0 \quad (31.68)$$

Hamiltonian swobodny komutuje z \mathbf{U}_0 , a więc komutuje także z \mathbf{U}_0^\dagger . Wobec tego

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = -\hat{H}_S^{(0)} \mathbf{U}_0^\dagger \hat{A}_S \mathbf{U}_0 + \mathbf{U}_0^\dagger \hat{A}_S \mathbf{U}_0 \hat{H}_S^{(0)} + i\hbar \mathbf{U}_0^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S \right) \mathbf{U}_0 \quad (31.69)$$

Rozpoznajemy (zgodnie z (31.63)) operator \hat{A}_I w obrazie oddziaływania i piszemy

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) &= -\hat{H}_S^{(0)} \hat{A}_I(t) + \hat{A}_I(t) \hat{H}_S^{(0)} + i\hbar \mathbf{U}_0^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \mathbf{U}_0 \\ &= [\hat{A}_I(t), \hat{H}_H^{(0)}] + i\hbar \mathbf{U}_0^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S(t) \right) \mathbf{U}_0, \end{aligned} \quad (31.70)$$

a więc stwierdzenie (31.66) jest udowodnione.

Badając obraz Heisenberga wykazaliśmy, że relacje komutacyjne z obrazu Schrödingera przenoszą się bez zmian (por. (31.41) oraz (31.42)). Można wykazać identyczne twierdzenie dla obrazu oddziaływania

$$[\hat{A}_S, \hat{B}_S] = i\hat{C}_S \quad \implies \quad [\hat{A}_I, \hat{B}_I] = i\hat{C}_I. \quad (31.71)$$

Dowód przebiega zupełnie identycznie, tyle że operator \mathbf{U} trzeba zastąpić operatorem \mathbf{U}_0 .

Obraz oddziaływania, ze względu na "rozkład" (31.49) hamiltonianu jest szczególnie wygodny, gdy chcemy badać wpływ zewnętrznych zaburzeń na układy fizyczne (np. wpływ światła na atomy). Hamiltonian swobodny jest na ogół znany, to znaczy znamy jego wartości i funkcje własne. Oddziaływanie $V_S = V_S(t)$ opisuje zewnętrzne zaburzenie, które modyfikuje stan układu. Jeśli takie zaburzenie jest niewielkie, to można próbować konstruować metody obliczeń przybliżonych. Tym jednak zajmiemy się w dalszych rozdziałach.

31.5 Ewolucja stanu układu w obrazie oddziaływania

31.5.1 Postawienie problemu

Wektor stanu $|\psi_I(t)\rangle$ w obrazie oddziaływania ewoluuje w czasie zgodnie z równaniem Schrödingera (31.60) i w chwili początkowej pokrywa się z odpowiednim wektorem (31.53) przedstawionym w obrazie Schrödingera. Rozwiązania równania (31.60) możemy szukać w postaci

$$|\psi_I(t)\rangle = \mathbf{U}_I(t, t_0)|\psi_I(t_0)\rangle = \mathbf{U}_I(t, t_0)|\psi_0\rangle, \quad (31.72)$$

gdzie $\mathbf{U}_I(t, t_0)$ nazwiemy operatorem ewolucji w obrazie oddziaływania. Oczywiście jest, że operator ten musi spełniać warunek początkowy

$$\mathbf{U}_I(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (31.73)$$

Równanie ruchu dla operatora $\mathbf{U}_I(t, t_0)$ znajdujemy tak samo jak poprzednio, podstawiając postulat (31.72) do równania (31.60) otrzymując

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_I(t, t_0) \right) |\psi_0\rangle = \hat{V}_I \mathbf{U}_I(t, t_0) |\psi_0\rangle. \quad (31.74)$$

Ponieważ $|\psi_0\rangle$ jest dowolnym (niezależnym od czasu) wektorem, więc z (31.74) otrzymujemy równanie operatorowe

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_I(t, t_0) = \hat{V}_I(t) \mathbf{U}_I(t, t_0), \quad (31.75)$$

dla którego (31.73) stanowi warunek początkowy. Rozwiązanie tego równania, tj. znalezienie operatora $\mathbf{U}_I(t, t_0)$, napotyka te same trudności, co rozwiązanie równania (31.18), nie ma więc potrzeby powtarzania tych samych argumentów (tyle, że zamiast $\hat{H}(t)$ teraz piszemy $\hat{V}_I(t)$). Trudności te można jednak, w pewnym sensie, ominąć.

31.5.2 Rozwiązanie iteracyjne

Zapiszmy równanie (31.75) w postaci

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_I(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \hat{V}_I(t) \mathbf{U}_I(t, t_0), \quad (31.76)$$

i scałkujmy je formalnie. Otrzymamy

$$\mathbf{U}_I(t, t_0) = 1 + \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \mathbf{U}_I(t_1, t_0), \quad (31.77)$$

gdzie od razu uwzględniliśmy warunek początkowy (31.73). Łatwo jest sprawdzić, że (31.77) jest rzeczywiście rozwiązaniem równania ruchu (31.76). Równanie (31.77) jest równaniem całkowym, w którym poszukiwany operator ewolucji występuje zarówno po lewej stronie jak i po prawej, pod całką. Tak więc pożytek z tego równania jest niewielki, przynajmniej w tym sensie, że niewiele ono nas zbliża do uzyskania jawnej postaci operatora \mathbf{U}_I .

Przepiszmy (dla dalszej wygody) równanie (31.77) w postaci

$$\mathbf{U}_I(t_1, t_0) = 1 + \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_2) \mathbf{U}_I(t_2, t_0), \quad (31.78)$$

która jest w pełni równoważna. Lecz pod całką w (31.77) występuje właśnie $\mathbf{U}_I(t_1, t_0)$, wobec tego możemy podstawić prawą stronę (31.78) pod całkę w równaniu (31.77). W ten sposób dostajemy

$$\begin{aligned}\mathbf{U}_I(t, t_0) &= 1 + \left(\frac{1}{i\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \left[1 + \left(\frac{1}{i\hbar}\right) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_2) \mathbf{U}_I(t_2, t_0) \right] \\ &= 1 + \left(\frac{1}{i\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \\ &\quad + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \mathbf{U}_I(t_2, t_0).\end{aligned}\quad (31.79)$$

Zwracamy uwagę, że w trzecim składniku występują dwa operatory oddziaływania uporządkowane chronologicznie, to znaczy ich argumenty czasowe spełniają relacje

$$t \geq t_1 \geq t_2 \geq t_0. \quad (31.80)$$

Oczywiście możemy wykonywać analogiczne kroki iteracyjne dowolną ilość razy. Po nieskończeniu wielu krokach otrzymamy nieskończony szereg

$$\begin{aligned}\mathbf{U}_I(t, t_0) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \\ &\quad \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \dots \hat{V}_I(t_{n-1}) \hat{V}_I(t_n).\end{aligned}\quad (31.81)$$

Formalnie rzecz biorąc nieskończony szereg po prawej nie zawiera już poszukiwanego operatora ewolucji w obrazie oddziaływania, który występuje jedynie po lewej stronie. Tak więc szereg ten możemy uznać za formalne rozwiązanie równania (31.75). Jeszcze raz podkreślmy, że operatory oddziaływania są brane w chwilach czasu uporządkowanych chronologicznie od chwili początkowej t_0 (ostatni z prawej), aż do końcowej t (pierwszy operator z lewej)

$$t \geq t_1 \geq t_2 \geq t_3 \dots t_{n-2} \geq t_{n-1} \geq t_n \geq t_0. \quad (31.82)$$

31.6 Interpretacja szeregu iteracyjnego

Do tej pory pracowaliśmy w obrazie oddziaływania. Najwygodniej jest jednak działać w obrazie Schrödingera, bowiem jest w nim najłatwiej interpretować uzyskane rezultaty. Ewolucję wektora stanu $|\psi_S(t)\rangle$ w obrazie Schrödingera wyrazimy najpierw przechodząc do obrazu oddziaływania (por (31.54))

$$|\psi_S(t)\rangle = \mathbf{U}_0(t, t_0) |\psi_I(t)\rangle, \quad (31.83)$$

a następnie $|\psi_I(t)\rangle$ opiszemy w/g (31.72) otrzymując

$$|\psi_S(t)\rangle = \mathbf{U}_0(t, t_0) \mathbf{U}_I(t, t_0) |\psi_0\rangle. \quad (31.84)$$

Ponieważ $\mathbf{U}_I(t, t_0)$ wyraziliśmy już w (31.81) więc możemy napisać

$$\begin{aligned}|\psi_S(t)\rangle &= \left[\mathbf{U}_0(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-2}} dt_{n-1} \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \right. \\ &\quad \left. \mathbf{U}_0(t, t_0) \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \dots \hat{V}_I(t_{n-1}) \hat{V}_I(t_n) \right] |\psi_0\rangle,\end{aligned}\quad (31.85)$$

gdzie operator ewolucji swobodnej wciągnęliśmy pod całki (nie zależy on od zmiennych po których całkujemy). Operatory oddziaływania pod całkami są ciągle wyrażone w obrazie oddziaływania

$V_I(t_j) = \mathbf{U}_0^\dagger(t_j, t_0) V_S(t_j) \mathbf{U}_0(t_j, t_0)$, gdzie operator $V_S(t_j)$ w obrazie Schrödingera, może zależeć od czasu. Przechodząc więc do obrazu Schrödingera dostajemy

$$\begin{aligned} |\psi_S(t)\rangle = & \left[\mathbf{U}_0(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-2}} dt_{n-1} \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \right. \\ & \mathbf{U}_0(t, t_0) \left[\mathbf{U}_0^\dagger(t_1, t_0) V_S(t_1) \mathbf{U}_0(t_1, t_0) \right] \\ & \times \left[\mathbf{U}_0^\dagger(t_2, t_0) V_S(t_2) \mathbf{U}_0(t_2, t_0) \right] \dots \\ & \times \dots \left[\mathbf{U}_0^\dagger(t_{n-1}, t_0) V_S(t_{n-1}) \mathbf{U}_0(t_{n-1}, t_0) \right] \\ & \left. \times \left[\mathbf{U}_0^\dagger(t_n, t_0) V_S(t_n) \mathbf{U}_0(t_n, t_0) \right] \right] |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (31.86)$$

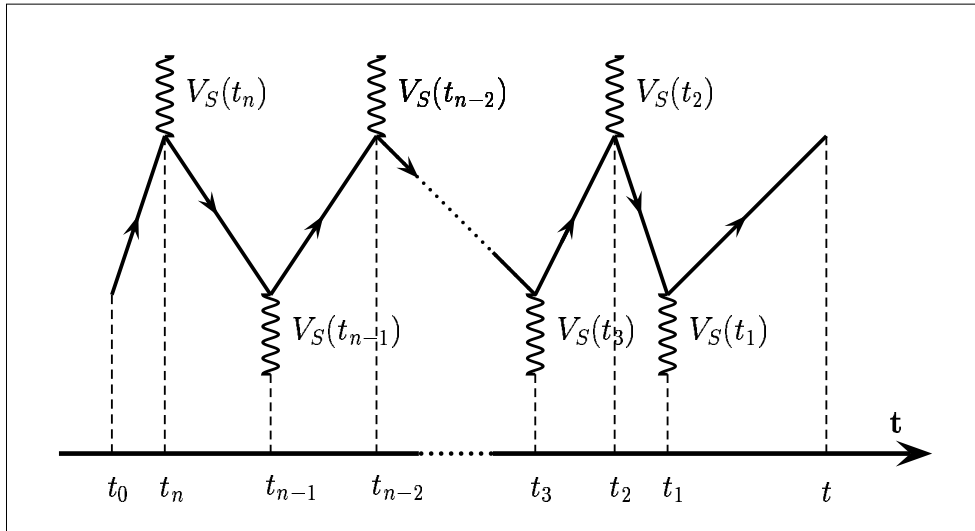
Wyrażenie to wygląda na ogromnie skomplikowane. Można je jednak uprościć, jeśli otworzymy wewnętrzne nawiasy i skorzystamy z własności operatora ewolucji swobodnej. I tak na przykład, dla iloczynu dwóch operatorów najbardziej z lewej mamy

$$\mathbf{U}_0(t, t_0) \mathbf{U}_0^\dagger(t_1, t_0) = \mathbf{U}_0(t, t_0) \mathbf{U}_0(t_0, t_1) = \mathbf{U}_0(t, t_1). \quad (31.87)$$

gdzie posłużyliśmy się relacją (31.15) i własnością grupową (31.13). Stosując analogiczne uproszczenia do iloczynów operatorów ewolucji rozdzielających operatory oddziaływania, otrzymamy

$$\begin{aligned} |\psi_S(t)\rangle = & \left[\mathbf{U}_0(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-2}} dt_{n-1} \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \right. \\ & \mathbf{U}_0(t, t_1) V_S(t_1) \mathbf{U}_0(t_1, t_2) V_S(t_2) \mathbf{U}_0(t_2, t_3) \dots \\ & \left. \dots \mathbf{U}_0(t_{n-1}, t_n) V_S(t_n) \mathbf{U}_0(t_n, t_0) \right] |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (31.88)$$

gdzie nadal obowiązuje uporządkowanie chronologiczne (31.82).



Rys. 31.1: Schemat n -tego członu szeregu (31.88). Linie ciągłe przedstawiają ewolucję swobodną układu. W kolejnych chwilach układ jest zaburzany przez oddziaływanie (linie faliste). Schematy tego typu nazywane bywają grafami Feynmana.

Równanie (31.88) przedstawia (w obrazie Schrödingera) ewolucję stanu układu fizycznego opisywanego hamiltonianem $\hat{H} = \hat{H}_0 + V_S(t)$, Stan układu w chwili początkowej t_0 dany był

wektorem $|\psi_0\rangle$. Na stan ten działa ogromnie złożony operator ewolucji, który w chwili końcowej t produkuje stan $|\psi_S(t)\rangle$. Operator ewolucji jest zapisany w postaci nieskończonego szeregu. Pierwszy (lub lepiej, zerowy) wyraz tego szeregu to $\mathbf{U}_0(t, t_0)$ – operator ewolucji swobodnej dany w (31.50). Ten człon szeregu odpowiada sytuacji, gdy nie ma oddziaływania, lub gdy oddziaływanie jest zaniedbywalnie słabe.

Kolejny, pierwszy człon szeregu ($n = 1$) ma postać

$$\left(\frac{1}{i\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt_1 \mathbf{U}_0(t, t_1) V_S(t_1) \mathbf{U}_0(t_1, t_0) |\psi_0\rangle. \quad (31.89)$$

Wyraz ten możemy interpretować w następujący sposób. Od chwili początkowej t_0 do chwili t_1 układ ewoluuje swobodnie (odczytujemy operatory od tyłu, w kolejności w jakiej działają na ket początkowy). W chwili t_1 układ zostaje poddany oddziaływaniu $V_S(t_1)$. Następnie, tj. od chwili t_1 do momentu końcowego t znów ewoluuje swobodnie. Całka uwzględnia to, że $t_1 \in (t_0, t)$, więc oddziaływanie trzeba "przesumować" po wszystkich chwilach w ciągu rozważanego przedziału czasu.

Następny, drugi ($n = 2$) wyraz szeregu to

$$\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathbf{U}_0(t, t_1) V_S(t_1) \mathbf{U}_0(t_1, t_2) V_S(t_2) \mathbf{U}_0(t_2, t_0) |\psi_0\rangle. \quad (31.90)$$

Jego interpretacja jest bardzo podobna, tyle że uwzględnia on oddziaływanie dwukrotne w chwilach, wcześniejszej t_2 i późniejszej t_1 .

Struktura kolejnych wyrazów jest taka sama. Wyraz n -ty zawiera n -krotne oddziaływanie w chronologicznie uporządkowanych chwilach. Rysunek 31.1 schematycznie przedstawia sens fizyczny n -tego członu.

Na tym zakończymy analizę ewolucji czasowej układów zaburzanych oddziaływaniem. Jak się później okaże, znalezione rozwinięcia są pożyteczne do dyskusji przybliżeń. Wyrażenie (31.88) może być dobrym punktem wyjścia do konstrukcji tzw. rachunku zaburzeń z czasem.

* * * * *