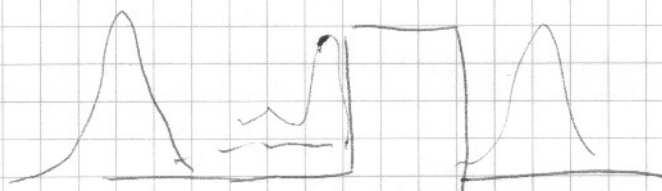


ROZWIĄZANIA PROBLEMÓW Kwantowo MECHANICZNYCH ZALEŻNYCH OD CZASU

Na poprzednich wykładach problem stacjonarnego transportu przez obszar rozpraszania (barierę)



- staty strumień cząstek (prąd) padających
- impuls cząstek - propagacja przez barierę



Równanie Schrödingera zależne od czasu

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

$$H = T + V$$

T - energia kinetyczna

V - energia potencjalna

W przedstawieniu potoieniowym

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 ; V = V(\vec{x}) ; \psi(t) = \psi(\vec{x}, t)$$

funkcja falowa

Równanie może zostać formalnie rozwiązane używając operatora ewolucji

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)}$$

dla $\hat{H}$ niezależnego od czasu $\hat{H}(t) = \hat{H}(t_0)$

$$* |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle = \hat{H} |\psi(t_0)\rangle$$

Czyli $|\psi(t)\rangle$ zadane (*) jest rozwiązaniem równania Schrödingera z czasem

Operator ewolucji spełnia równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad \hat{U}(t_0, t_0) = 1$$

↑ To równanie jest również ważne dla $\hat{H}$ zależnego od czasu, ale wtedy operator ewolucji nie ma postaci $e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$

wartość oczekiwana operatora A w funkcji czasu

$$\langle \tilde{A} \rangle_t = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \\ = \langle \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0) | \hat{A} | \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0) \rangle$$

Dla $\hat{H}$ niezależnego od czasu

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} = U(\Delta t)$$

operator ewolucji można napisać w powyższej formie.

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3x' \hat{U}(t, t_0) |x'\rangle \langle x' | \psi(t_0) \rangle$$

$$\psi(x, t) \equiv \langle x | \psi(t) \rangle = \int d^3x' \langle x | \hat{U}(t, t_0) | x' \rangle \psi(x', t_0)$$

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)(T+V)}$$

V - skalarna funkcja x

T - operator różniczkowy w przestrzeni 

Czy możemy napisać $\hat{U}(t, t_0)$ jako iloczyn operatorów?

Czyli, kiedy $\hat{U}(t, t_0) \approx e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)T} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)V}$

Twierdzenie Baker-Campbell-Hausdorff

$$(e^C = e^A e^B) \Leftrightarrow (C = A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}[A, [A, B]] + \frac{1}{12}[[A, B], B] + \dots)$$

LEMAT

T & V na ogół nie komutują!

Pokażemy najpierw, że:

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \dots + \frac{1}{n!}[A, \underbrace{[A, \dots [A, B] \dots]}_{n\text{-razy}}] + \dots$$

Zdefiniujmy funkcję:

$$f(\lambda) := e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$$

i rozwińmy ją w szeregu Taylora

$$f(\lambda) = f(0) + \lambda f'(0) + \frac{\lambda^2}{2!} f''(0) + \frac{\lambda^3}{3!} f'''(0) + \dots$$

$$f(0) = B$$

$$f'(\lambda) = A e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} B A e^{-\lambda A}$$

$$f'(0) = AB - BA = [A, B]$$

$$f'(\lambda) = e^{\lambda A} A B e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} B A e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [AB - BA] e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [A, B] e^{-\lambda A}$$

$$f''(\lambda) = A e^{\lambda A} [A, B] e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} [A, B] A e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} (A[A, B] - [A, B]A) e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [A, [A, B]] e^{-\lambda A}$$

$$f''(0) = [A, [A, B]]$$

$$f^{(n)}(0) = [A, \underbrace{[A, \dots [A, B] \dots]}_{n\text{-razy}}]$$



$$\lambda=1)$$

8-4

$$f(1) = e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots + \frac{1}{n!} [A, [A, \dots [A, B]]] + \dots$$

Przejdźmy teraz do twierdzenia

$$e^C = e^A e^B \Leftrightarrow ($$

$$\text{zdefiniujemy funkcję } g(\lambda) = e^{\lambda A} e^{\lambda B}$$

$$\begin{aligned} g'(\lambda) &= A e^{\lambda A} e^{\lambda B} + e^{\lambda A} B e^{\lambda B} = \\ &= \{A + e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}\} e^{\lambda A} e^{\lambda B} = \\ &= \{A + B + \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots\} g(\lambda) \end{aligned}$$

Z drugiej strony

$$\begin{aligned} g'(\lambda) &= g(\lambda) \{e^{-\lambda B} A e^{\lambda B} + B\} = \\ &= g(\lambda) \{A + B + [-\lambda B, A] + \frac{1}{2!} [-\lambda B, [-\lambda B, A]] + \\ &\quad + \frac{1}{3!} [-\lambda B, [-\lambda B, [-\lambda B, A]]] + \dots\} \end{aligned}$$

$$\textcircled{1} \quad \frac{g'(\lambda)}{g(\lambda)} = A + B + \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, B]] + \frac{\lambda^3}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots$$

$$\textcircled{2} \quad \frac{g'(\lambda)}{g(\lambda)} = A + B + \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [\underbrace{[A, [A, B]]}_{\text{u-1 razy}}] + \frac{\lambda^3}{3!} [\underbrace{[[A, B], B]}_{\text{u-1 razy}}] + \dots$$

$$\frac{\textcircled{1} + \textcircled{2}}{2} \Rightarrow \frac{g'(\lambda)}{g(\lambda)} = A + B + \lambda [A, B] + \frac{1}{2} \frac{\lambda^2}{2!} \{ [A, [A, B]] + [A, B], B \} + \dots$$

Formalne całkowanie daje

$$\ln g(\lambda) = \lambda \{ A + B + \frac{\lambda}{2 \cdot n(n-1)!} \underbrace{[A, [A, \dots [A, B]]}_{\text{u-1 razy}} + \dots \}$$

$$\ln g(\lambda) = (A+B)\lambda + \frac{\lambda^2}{2} [A, B] + \frac{\lambda^3}{3 \cdot 2 \cdot 2!} \{ [A, [A, B]] + [A, B], B \} + \dots$$

$$g(\lambda) = \exp \left\{ (A+B)\lambda + \frac{\lambda^2}{2} [A, B] + \frac{\lambda^3}{12} ([A, [A, B]] + [A, B], B) + \dots \right\}$$

dla $\lambda=1$ mamy twierdzenie Baker-Campbell-Hausdorff

Kiedy $[A, B] = 0$ to $g(\lambda) = e^{(A+B)\lambda}$ (8-5)
 czyli $e^A e^B = e^{A+B}$ dla $\lambda = 1$

Teraz wykorzystamy twierdzenie B-C-H, do zapisania operatora ewolucji w odpowiedniej formie

$$\hat{T} \equiv A = \mathcal{O}(\delta t) \quad \hat{V} \equiv B = \mathcal{O}(\delta t)$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}} \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{T}} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{V}} = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H} - \frac{1}{2} \frac{\delta t^2}{\hbar^2} [\hat{T}, \hat{V}] + \mathcal{O}(\delta t^3) \right\}$$

błąd rzędu $\mathcal{O}(\delta t^2)$

Pamiętamy z dyskusji metody różnic skończonych, że lepszy podział może prowadzić do mniejszych błędów

np. symetryczne wyrażenie

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}} \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\hat{T}}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{V}} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\hat{T}}{2}} + \mathcal{O}(\delta t^3)$$

błąd rzędu δt^3

Uwaga dla $V = \text{const}$ (staty potencjał)

$[T, V] = 0$ i wówczas $e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}}$ jest ścisły

$$A = -\frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\hat{T}}{2} \quad B = -\frac{i}{\hbar} \delta t V$$

$$e^A e^B = e^{\exp(A+B - \frac{\delta t^2}{4\hbar^2} [\hat{T}, \hat{V}] + \mathcal{O}(\delta t^3))}$$

$$C = A+B - \frac{\delta t^2}{4\hbar^2} [\hat{T}, \hat{V}] + \mathcal{O}(\delta t^3)$$

$$\begin{aligned} e^A e^B e^A &= e^C e^A = \exp \left(C+A - \frac{1}{2} [C, A] + \mathcal{O}(\delta t^3) \right) = \\ &= \exp \left(\left[-\frac{i}{\hbar} \delta t (\hat{T} + \hat{V}) \right] - \frac{\delta t^2}{4\hbar^2} [\hat{T}, \hat{V}] + \frac{\delta t^2}{4\hbar^2} [\hat{T}, \hat{V}] + \mathcal{O}(\delta t^3) \right) \\ &= \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \delta t (\hat{T} + \hat{V}) + \mathcal{O}(\delta t^3) \right) \end{aligned}$$