1 دینامیک، انرژی

دینامیک تحول ِ حالت ِ سیستم را میدهد، یعنی به این سئال جواب میدهد که اگر حالت ِ سیستم در زمان ِ t_0 برابر با $|\psi(t_0)\rangle$ باشد، حالت ِ سیستم در زمان ِ t چیست. با رابطه ی ِ انرژی با بسامد شروع میکنم:

$$E = \hbar\,\omega, \tag{1}$$

که E انرژی و ω بسامد- ِ-زاویئی ست. این یعنی اگر u_ω یک تابع ِ تک-بسامد از زمان باشد:

$$u_\omega(t) = c\,\exp(-\mathrm{i}\,\omega\,t), \tag{2}$$

که c یک ثابت است، انرژی ی ِ متناظر با این تابع $(\hbar\omega)$ است. پس اگر $|\psi\rangle$ یک ترکیب ِ خطی از تابعها ی ِ تک-بسامد از زمان باشد:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_\omega |a_\omega\rangle\,\exp(-\mathrm{i}\,\omega\,t), \tag{3}$$

اثر ِ H (عملگر ِ انرژی) بر آن چنین میشود.

$$\begin{aligned} H\,|\psi(t)\rangle &= \sum_\omega |a_\omega\rangle\,(\hbar\,\omega)\,\exp(-\mathrm{i}\,\omega\,t),\\ &= \mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,|\psi(t)\rangle. \end{aligned} \tag{4}$$

اینها خیل ی شبیه ِ چیزها یی یَند که برا ی ِ تکانه به دست آمد. جاها یی یک علامت ِ منفی اضافه (یا کم) است. این فقط قرارداد ِ تاریخی ست و چندان مهم نیست. (البته مهم است که همه-جا فقط یک قرارداد به کار رود.) فرق ِ مهم بین ِ مکان-تکانه و زمان-انرژی در کوانتم-مکانیک ِ نانسبیتی این است که مکان و تکانه و انرژی مشاهده-پذیر َند، اما زمان فقط پارامتر ِ تحول است. برا ی ِ زمان عملگر ی تعریف نشده است. یک چیز ِ دیگر که آن هم اصولَن قرارداد است، این که در کوانتم-مکانیک معمولَن به H هَمیلتنی میگویند. و معمولَن منظور از انرژی ویژه-مقدار ِ هَمیلتنی ست. اما این اسم-گذاری هم همه-جا رعایت نمیشود.

رابطه یِ (4) را به عنوانِ اصل برا یِ دینامیک (تحولِ زمانی) میگیرند:

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,|\psi(t)\rangle=[H(t)]\,|\psi(t)\rangle. \tag{5}$$

این رابطه چیز ی شبیهِ قانونِ دومِ نیوتُن در مکانیکِ نیوتُنی ست. و کار َش این است که با معلوم-بودنِ حالت در زمانِ t_0، حالت در زمانِ t را بدهد. شبیهِ قانونِ دومِ نیوتُن که با معلوم بودنِ مکان و سرعت در زمانِ t_0، مکان و سرعت در زمانِ t را میدهد. البته در مکانیکِ نیوتنی، برا یِ این باید نیرو و جرم دانسته باشند. در کوانتم-مکانیک هم باید هَمیلتنی معلوم باشد. به معادله یِ (5)، معادله یِ تحول در کوانتم-مکانیک، معادله یِ شْرُدینگِر (یا مفصلتر معادله یِ وابسته-به-زمانِ شْرُدینگِر) میگویند. این معادله یک معادله یِ دیفرانسیلِ مرتبه-یِ-یکِ خطی ست: مشتقِ زمانی یِ بردارِ مجهول (اینجا حالتِ سیستم) برابر است با یک عملگرِ خطی (اینجا هَمیلتنی تقسیم بر $(\mathrm{i}\,\hbar)$) ضرب در بردارِ مجهول. روشِ حلِ آن هم ان روشِ حلِ چنین-معادلات ی ست.

چون (5) خطی ست، بستگی یِ $|\psi(t)\rangle$ به $|\psi(t_0)\rangle$ خطی ست. یعنی یک عملگرِ U هست که

$$|\psi(t)\rangle=U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle. \tag{6}$$

به U عملگرِ تحول میگویند. از این که H اِرمیتی ست، نتیجه میشود U یکانی ست. برا یِ اثبات، یک حالتِ دلبخاهِ $|\phi(t)\rangle$ میگیرم که تحولِ آن هم با (5) داده میشود، و در نتیجه

$$|\phi(t)\rangle=U(t,t_0)\,|\phi(t_0)\rangle. \tag{7}$$

مزدوجِ اِرمیتی یِ (5) را حساب میکنم:

$$\begin{aligned}-\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,\langle\psi(t)|&=\langle\psi(t)|\,[H(t)]^{\dagger},\\&=\langle\psi(t)|\,[H(t)].\end{aligned} \tag{8}$$

این به کار رفته که $[H(t)]$ اِرمیتی ست. به این ترتیب،

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,[\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle]&=\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,\langle\psi(t)|\right]\,|\phi(t)\rangle+\langle\psi(t)|\,\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,\phi(t)\rangle\right],\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\,\hbar}\,[-\langle\psi(t)|H(t)|\phi(t)\rangle+\langle\psi(t)|H(t)|\phi(t)\rangle],\\&=0.\end{aligned} \tag{9}$$

این یعنی

$$\langle\psi(t_0)|\phi(t_0)\rangle = \langle\psi(t)|\phi(t)\rangle. \tag{10}$$

پس،

$$\langle\psi(t_0)|\phi(_0t)\rangle = \langle\psi(t_0)|[U(t,t_0)]^\dagger\,[U(t,t_0)]|\phi(t_0)\rangle. \tag{11}$$

این رابطه برا یِ هر $\langle\psi(t_0)|$ و $|\phi(t_0)\rangle$ برقرار است. پس،

$$[U(t,t_0)]^\dagger\,[U(t,t_0)] = 1, \tag{12}$$

که نشان میدهد U یکانی ست.

یک وضعیت ِ خاص که در آن حل ِ معادلات- ِ-دیفرانسیل ِ خطی سادِتر است، این است که عملگر- ِ-خطی یِ متناظر مستقل از زمان باشد. اینجا یعنی هَمیلتنی مستقل از زمان باشد. گیرم چنین است. اگر عملگر- ِ-خطی یِ متناظر قطری-شدنی باشد، میشود بردار ِ مجهول را بر حسب ِ ویژه-بردارها یِ آن بسط داد. هَمیلتنی مشاهده-پذیر است، پس اِرمیتی و قطری-شدنی ست. یعنی یک پایه هست که هر یک از اعضا یِ آن یک ویژه-بردار ِ هَمیلتنی ست. حالت ِ سیستم را بر حسب ِ این پایه بسط میدهم:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\,|j\rangle, \tag{13}$$

که c_j ها عدد َند و

$$H\,|j\rangle = E_j\,|j\rangle. \tag{14}$$

چون هَمیلتنی مستقل-از-زمان است، ویژه-بردارها و ویژه-مقدارها یِ آن هم چنین َند. (البته در هر ویژه-بردارها میشود یک عدد ِ تابع- ِ-زمان ضرب کرد.) (13) را در (5) میگذارم:

$$\sum_j [\mathrm{i}\,\hbar\,\dot{c}_j(t)]\,|j\rangle = \sum_j [E_j\,c_j(t)]\,|j\rangle. \tag{15}$$

دُ-طرف ِ این تساوی بر حسب ِ یک پایه بسط داده شده اند. پس ضرایب ِ بسط یکسان َند:

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\dot{c}_j(t) = E_j\,c_j(t). \tag{16}$$

حل ِ این معادلات ساده است. هر یک از اینها یک معادله یِ دیفرانسیل ِ خطی یِ مرتبه-یِ-یک با ضریب ِ ثابت برا یِ یک متغیر (c_j) است. جواب میشود

$$c_j(t) = c_j(t_0)\,\exp\left[\frac{E_j\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]. \tag{17}$$

پس،

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j |j\rangle\,c_j(t_0)\,\exp\left[\frac{E_j\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]. \tag{18}$$

چون هَمیلتنی اِرمیتی ست، پایه ای که اعضا یَ ش ویژه-بردار ِ آن َند را میشود یکه-متعامد کرد. چنین میکنم. در این صورت از (13) دیده میشود

$$\begin{aligned}\langle k|\psi(t)\rangle &= \sum_j c_j(t)\,\langle k|j\rangle,\\ &= c_k(t).\end{aligned} \tag{19}$$

پس (18) میشود

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j |j\rangle\,\langle j|\psi(t_0)\rangle\,\exp\left[\frac{E_j\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]. \tag{20}$$

از (14) هم دیده میشود

$$\left\{\exp\left[\frac{E_j\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]\right\}\,|j\rangle = \left\{\exp\left[\frac{H\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]\right\}\,|j\rangle. \tag{21}$$

پس (20) میشود

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \left\{\exp\left[\frac{H\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]\right\}\,\sum_j |j\rangle\,\langle j|\psi(t_0)\rangle,\\ &= \left\{\exp\left[\frac{H\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]\right\}\,|\psi(t_0)\rangle.\end{aligned} \tag{22}$$

میشد این را مستقیمَن از (5) به دست آورد. وقت ی H مستقل-از-زمان است،

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,t}\,\left\{\exp\left[\frac{H\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]\right\} = H\,\left\{\exp\left[\frac{H\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]\right\}. \tag{23}$$

به این ترتیب، (5) با طرف ِ چپ ِ تساوی ی ِ دوم در (22) به جا ی ِ $|\psi(t)\rangle$ براورده میشود. همچنین، دیده میشود طرف ِ چپ ِ تساوی ی ِ دوم در (22)، در $(t=t_0)$ برابر با $|\psi(t_0)\rangle$ است. پس شرط ِ اولیه ی ِ معادله هم براورده میشود. به این ترتیب، وقت ی هَمیلتنی مستقل-از-زمان است،

$$U(t,t_0) = \exp\left[\frac{H\,(t-t_0)}{\mathrm{i}\,\hbar}\right]. \tag{24}$$

البته در بیشتر ِ موارد ِ عملی، راه ِ محاسبه ی ِ نمایی یی که در (22) ظاهر میشود هم ان است که در بالا آمد.

خلاصه، وقت ی H در معادله ی ِ (5) مستقل-از-زمان است، یک راه برا ی ِ محاسبه ِ تحول ِ حالت یا خُد ِ عملگر- -تحول این است که H قطری شود. به معادله ی ِ ویژه-مقداری برا ی ِ H معادله ی ِ مستقل-از-زمان ِ شْرُدینگِر میگویند. این در واقع هم ان معادله ی ِ (14) است. یا

$$E\,|u\rangle = H\,|u\rangle, \tag{25}$$

که در آن ویژه-مقدارها ی ِ E و ویژه-بردارها ی ِ $|u\rangle$ هر-دُ مجهول َند. وقت ی این معادله حل شد، حالت ِ اولیه بر حسب ِ ویژه-بردارها بسط داده میشود. مسئله ی ِ تحول ِ یک حالت تبدیل میشود به مسئله ی ِ تحول ِ ضریبها ی ِ بسط. حل ِ این مسئله ساده است: هر ضریب در یک نمایی ضرب میشود که نما ی ِ آن انرژی ی ِ متناظر ضرب در زمان ِ تحول تقسیم بر $(\mathrm{i}\,\hbar)$ است، چنان که در (17) دیده میشود.