Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις IV: Χρονική εξέλιξη

Η τελευταία αρχή της Κβαντικής Μηχανικής δηλώνει ότι η κυματοσυνάρτηση, $\psi(x,t)$, εξελίσσεται στο χρόνο μέσω της εξίσωσης

$$\hat{H}\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \tag{4.1}$$

Η λύση της (4.1) δίδεται ως

$$\psi(x,t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0) \tag{4.2}$$

Με το σύμβολο $\exp\{\hat{A}\} = e^{\hat{A}}$, όπου $\hat{A}$ ένας τελεστής, συμβολίζουμε την άπειρη σειρά

$$e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2!}\left(\hat{A}\right)^2 + \frac{1}{3!}\left(\hat{A}\right)^3 + \ldots = \sum_j \frac{\left(\hat{A}\right)^j}{j!} \tag{4.3}$$

Αυτό ισχύει για οποιαδήποτε κατάσταση $\psi(x,0)$. Εδώ είναι ένα καλό σημείο να τονίσουμε ότι ο συμβολισμός με το εκθετικό ενός τελεστή θέλει προσοχή. Ως παράδειγμα, το εκθετικό δυο τελεστών δεν ισούται με το γινόμενο των δυο εκθετικών παρά μόνο σε ειδικές περιπτώσεις. Συγκεκριμένα, ισχύει γενικά η ταυτότητα BCH:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}$$

και αυτό μόνο στην περίπτωση που ο μεταθέτης των $\hat{A},\hat{B}$ ισούται με μιγαδικό αριθμό. Η απόδειξη της BCH βρίσκεται στο Μαθηματικό συμπλήρωμα του κεφαλαίου. Προφανώς ανακτούμε το $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ μόνο για $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$.

1. <u>Χρονική εξέλιξη κυματοσυνάρτησης</u>

Υπάρχει μια σημαντική απλοποίηση στην (4.2) όταν η $\psi(x,0)$ είναι ιδιοσυνάρτηση της Hamiltonian, έστω $\psi(x,0) = \varphi_n(x)$. Σε αυτή την περίπτωση, ο συνδυασμός των (4.2) και (4.3) δίνει:

$$\psi(x,t) = \left\{1 + \left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)^2 + \ldots\right\}\varphi_n(x) \tag{4.4}$$

Εφόσον η $\varphi_n(x)$ είναι ιδιοσυνάρτηση της $\hat{H}$, θα έχουμε

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$$

και επομένως, ο γενικός όρος στην (4.4)

$$\frac{1}{j!}\left(-\frac{i\hat{\mathrm{H}}t}{\hbar}\right)^j \varphi_n(x) = \frac{1}{j!}\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)^j \varphi_n(x)$$

Αντικαθιστώντας στην (4.4), παίρνουμε

$$\psi(x,t) = \left\{1 + \left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) + \frac{1}{2!}\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)^2 + \ldots\right\}\varphi_n(x)$$

$$\Rightarrow \psi(x,t) = e^{-iE_n t/\hbar}\varphi_n(x) = e^{-i\omega_n t}\varphi_n(x) \tag{4.5}$$

όπου γράψαμε $\omega_n = E_n/\hbar$ για συντομία.

Αυτή είναι η εξίσωση που δίνει την χρονική μεταβολή μιας ιδιοσυνάρτησης της Hamiltonian $\varphi_n(x)$. Και εφόσον κάθε κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοσυναρτήσεων της $\hat{\mathrm{H}}$, μπορούμε εύκολα να βρούμε τη χρονική εξέλιξη της τυχαίας $\psi(x,0)$ γράφοντας τη ως γραμμικό συνδυασμό των ιδιοσυναρτήσεων της $\hat{\mathrm{H}}$, έστω $\varphi_n(x)$:

$$\psi(x,0) = \sum_m c_m \varphi_m(x) \tag{4.6}$$

Οι συντελεστές c_m, όπως ξέρουμε, δίδονται από την έκφραση

$$c_m = \int \varphi_m^*(x)\psi(x,0)\,dx$$

Επομένως, χρόνο t αργότερα, θα έχουμε:

$$\psi(x,t) = e^{-i\hat{\mathrm{H}}t/\hbar}\sum_m c_m\varphi_m(x) = \sum_m c_m e^{-i\hat{\mathrm{H}}t/\hbar}\varphi_m(x) = \sum_m c_m e^{-iE_m t/\hbar}\varphi_m(x)$$

και τελικά:

$$\psi(x,t) = \sum_m c_m e^{-i\omega_m t}\varphi_m(x) \tag{4.7}$$

Με λόγια: από τη στιγμή που έχουμε την $\psi(x,0)$ ως άπειρη σειρά των $\varphi_m(x)$, με συντελεστές c_m, η κυματοσυνάρτηση σε χρόνο t, $\psi(x,t)$, δίδεται ως:

$$\psi(x,t) = \sum_m c_m(t)\varphi_m(x) \tag{4.8}$$

όπου

$$c_m(t) = c_m(0)e^{-i\omega_m t} \tag{4.9}$$

Στην (4.9) αντικαταστήσαμε τις αρχικές σταθερές, c_m, με το σύμβολο $c_m(0)$ για να δείξουμε ότι είναι οι σταθερές που αντιστοιχούν στην $\psi(x,0)$.

Επομένως, το ανάπτυγμα (4.6) παραμένει, με τη μορφή της (4.8), όμως τώρα οι συντελεστές $c_m(t)$ είναι συναρτήσεις του χρόνου. Η εξίσωση (4.8) δίνει, προφανώς, την εξέλιξη στο χρόνο οποιασδήποτε κυματοσυνάρτησης, $\psi(x,0)$.

Σημείωση: βλέπουμε ότι η πυκνότητα πιθανότητας δεν εξαρτάται από το χρόνο, όταν η κυματοσυνάρτηση είναι ιδιοσυνάρτηση της Hamiltonian:

$$\psi(x,t)=\varphi_n(x)e^{-i\omega_n t}\Rightarrow\left|\psi(x,t)\right|^2=\left|\varphi_n(x)\right|^2\left|e^{-i\omega_n t}\right|^2=\left|\varphi_n(x)\right|^2=\left|\psi(x,0)\right|^2$$

Αντίθετα, όταν η κυματοσυνάρτηση δεν είναι ιδιοσυνάρτηση της Hamiltonian, η πυκνότητα πιθανότητας μεταβάλλεται στο χρόνο. Έστω ένα απλό σύστημα που είναι υπέρθεση δυο ιδιοσυναρτήσεων της $\hat{\mathrm{H}}$, τις φ_m και φ_n, με ιδιοτιμές E_m και E_n αντίστοιχα:

$$\psi(x,0)=c\varphi_m(x)+d\varphi_n(x)$$

Σε χρόνο t, θα έχουμε:

$$\psi(x,t)=ce^{-i\omega_a t}\varphi_m(x)+de^{-i\omega_b t}\varphi_n(x)$$

όπου $\hbar\omega_m=E_m$, $\hbar\omega_n=E_n$. Θεωρώντας, για απλοποίηση, ότι $c,d\in\mathbb{R}$, η πυκνότητα πιθανότητας θα είναι:

$$\begin{aligned}\left|\psi(x,t)\right|^2&=|c|^2\left|\varphi_m(x)\right|^2+|d|^2\left|\varphi_n(x)\right|^2+cde^{-i\omega_a t}e^{+i\omega_b t}\varphi_m^{\ *}(x)\varphi_n(x)+cde^{+i\omega_a t}e^{-i\omega_b t}\varphi_n^{\ *}(x)\varphi_m(x)\\&=F(x)+G(x)\cos\left[(\omega_n-\omega_m)t\right]\end{aligned}$$

Στο τελευταίο βήμα απλώς συμβολίζουμε την εξάρτηση από το x με δυο συναρτήσεις, $F(x)$ και $G(x)$. Βλέπουμε ότι η πυκνότητα πιθανότητας είναι συνάρτηση του χρόνου.

2. <u>Χρονική εξέλιξη φυσικών μεγεθών</u>

Από το θεώρημα της μέσης τιμής, η μέση τιμή μιας φυσικής ποσότητας A, σε χρόνο t, $\left\langle \mathrm{A}(t)\right\rangle$, δίδεται από την έκφραση:

$$\left\langle \mathrm{A}(t)\right\rangle=\int\psi^*(x,t)\hat{\mathrm{A}}\psi(x,t)dx \tag{4.10}$$

Στην απλή περίπτωση που $\psi(x,0)=\varphi_n(x)$ (δηλ. η κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι κάποια ιδιοσυνάρτηση της Hamiltonian), θα έχουμε, λόγω της (4.4)

$$\psi(x,t)=\varphi_n(x)e^{-i\omega_n t}$$

και άρα

$$\left\langle \mathrm{A}(t)\right\rangle=\int e^{+i\omega_n t}\varphi_n^{\ *}(x)\hat{\mathrm{A}}e^{-i\omega_n t}\varphi_n(x)dx=\int\varphi_n^{\ *}(x)\hat{\mathrm{A}}\varphi_n(x)dx=\left\langle \mathrm{A}(0)\right\rangle$$

Επομένως, σε ένα σύστημα που έχει ως κυματοσυνάρτηση μια ιδιοσυνάρτηση της Hamiltonian, η μέση τιμή *κάθε* φυσικής ποσότητας διατηρείται αναλλοίωτη. Αυτό δεν ισχύει σε συστήματα των οποίων η κυματοσυνάρτηση είναι υπέρθεση των ιδιοσυναρτήσεων της $\hat{\mathrm{H}}$. Από την (4.8) έχουμε:

$$\begin{aligned}\left\langle \mathrm{A}(t)\right\rangle&=\int\left[\sum_n c_n^{\ *}(t)\varphi_n^{\ *}(x)\right]\hat{\mathrm{A}}\left[\sum_m c_m(t)\varphi_m(x)\right]dx\\&=\sum_n\sum_m c_n^{\ *}(t)c_m(t)\int\varphi_n^{\ *}(x)\hat{\mathrm{A}}\ \varphi_m(x)dx\end{aligned}$$

$$\left\langle \mathrm{A}(t) \right\rangle = \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \mathrm{A}_{nm} \tag{4.11}$$

όπου το σύμβολο A_{nm} ορίζεται ως

$$\mathrm{A}_{nm} = \int \varphi_n^*(x) \hat{\mathrm{A}} \varphi_m(x) dx$$

και εφόσον το ολοκλήρωμα είναι ορισμένο, το A_{nm} είναι απλώς ένας αριθμός. Μπορούμε εύκολα να επιβεβαιώσουμε ότι όταν οι $\varphi_m(x)$ είναι ιδιοσυναρτήσεις και του $\hat{\mathrm{A}}$ έστω με ιδιοτιμή a_m,

$$\mathrm{A}_{nm} = \int \varphi_n^*(x) a_m \varphi_m(x) dx = a_m \delta_{nm}$$

Σε αυτή την περίπτωση:

$$\left\langle \mathrm{A}(t) \right\rangle = \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) a_m \delta_{nm} = \sum_n \left| c_n(t) \right|^2 a_n = \sum_n \left| c_n(0) \right|^2 a_n = \left\langle \mathrm{A}(0) \right\rangle$$

και επομένως η μέση τιμή του A διατηρείται στο χρόνο. Παρατηρούμε πως όταν ο $\hat{A}$ και η $\hat{H}$ έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις, τότε η μέση τιμή του A διατηρείται στο χρόνο:

$$\left\langle A(t) \right\rangle = \left\langle A(0) \right\rangle$$

3. Γενικός τύπος χρονικής εξέλιξης μέσης τιμής

Παραγωγίζοντας την (4.10) παίρνουμε:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \mathrm{A}(t) \right\rangle = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{\mathrm{A}} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{\mathrm{A}}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{\mathrm{A}} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx$$

Χρησιμοποιώντας την χρονική εξέλιξη της ψ :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{\mathrm{H}} \psi \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \left(\hat{\mathrm{H}} \psi \right)^*$$

Μπορούμε να αντικαταστήσουμε τις παραγώγους ως προς το χρόνο, παίρνοντας:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \mathrm{A}(t) \right\rangle = \int \left(\frac{i}{\hbar} \left(\hat{\mathrm{H}} \psi^* \right) \hat{\mathrm{A}} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{\mathrm{A}}}{\partial t} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{\mathrm{A}} \hat{\mathrm{H}} \psi \right) dx$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat{\mathrm{A}}}{\partial t} \psi \, dx + \frac{i}{\hbar} \int \left(\psi^* \hat{\mathrm{H}} \hat{\mathrm{A}} \psi - \psi^* \hat{\mathrm{A}} \hat{\mathrm{H}} \psi \right) dx$$

$$\frac{d \left\langle \mathrm{A}(t) \right\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{\mathrm{A}}}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{A}} \right] \right\rangle \tag{4.12}$$

Από την (4.12) βλέπουμε ότι, για να διατηρείται μια φυσική ποσότητα A , θα πρέπει

α) να μην εξαρτάται απευθείας από το χρόνο (προφανές)

β) ο τελεστής της να μετατίθεται με την Hamiltonian: $\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{A}} \right] = 0$

Σε αυτή την περίπτωση

$$\frac{d}{dt}\left\langle \mathrm{A}(t)\right\rangle = 0 \Rightarrow \left\langle \mathrm{A}(t)\right\rangle = \text{σταθερά}$$

Πως συνάδει αυτό με το προηγούμενο αποτέλεσμα ότι όταν ο $\hat{\mathrm{A}}$ έχει κοινές ιδιοκαταστάσεις με τον $\hat{\mathrm{H}}$ $\left\langle \mathrm{A}(t)\right\rangle = \left\langle \mathrm{A}(0)\right\rangle$; Θα αποδείξουμε αργότερα πως όταν δυο τελεστές μετατίθενται, τότε έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις (και το αντίθετο).

4. Παραδείγματα χρονικής εξέλιξης φυσικών ποσοτήτων

Εφαρμόζουμε την εξίσωση (4.12) για μερικές γνωστές φυσικές ποσότητες.

4.1. Για $\hat{\mathrm{A}} = \hat{\mathrm{x}}$, έχουμε:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial x}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m} + \hat{\mathrm{V}}(\hat{\mathrm{x}}), \hat{\mathrm{x}}\right]\right\rangle$$

$$\left[\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m} + \hat{\mathrm{V}}(\hat{\mathrm{x}}), \hat{\mathrm{x}}\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{\mathrm{p}}^2, \hat{\mathrm{x}}\right] + \left[\hat{\mathrm{V}}(\hat{\mathrm{x}}), \hat{\mathrm{x}}\right] = \frac{1}{2m}\cdot\left(\hat{\mathrm{p}}[\hat{\mathrm{p}}, \hat{\mathrm{x}}] + [\hat{\mathrm{p}}, \hat{\mathrm{x}}]\hat{\mathrm{p}}\right) = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathrm{p}}(-i\hbar) - i\hbar\hat{\mathrm{p}}\right)$$

Και επομένως

$$\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{x}}\right] = -\frac{i\hbar\hat{\mathrm{p}}}{m}$$

Τελικά παίρνουμε:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\cdot(-i\hbar)\frac{\langle\hat{\mathrm{p}}\rangle}{m} = \frac{\langle\hat{\mathrm{p}}\rangle}{m} \tag{4.13}$$

Σημειώνουμε πως για να ισχύει η (4.13), πρέπει να ισχύει $\left[\hat{\mathrm{p}}^2, \hat{\mathrm{x}}\right] \neq 0$, δηλ. πρέπει $\left[\hat{\mathrm{p}}, \hat{\mathrm{x}}\right] \neq 0$.

Ο μεταθέτης $\left[\hat{\mathrm{x}}, \hat{\mathrm{p}}\right]$υπολογίζεται με εφαρμογή σε μια τυχαία $f(x)$:

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathrm{x}}, \hat{\mathrm{p}}\right] f(x) &= (x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)f(x) - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\left(xf(x)\right)\\ &= -i\hbar x\frac{df}{dx} + i\hbar\frac{d}{dx}(xf) = -i\hbar x\frac{df}{dx} + i\hbar x\frac{df}{dx} + i\hbar f(x)\end{aligned}$$

και άρα

$$\Rightarrow \left[\hat{\mathrm{x}}, \hat{\mathrm{p}}\right] = i\hbar$$

4.2. Για $\hat{\mathrm{A}} = \hat{\mathrm{p}}$, διακρίνουμε δυο περιπτώσεις:

α) Ελεύθερο σωμάτιο: $V(x) = 0 \Rightarrow \hat{\mathrm{H}} = \dfrac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m}$

$$\left[\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{p}}\right] = \left[\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m}, \hat{\mathrm{p}}\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{\mathrm{p}}^2, \hat{\mathrm{p}}\right] = 0 \Rightarrow \frac{d\langle p\rangle}{dt} = 0$$

δηλ. βλέπουμε ότι η μέση ορμή διατηρείται (πρώτος νόμος του Νεύτωνα).

β) Με την παρουσία δυναμικού:

$$\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{p}}\right]=\left[\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m}+\hat{\mathrm{V}}(x),\hat{\mathrm{p}}\right]=\left[\hat{\mathrm{V}}(x),\hat{\mathrm{p}}\right]=i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}$$

Απόδειξη:

$$\left[\hat{\mathrm{V}}(\hat{\mathrm{x}}),\hat{\mathrm{p}}\right]f(x)=V(x)\left(-i\hbar\frac{df}{dx}\right)+i\hbar\frac{d}{dx}\big(V(x)f(x)\big)=-i\hbar V\frac{df}{dx}+i\hbar V\frac{df}{dx}+i\hbar\frac{dV}{dx}f(x)$$

Αντικαθιστώντας στην (4.12), παίρνουμε:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt}=\left\langle\frac{\partial\hat{\mathrm{p}}}{\partial t}\right\rangle+\frac{i}{\hbar}\left\langle i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle=\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

Για πραγματικά κλασσική κίνηση θα είχαμε

$$m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2}=F\big(\langle x\rangle\big)\text{ και όχι }\big\langle F(x)\big\rangle$$

Αναπτύσσοντας σε σειρά Taylor γύρω από το σημείο $\langle x\rangle$,

$$F(x)=F\big(\langle x\rangle\big)+F'\big(\langle x\rangle\big)\big(x-\langle x\rangle\big)+\frac{1}{2}F''\big(\langle x\rangle\big)\big(x-\langle x\rangle\big)^2+\dots$$

$$\big\langle F(x)\big\rangle=F\big(\langle x\rangle\big)+0+\frac{1}{2}\big\langle F''\big(\langle x\rangle\big)\big\rangle(\Delta x)^2+\dots$$

Βλέπουμε πως όταν οι διακυμάνσεις του x (όπως μετρώνται από τη διασπορά Δx) είναι μικρές, και επομένως βρισκόμαστε στο κλασσικό όριο, έχουμε $\big\langle F(x)\big\rangle=F\big(\langle x\rangle\big)$.

4.3. Έστω $\hat{\mathrm{A}}=\hat{\mathbb{P}}$, ο τελεστής της ομοτιμίας που ορίζεται από την εξίσωση:

$$\hat{\mathbb{P}}f(x)=f(-x)$$

Οι ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{\mathbb{P}}$ βρίσκονται με επίλυση της εξίσωσης:

$$\hat{\mathbb{P}}f(x)=\lambda f(x) \tag{4.14}$$

Δρώντας στην (4.14), με τον $\hat{\mathbb{P}}$:

$$\left.\begin{aligned}\hat{\mathbb{P}}^2f(x)&=\lambda\hat{\mathbb{P}}f(x)=\lambda^2f(x)\\ \hat{\mathbb{P}}f(x)&=\hat{\mathbb{P}}\hat{\mathbb{P}}f(x)=\hat{\mathbb{P}}f(-x)=f(x)\end{aligned}\right\}\Rightarrow\lambda^2=1\Rightarrow\lambda=\pm1$$

Για $\lambda=+1$: $\hat{\mathbb{P}}g(x)=g(-x)=g(x)\to$ άρτια συνάρτηση

Για $\lambda=-1$: $\hat{\mathbb{P}}g(x)=g(-x)=-g(x)\to$ περιττή συνάρτηση

και επομένως, οι ιδιοτιμές του τελεστή της ομοτιμίας είναι $+1$ και -1, οι δε αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις είναι όλες οι άρτιες συναρτήσεις (για το $+1$) και όλες οι περιττές συναρτήσεις (για το -1).

Πότε διατηρείται η ομοτιμία;

$$\left[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathbb{P}}\right]=\frac{1}{2m}\left[\hat{\mathrm{p}}^2,\hat{\mathbb{P}}\right]+\left[V(\hat{\mathrm{x}}),\hat{\mathbb{P}}\right]$$

Ο πρώτος όρος υπολογίζεται εύκολα:

$$\left[\hat{\mathbb{P}},\hat{\mathrm{p}}^2\right]=0$$

Ο δεύτερος όρος υπολογίζεται με τη δράση σε μια τυχαία $f(x)$:

$$\begin{aligned}\left[V(x),\hat{\mathbb{P}}\right]f(x)&=V(x)\hat{\mathbb{P}}\big(f(x)\big)-\hat{\mathbb{P}}\big(V(x)f(x)\big)\\&=V(x)f(-x)-V(-x)f(-x)=\big(V(x)-V(-x)\big)f(-x)\end{aligned}$$

Αν τώρα $V(x)=V(-x)$, τότε σημειώνουμε ότι μπορεί να γραφτεί ως

$$\left[\hat{\mathrm{V}}(\hat{\mathrm{x}}),\hat{\mathbb{P}}\right]=0 \text{ και } \frac{d}{dt}\left\langle\hat{\mathbb{P}}\right\rangle=0.$$

Για να εφαρμόσουμε τα ως άνω, φτιάχνουμε ένα απειρόβαθο πηγάδι που είναι συμμετρικό ως προς το $x=0$, δηλ. εκτείνεται στο $\left[-\frac{L}{2},\frac{L}{2}\right]$. Αυτό το καταφέρνουμε ξεκινώντας από το απειρόβαθο πηγάδι του $[0,L]$, και κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής:

$$x'=x-\frac{L}{2}\Rightarrow x=x'+\frac{L}{2}\Rightarrow x\to x+\frac{L}{2}\Rightarrow \sin\frac{n\pi x}{L}\to\sin\frac{n\pi}{L}\left(x+\frac{L}{2}\right)=\sin\left(\frac{n\pi x}{L}+\frac{n\pi}{2}\right)$$

Διακρίνουμε δυο περιπτώσεις, ανάλογα με το αν ο ακέραιος n είναι άρτιος ή περιττός.

- Για $\quad n=2\rho\Rightarrow\sin\left(\frac{n\pi x}{L}+\rho\pi\right)=(-1)^\rho\sin\frac{n\pi x}{L}$
- Για $\quad n=2\rho+1\Rightarrow\sin\left(\frac{n\pi x}{L}+\rho\pi+\frac{\pi}{2}\right)=(-1)^\rho\cos\frac{n\pi x}{L}$

και επομένως οι ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{\mathrm{H}}$ είναι της μορφής

$$\varphi_{2\rho+1}(x)=\cos\frac{(2\rho+1)\pi x}{L} \quad \text{για περιττούς } n \quad \big(n=(2\rho+1)\big) \text{ και} \tag{4.15}$$

$$\varphi_{2\rho}(x)=\sin\left(\frac{2\rho\pi x}{L}\right) \quad \text{για ζυγούς } n \quad (n=2\rho) \tag{4.16}$$

Σημειώνεται ότι ο παράγοντας $(-1)^\rho$ έχει παραλειφθεί στις (4.15) και (4.16) (αφού πρόκειται απλώς για μια φάση).

Εφαρμόζοντας τα ως άνω βλέπουμε ότι όντως

$$\hat{\mathbb{P}}\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(-\frac{n\pi x}{L}\right)=+\varphi_n(x)$$

Παράδειγμα: έστω σωμάτιο σε συμμετρικό απειρόβαθο πηγάδι με εύρος L, με κυματοσυνάρτηση:

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{50}}\sqrt{\frac{2}{L}}\left\{7\sin\frac{2\pi x}{L}+\cos\frac{\pi x}{L}\right\}=\frac{7\varphi_2(x)+\varphi_1(x)}{\sqrt{50}}$$

Η μέση τιμή της ομοτιμίας δίδεται ως

$$\left\langle\hat{\mathbb{P}}\right\rangle=\left|\frac{7}{\sqrt{50}}\right|^2\cdot(-1)+\left|\frac{1}{\sqrt{50}}\right|^2\cdot(+1)=-\frac{49}{50}+\frac{1}{50}=-\frac{24}{25}$$

Σε χρόνο t, η κυματοσυνάρτηση δίδεται ως:

$$\psi(x,t)=\frac{7}{\sqrt{50}}\varphi_2 e^{-i\omega_2 t}+\frac{1}{\sqrt{50}}\varphi_1 e^{-i\omega_1 t}$$

και επομένως

$$\left\langle\hat{\mathbb{P}}(t)\right\rangle=\frac{49}{50}(-1)+\frac{1}{50}(+1)=-\frac{24}{25}$$

και, προφανώς, η $\left\langle\hat{\mathbb{P}}(t)\right\rangle$ είναι σταθερή.

Σημειώνεται ότι το φαινόμενο της διατήρησης της ομοτιμίας παρατηρείται στον κόσμο των σωματιδίων. Η ομοτιμία ενός συστήματος, όταν οι αντίστοιχες αλληλεπιδράσεις (και επομένως το «δυναμικό») είναι συμμετρικές ως προς το x, διατηρείται.

4.4. <u>Παραδείγματα</u>

4.4.1 <u>Μέτρηση δυο διαφορετικών, ανεξάρτητων φυσικών μεγεθών</u>

Δυο Ερμιτιανοί τελεστές, $\hat{\mathrm{A}}$ και $\hat{\mathrm{B}}$, έχουν (γνωστές) ιδιοσυναρτήσεις $f_{1,2}(x)$ και $g_{1,2}(x)$ και ιδιοτιμές, $a_{1,2}$ και $b_{1,2}$, αντίστοιχα:

$$\hat{\mathrm{A}}f_i(x)=a_i f_i(x),\ \hat{\mathrm{B}}g_i(x)=b_i g_i(x) \qquad \text{όπου } i=1,2$$

Δίδεται επίσης ότι

$$f_1(x)=\frac{2g_1(x)+3g_2(x)}{\sqrt{13}} \qquad f_2(x)=\frac{3g_1(x)-2g_2(x)}{\sqrt{13}} \tag{4.17}$$

α) Σε ένα τυχαίο σύστημα με κυματοσυνάρτηση $\psi(x)$, μετράμε το A και βρίσκουμε a_1. Ακολούθως μετράμε το B. Τι θα βρούμε και με ποια πιθανότητα;

Απ.: Εφόσον μετρήσαμε το A και βρήκαμε a, η κυματοσυνάρτηση του συστήματος αμέσως μετά είναι $\psi'(x)=f_1(x)$. Μια μέτρηση του B (σε χρόνο $\Delta t\to 0$) θα δώσει b_1 ή b_2 με πιθανότητες που μπορούν να αναγνωστούν απευθείας από τις (4.17):

$$p(b_1)=\left|\frac{2}{\sqrt{13}}\right|^2=\frac{4}{13} \quad \text{και} \quad p(b_2)=\left|\frac{3}{\sqrt{13}}\right|^2=\frac{9}{13} \tag{4.18}$$

β) Μετά τη μέτρηση του B, ξαναμετράμε το A (πάλι σε χρόνο $\Delta t\to 0$). Ποια είναι η πιθανότητα να ξαναβρούμε a_1;

Απ.: Υπάρχουν δυο πιθανές διαδικασίες:

- μέτρηση του B δίνει b_1 και ακολούθως βρίσκουμε a_1
- μέτρηση του B δίνει b_2 και ακολούθως βρίσκουμε a_1

Η ολική πιθανότητα να ξαναβρούμε a_1 είναι

$$p(\text{ξανά } a_1) = p(b_1)\cdot p(a_1|b_1) + p(b_2)\cdot p(a_1|b_2)$$

όπου το σύμβολο $p\left(a_j \middle| b_j\right)$ σημαίνει την πιθανότητα να μετρήσουμε a_i αν αμέσως πριν μετρήσαμε b_j. Για να υπολογίσουμε τα $p\left(a_j \middle| b_j\right)$ πρέπει να αντιστρέψουμε τις (4.17), για να εκφράσουμε τις $g_{1,2}(x)$ ως γραμμικούς συνδυασμούς των $f_{1,2}(x)$. Λίγη άλγεβρα μας δίνει:

$$g_1(x) = \frac{2f_1(x)+3f_2(x)}{\sqrt{13}} \quad \text{και} \quad g_2(x) = \frac{3f_1(x)-2f_2(x)}{\sqrt{13}} \tag{4.19}$$

Από τις (4.19) μπορούμε να αναγνώσουμε αμέσως τους παράγοντες $p\left(a_j \middle| b_j\right)$: αφού μέτρηση του B με αποτέλεσμα b_j αφήνει το σύστημα με κυματοσυνάρτηση $g_j(x)$, παίρνουμε

$$p(a_1|b_1) = \left|\frac{2}{\sqrt{13}}\right|^2 = \frac{4}{13} \quad \text{και} \quad p(a_1|b_2) = \left|\frac{3}{\sqrt{13}}\right|^2 = \frac{9}{13}$$

Από την άλλη, η πιθανότητα να βρούμε b_1 ή b_2 στη δεύτερη μέτρηση δίδεται από τις (4.18). Επομένως,

$$p(\text{ξανά } a_1) = \frac{4}{13}\cdot\frac{4}{13} + \frac{9}{13}\cdot\frac{9}{13} = \frac{97}{169}$$

4.4.2 Μέτρηση με χρονική εξέλιξη

Μια φυσική ποσότητα A, έχει ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις $a_{1,2}$ και $f_{1,2}(x)$ αντίστοιχα. Μας δίδονται επίσης οι ιδιοτιμές/ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής:

$$\hat{\mathrm{H}}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$$

Δίδονται επίσης οι $f_i(x)$ ως γραμμικοί συνδυασμοί των $\varphi_i(x)$:

$$f_1(x) = \frac{2\varphi_1(x)+3\varphi_2(x)}{\sqrt{13}} \quad \text{και} \quad f_2(x) = \frac{3\varphi_1(x)-2\varphi_2(x)}{\sqrt{13}} \tag{4.20}$$

Έστω ότι το σύστημα είναι στην εξής κατάσταση στο $t=0$:

$$\begin{aligned}\psi(x,0) &= c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)\\ &= \frac{1-i}{2} f_1(x) + \frac{1+i}{2} f_2(x)\end{aligned}$$

1. Μετράμε A. Τι βρίσκουμε, με ποια πιθανότητα;

$$a_1 : p(a_1) = \frac{|1-i|^2}{4} = \frac{2}{4} = \frac{1}{2}$$
$$a_2 : p(a_2) = \frac{|1+i|^2}{4} = \frac{1}{2}$$

2. Μετά τη μέτρηση βρήκαμε a_2. Ξαναμετράμε σε χρόνο $\Delta t \to 0$ το A, τί βρίσκουμε;

Απ.: σίγουρα a_2

3. Αφήνουμε να περάσει χρόνος t, ξαναμετράμε το A. Ποια η πιθανότητα να μετρήσουμε a_1;

Εφόσον μετρήσαμε $a_2 \Rightarrow \psi'(x,0) = f_2(x)$. Χρόνο t μετά,

$$\begin{aligned}\psi'(x,t) &= e^{-i\hat{\mathrm{H}}\mathrm{t}/\hbar} f_2(x) = e^{-i\hat{\mathrm{H}}\mathrm{t}/\hbar}\left\{\frac{3}{\sqrt{13}}\varphi_1(x) - \frac{2}{\sqrt{13}}\varphi_2(x)\right\} \\ &= \frac{3}{\sqrt{13}}\varphi_1(x)e^{-i\omega_1 \mathrm{t}} - \frac{2}{\sqrt{13}}\varphi_2(x)e^{-i\omega_2 \mathrm{t}}\end{aligned} \tag{4.21}$$

Εφόσον η (4.21) δεν είναι γραμμικός συνδυασμός των $f_1(x)$ και $f_2(x)$, δεν μπορούμε να διαβάσουμε απευθείας την πιθανότητα εύρεσης των a_1 και a_2. Για να υπολογισθούν οι πιθανότητες, υπάρχουν δύο τρόποι:

α) να γράψουμε την $\psi'(x,t)$ ως γραμμικό συνδυασμό των f_n: Αντιστρέφουμε τις (4.20):

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{13}}(2f_1 + 3f_2) \quad \text{και} \quad \varphi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{13}}(3f_1 - 2f_2)$$

και άρα

$$\begin{aligned}\psi'(x,t) &= \frac{3}{\sqrt{13}} \cdot \frac{1}{\sqrt{13}}(2f_1 + 3f_2)e^{-i\omega_1 t} - \frac{2}{\sqrt{13}} \cdot \frac{1}{\sqrt{13}}(3f_1 - 2f_2)e^{-i\omega_2 t} \\ &= \frac{1}{13}\left\{6f_1 e^{-i\omega_1 t} - 6f_1 e^{-i\omega_2 t} + 9f_2 e^{-i\omega_1 t} + 4f_2 e^{-i\omega_2 t}\right\}\end{aligned}$$

$$\psi'(x,t) = c_1 f_1\left(e^{-i\omega_1 t} - e^{-i\omega_2 t}\right) + c_2 f_2\left(9e^{-i\omega_1 t} + 4e^{-i\omega_2 t}\right) \text{ όπου } c_1 = \frac{6}{13} \qquad c_2 = \frac{1}{13}$$

$$\begin{aligned}p(a_1) &= \left(\frac{6}{13}\right)^2\left\{1 + 1 - e^{i(\omega_1-\omega_2)t} - e^{-i(\omega_1-\omega_2)t}\right\} = \left(\frac{6}{13}\right)^2\left[2 - 2\cos(\omega_1 - \omega_2)t\right] \\ &= \frac{2(6)^2}{(13)^2}(1 - \cos\Delta\omega t)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}p(a_2) &= \left(\frac{1}{13}\right)^2\left\{9^2 + 4^2 + 36 \cdot e^{-i\omega_1 t + i\omega_2 t} + 36 \cdot e^{+i\omega_1 t - i\omega_2 t}\right\} + \left(\frac{1}{13}\right)^2\left[(81+16) + 72\cos\Delta\omega t\right] \\ &= \frac{1}{(13)^2}\left[97 + 72\cos\Delta\omega t\right]\end{aligned}$$

Επαληθεύουμε ότι η συνολική πιθανότητα είναι 1:

$$p(a_1) = \frac{72}{169}(1 - \cos\Delta\omega t) \qquad p(a_2) = \frac{1}{169}(97 + 72\cos\Delta\omega t)$$

$$p(a_1) + p(a_2) = \frac{72+97}{169} - \frac{72}{169}\cos\Delta\omega t + \frac{72}{169}\cos\Delta\omega t = 1$$

β) Να πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο της $\psi'(x,t)$ με τις $f_1(x), f_2(x)$:

$$\psi'(x,t) = \frac{3\varphi_1(x)e^{-i\omega_1 t} - 2\varphi_2(x)e^{-i\omega_2 t}}{\sqrt{13}} = d_1 f_1 + d_2 f_2$$

$$d_1 = f_1 \circ \psi' = (f_1, \psi') = \int f_1^* \psi' dx$$
$$d_2 = f_2 \circ \psi' = (f_2, \psi') = \int f_2^* \psi' dx$$

$$f_1 = \frac{1}{\sqrt{13}}(2\varphi_1 + 3\varphi_2) \Rightarrow f_1 \circ \varphi_1 = \frac{2}{\sqrt{13}} \qquad f_1 \circ \varphi_2 = \frac{3}{\sqrt{13}}$$
$$f_2 = \frac{1}{\sqrt{13}}(3\varphi_1 - 2\varphi_2) \Rightarrow f_2 \circ \varphi_1 = \frac{3}{13} \qquad f_2 \circ \varphi_2 = -\frac{2}{\sqrt{13}}$$

$$\Rightarrow f_1 \circ \psi' = \frac{3}{\sqrt{13}} f_1 \circ \varphi_1 e^{-i\omega_1 t} - \frac{2}{\sqrt{13}} f_1 \circ \varphi_2 e^{-i\omega_2 t} = \frac{3\cdot 2}{13} e^{-i\omega_1 t} - \frac{2\cdot 3}{13} e^{-i\omega_2 t}$$
$$\Rightarrow f_2 \circ \psi' = \frac{3}{\sqrt{13}} f_2 \circ \varphi_1 e^{-i\omega_1 t} - \frac{2}{\sqrt{13}} f_2 \circ \varphi_2 e^{-i\omega_2 t} = \frac{9}{13} e^{-i\omega_1 t} + \frac{4}{13} e^{-i\omega_2 t}$$

$$p(a_1) = |f_1 \circ \psi'|^2 = |(f_1, \psi')|^2 = \left| \frac{6}{13} e^{-i\omega_1 t} - \frac{6}{13} e^{-i\omega_2 t} \right|^2$$
$$p(a_2) = |f_2 \circ \psi'|^2 = |(f_2, \psi')|^2 = \left| \frac{9}{13} e^{-i\omega_1 t} + \frac{4}{13} e^{-i\omega_2 t} \right|^2$$

Από εδώ και πέρα, η άλγεβρα είναι όπως στο (α).

5. Μαθηματικό συμπλήρωμα

5.1 Ιδιότητες των μεταθετών

1. $$\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}+\hat{\Gamma}\right]=\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]+\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\Gamma}\right]$$

Απόδειξη:

$$\hat{\mathrm{A}}\left(\hat{\mathrm{B}}+\hat{\Gamma}\right)-\left(\hat{\mathrm{B}}+\hat{\Gamma}\right)\hat{\mathrm{A}}=\left(\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}}-\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{A}}\right)+\left(\hat{\mathrm{A}}\hat{\Gamma}-\hat{\Gamma}\hat{\mathrm{A}}\right)$$

2. $$\left[\hat{\mathrm{A}},\lambda\hat{\mathrm{B}}\right]=\lambda\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]$$

Απόδειξη:

$$\hat{\mathrm{A}}\lambda\hat{\mathrm{B}}-\lambda\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{A}}=\lambda\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]$$

3. $$\left[\hat{\mathrm{A}}^2,\hat{\mathrm{B}}\right]=\hat{\mathrm{A}}\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]+\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]\hat{\mathrm{A}}$$

Απόδειξη:

$$\left[\mathrm{A}^2\hat{\mathrm{B}}\right]=\hat{\mathrm{A}}^2\hat{\mathrm{B}}-\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{A}}+\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{A}}-\hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{A}}^2$$

4. $$\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{A}}^n\right]=0 \text{ (προφανές)}$$

5. $$\left[f\left(\hat{\mathrm{A}}\right),\hat{\mathrm{A}}\right]=0 \ , \qquad f\left(\hat{\mathrm{A}}\right)=c_0+c_2\hat{\mathrm{A}}+\ldots+c_n\hat{\mathrm{A}}^n$$

Απόδειξη: η (5) είναι άμεση εφαρμογή της (4).

5.2 Τελεστές στον εκθέτη: το λήμα του Hadamard (Hadamard's Lemma)

Έστω δυο τελεστές $\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}$. Τότε ισχύει:

$$e^{\hat{\mathrm{A}}}\hat{\mathrm{B}}e^{-\hat{\mathrm{A}}}=\hat{\mathrm{B}}+\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]+\frac{1}{2!}\left[\hat{\mathrm{A}},\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]\right]+\frac{1}{3!}\left[\hat{\mathrm{A}},\left[\hat{\mathrm{A}},\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]\right]\right]+\ldots \tag{4.22}$$

Η απόδειξη της (4.22) έχει ως εξής: Θεωρούμε τη συνάρτηση

$$f\left(t\right)=e^{t\hat{\mathrm{A}}}\hat{\mathrm{B}}e^{-t\hat{\mathrm{A}}} \tag{4.23}$$

όπου t μια παράμετρος (όχι ο χρόνος). Αναπτύσσουμε τη (4.23) κατά Taylor - οπότε χρειαζόμαστε τις τρεις πρώτες παραγώγους:

$$f'\left(t\right)=\hat{\mathrm{A}}e^{t\hat{\mathrm{A}}}\hat{\mathrm{B}}e^{-t\hat{\mathrm{A}}}-e^{t\hat{\mathrm{A}}}\hat{\mathrm{B}}e^{-t\hat{\mathrm{A}}}\hat{\mathrm{A}}=e^{t\hat{\mathrm{A}}}\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]e^{-t\hat{\mathrm{A}}}$$

$$f''\left(t\right)=\hat{\mathrm{A}}e^{t\hat{\mathrm{A}}}\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]e^{-t\hat{\mathrm{A}}}-e^{+t\hat{\mathrm{A}}}\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]e^{-t\hat{\mathrm{A}}}\hat{\mathrm{A}}=e^{t\hat{\mathrm{A}}}\left[\hat{\mathrm{A}},\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]\right]e^{-t\hat{\mathrm{A}}}$$

$$f'''\left(t\right)=e^{t\hat{\mathrm{A}}}\left[\hat{\mathrm{A}},\left[\hat{\mathrm{A}},\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]\right]\right]e^{-t\hat{\mathrm{A}}}$$

Οπότε για $t=0$, παίρνουμε:

$$f(0) = \hat{\mathrm{B}}$$
$$f'(0) = \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]$$
$$f''(0) = \left[\hat{\mathrm{A}}, \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]\right]$$
$$f'''(0) = \left[\hat{\mathrm{A}}, \left[\hat{\mathrm{A}}, \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]\right]\right]$$

Και άρα

$$\begin{aligned} e^{t\hat{\mathrm{A}}}\hat{\mathrm{B}}e^{-t\hat{\mathrm{A}}} &= f(0) + tf'(0) + \frac{t^2}{2!}f''(0) + \frac{t^3}{3!}f'''(0) + \ldots \\ &= \hat{\mathrm{B}} + \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]t + \left[\hat{\mathrm{A}}, \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]\right]\frac{t^2}{2!} + \left[\hat{\mathrm{A}}, \left[\hat{\mathrm{A}}, \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]\right]\right]\frac{t^3}{3!} + \ldots \end{aligned}$$

Για $t = 1$, παίρνουμε την (4.22).

5.3 Τελεστές στον εκθέτη: η ταυτότητα Baker-Campbell-Hausdorff (BCH)

Θα αποδείξουμε ότι

$$e^{\hat{\mathrm{A}}+\hat{\mathrm{B}}} = e^{\hat{\mathrm{A}}}e^{\hat{\mathrm{B}}}e^{-\frac{1}{2}\left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]}$$

όπου $\hat{\mathrm{A}}$ και $\hat{\mathrm{B}}$ τελεστές με $\left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right] = z$ όπου z μιγαδικός αριθμός.

Από τη σχέση (4.22) για $\hat{\mathrm{B}}$=1 έχουμε

$$e^{\hat{\mathrm{A}}} \cdot e^{-\hat{\mathrm{A}}} = \hat{\mathrm{I}}$$

άρα ο ένας είναι αντίστροφος τελεστής του άλλου.

Χρησιμοποιώντας τον ορισμό (4.3), έχουμε:

$$\begin{aligned} e^{\hat{\mathrm{A}}+\hat{\mathrm{B}}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}}\right)^n}{n!} \\ &= \hat{\mathrm{I}} + \hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}} + \frac{1}{2}\left(\hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}}\right)\left(\hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}}\right) + \ldots \\ &= \hat{\mathrm{I}} + \hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}} + \frac{1}{2}\left(\hat{\mathrm{A}}^2 + \hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}} + \hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}}^2\right) + \ldots \end{aligned} \tag{4.24}$$

Η απλοποίηση της (4.24) δεν είναι γενικά εφικτή, αφού $\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}} \neq \hat{\mathrm{B}}\hat{\mathrm{A}}$ και επομένως δεν μπορούμε να γράψουμε το άθροισμα τους ως $2\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}}$. Η ταυτότητα BCH δίνει, με ακρίβεια τέταρτης τάξης:

$$e^{\hat{\mathrm{A}}}e^{\hat{\mathrm{B}}} = \exp\left\{\hat{\mathrm{A}} + \hat{\mathrm{B}} + \frac{1}{2}\left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right] + \frac{1}{12}\left[\hat{\mathrm{A}}, \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]\right] + \left[\hat{\mathrm{B}}, \left[\hat{\mathrm{B}}, \hat{\mathrm{A}}\right]\right]\right\} - \frac{1}{24}\hat{\mathrm{B}}\left[\hat{\mathrm{A}}, \left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right]\right] + \ldots \tag{4.25}$$

Δεν υπάρχει κάποια γνωστή κλειστή έκφραση για την (4.25). Υπάρχει ωστόσο μια μεγαλύτερη απλοποίηση για την περίπτωση που ο μεταθέτης των $\hat{\mathrm{A}}$ και $\hat{\mathrm{B}}$ είναι αριθμός (έστω μιγαδικός):

$$\left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{B}}\right] = c\hat{\mathrm{I}}, \quad \mathrm{c} \in \mathbb{C} \tag{4.26}$$

Σε αυτή την περίπτωση η (4.25) γράφεται

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \tag{4.27}$$

Η απόδειξη της (4.27) γίνεται ως εξής: Ορίζουμε τον τελεστή

$$\hat{G}(t) \equiv e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{-t\hat{A}} \tag{4.28}$$

όπου t ελεύθερη παράμετρος (όχι ο χρόνος!). Είναι προφανές ότι

$$\hat{G}(0) = I \quad \text{και} \quad \hat{G}^{-1}(t) = e^{t\hat{A}}e^{-t(\hat{A}+\hat{B})} \tag{4.29}$$

Παραγωγίζοντας τον $\hat{G}(t)$ και πολλαπλασιάζοντας με τον $\hat{G}^{-1}(t)$ παίρνουμε:

$$\begin{aligned}\hat{G}^{-1}\frac{d\hat{G}}{dt} &= e^{t\hat{A}}e^{-t(\hat{A}+\hat{B})}\left[\left(\hat{A}+\hat{B}\right)e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{-t\hat{A}} - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{-t\hat{A}}\hat{A}\right] = e^{t\hat{A}}\left[\left(\hat{A}+\hat{B}\right)e^{-t\hat{A}} - \hat{A}\cdot e^{-t\hat{A}}\right] \\ &= e^{t\hat{A}}\hat{A}e^{-t\hat{A}} + e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} - \hat{A}\cdot e^{t\hat{A}}\cdot e^{-t\hat{A}} = e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}}\end{aligned} \tag{4.30}$$

Χρησιμοποιώντας το λήμα του Hadamard για την περίπτωση της (4.26), παίρνουμε:

$$e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} = \hat{B} + t\left[\hat{A},\hat{B}\right]$$

Επομένως, τελικά,

$$\hat{G}^{-1}\frac{d\hat{G}}{dt} = \hat{B} + t\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{B} + ct\hat{I} \tag{4.31}$$

Δοκιμάζουμε λύση της μορφής[1]:

$$\hat{G}(t) = e^{\alpha t\hat{B}}e^{\beta ct^2}$$

Οπότε έχουμε

$$\hat{G}^{-1}(t) = e^{-\alpha t\hat{B}}e^{-\beta ct^2} \qquad \text{και} \qquad \frac{d\hat{G}(t)}{dt} = \left(\alpha\hat{B}+2\beta \mathrm{ct}\right)e^{\alpha t\hat{B}}e^{\beta ct^2}$$

Επομένως

$$\hat{G}^{-1}\frac{d\hat{G}}{dt} = \alpha\hat{B} + 2\beta \mathrm{ct} \tag{4.32}$$

Συγκρίνοντας τις (4.32) και (4.31), συμπεραίνουμε ότι:

$$\alpha = 1 \quad \beta = 1/2 \quad \hat{G}(t) = e^{t\hat{B}}e^{\frac{1}{2}ct^2}$$

Θέτοντας τον $\hat{G}(t)$ στην (4.28) παίρνουμε

$$e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{-t\hat{A}} = e^{t\hat{B}}e^{\frac{1}{2}ct^2}$$

Παίρνοντας $t = 1$,

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{-\hat{A}} = e^{\hat{B}}e^{c/2} \Rightarrow e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}e^{[\hat{A},\hat{B}]/2}$$

[1] (Πρόκειται περί επιφοίτησης... πρόκειται για φοβερό trick - δεν υπάρχει λογική εδώ)

Αλλάζοντας τους $\hat{\mathrm{A}}$ και $\hat{\mathrm{B}}: \hat{\mathrm{A}} \leftrightarrow \hat{\mathrm{B}}$ και χρησιμοποιώντας $\hat{\mathrm{A}}+\hat{\mathrm{B}}=\hat{\mathrm{B}}+\hat{\mathrm{A}}$ και $\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]=-\left[\hat{\mathrm{B}},\hat{\mathrm{A}}\right]$, παίρνουμε τελικά

$$e^{\hat{\mathrm{A}}+\hat{\mathrm{B}}}=e^{\hat{\mathrm{A}}}e^{\hat{\mathrm{B}}}e^{-\frac{1}{2}\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]} \tag{4.33}$$