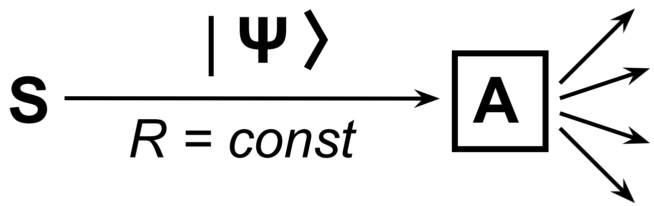
Зависимость состояний от времени



$t = t_1$ $\qquad\qquad$ $t = t_2$

$$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ . \\ C_n \end{pmatrix} \qquad |\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} C'_1 \\ C'_2 \\ C'_3 \\ . \\ C'_n \end{pmatrix}$$

$$|\Psi_1\rangle = C_1|1\rangle + C_2|2\rangle + C_3|3\rangle + \ldots + C_n|n\rangle$$

$$|\Psi_2\rangle = C'_1|1\rangle + C'_2|2\rangle + C'_3|3\rangle + \ldots + C'_n|n\rangle$$

$$|\Psi\rangle(t) = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle + C_3(t)|3\rangle + \ldots + C_n(t)|n\rangle$$

Представление Шредингера

$$|\Psi\rangle(t) = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle + \ldots + C_n(t)|n\rangle$$

Представление Гейзенберга

$$|\Psi\rangle(t) = C_1|1\rangle(t) + C_2|2\rangle(t) + \ldots + C_n|n\rangle(t)$$

Представление Дирака

$$|\Psi\rangle(t) = C_1(t)|1\rangle(t) + C_2(t)|2\rangle(t) + \ldots + C_n(t)|n\rangle(t)$$

Оператор эволюции

$$|\Psi\rangle_{t2} = U_{\Delta t} \cdot |\Psi\rangle_{t1}$$

$$\begin{pmatrix} C'_1 \\ C'_2 \\ C'_3 \\ . \\ C'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & . & U_{1n} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & . & U_{2n} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & . & U_{3n} \\ . & . & . & . & . \\ U_{n1} & U_{n2} & U_{n3} & . & U_{nn} \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ . \\ C_n \end{pmatrix}$$

$$
\begin{tikzcd}
|\Psi\rangle_1 \arrow[r, "\boldsymbol{U}(t_2 - t_1)"] \arrow[rr, bend right, "\boldsymbol{U}(t_3 - t_1)"'] & |\Psi\rangle_2 \arrow[r, "\boldsymbol{U}(t_3 - t_2)"] & |\Psi\rangle_3
\end{tikzcd}
$$

$$\boldsymbol{U}_{32} \cdot \boldsymbol{U}_{21} = \boldsymbol{U}_{31}$$

Операторы эволюции образуют ГРУППУ

$$\boldsymbol{U}_{\Delta t} \rightarrow (\boldsymbol{U}_{\Delta t})^2 \rightarrow (\boldsymbol{U}_{\Delta t})^3 \rightarrow \ldots \rightarrow (\boldsymbol{U}_{\Delta t})^N$$

$$\boldsymbol{U}_{\Delta t} \rightarrow \boldsymbol{U}_{2\Delta t} \rightarrow \boldsymbol{U}_{3\Delta t} \rightarrow \ldots \rightarrow \boldsymbol{U}_{N\Delta t}$$

$\boldsymbol{U}_{dt}$ — **оператор бесконечно-малого сдвига по оси** t **(инфинитезимальный оператор эволюции)**

Матричное представление операторов эволюции

$$\boldsymbol{U}_{\Delta t} = (U_{ij}) \qquad\qquad U_{ij} = f (t)$$

Ряд Тейлора: $\phi(x) = \phi_{(x = 0)} + C_1 \cdot x + C_2 \cdot x^2 + \dots$

$$U_{\Delta t} = U_{\Delta t = 0} + (dU/dt) \cdot \Delta t + (d^2U/dt^2) \cdot \Delta t^2 + \dots$$

(при $\Delta t \to 0$)

$$(U_{dt})_{ij} = (U_o)_{ij} + (dU_{ij}/dt) \cdot dt = (U_o)_{ij} - (\mathrm{i}/\square)H_{ij} \cdot dt$$

$$|\Psi\rangle_2 = U_{\Delta t}\,|\Psi\rangle_1 \xrightarrow{\text{при } \Delta t = 0} |\Psi\rangle_1 = U_o\,|\Psi\rangle_1$$

$$U_o = E \;\Rightarrow\; (U_o)_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j \\ 0 & \text{при } i \neq j \end{cases}$$

$$(U_{dt})_{ij} = \delta_{ij} - (i/\square)H_{ij} \cdot dt$$

$$\begin{pmatrix} C'_1 \\ . \\ C'_i \\ . \\ C'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & . & U_{1n} \\ . & . & . & . & . \\ U_{i1} & U_{i2} & U_{i3} & . & U_{in} \\ . & . & . & . & . \\ U_{n1} & U_{n2} & U_{n3} & . & U_{nn} \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} C_1 \\ . \\ C_i \\ . \\ C_n \end{pmatrix}$$

$$C'_i = \sum U_{ij} \cdot C_j = \sum [\delta_{ij} - (\mathrm{i}/\Box)H_{ij} \cdot dt] \cdot C_j =$$

$$= \sum(\delta_{ij} \cdot C_j) - (\mathrm{i}/\Box) \cdot dt \cdot \sum(H_{ij} \cdot C_j) =$$

$$= C_i - (\mathrm{i}/\Box) \cdot dt \cdot \sum(H_{ij} \cdot C_j)$$

$$C'_i - C_i = dC_i = -(\mathrm{i}/\Box) \cdot dt \cdot \sum(H_{ij} \cdot C_j)$$

$$\boxed{(\mathrm{i}\Box)\,\frac{dC_i}{dt} = \sum(H_{ij} \cdot C_j)}$$

Уравнение Шредингера

$$
i\square\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} c_1 \\ . \\ c_i \\ . \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & . & H_{1n} \\ . & . & . & . & . \\ H_{i1} & H_{i2} & H_{i3} & . & H_{in} \\ . & . & . & . & . \\ H_{n1} & H_{n2} & H_{n3} & . & H_{nn} \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} c_1 \\ . \\ c_i \\ . \\ c_n \end{pmatrix}
$$

$$
i\square\frac{d}{dt}|\Psi\rangle = \mathbf{H}|\Psi\rangle \qquad i\square\frac{d\Psi}{dt} = \mathbf{H}\Psi
$$

$\mathbf{H}$ — оператор Гамильтона (гамильтониан)

Оператор Гамильтона

$$\Psi(t + dt) = \Psi(t) + d\,\Psi = \Psi(t) - (i/\square)[\boldsymbol{H}\,\Psi(t)]dt$$

Спектр оператора Гамильтона

$$\mathbf{H} \Leftrightarrow \left\{ |\,h_1\rangle,\ |\,h_2\rangle,\ \ldots,\ |\,h_n\rangle \right\}$$

$$E_1,\quad E_2,\ \ldots,\quad E_n$$

Уравнение на собственные значения

(«стационарное уравнение Шредингера»)

$$\mathbf{H}|\,h_i\rangle = E_i\,|\,h_i\rangle \qquad \mathbf{H}\Psi = E\,\Psi$$

Стационарные состояния

$$i\hbar\frac{d\Psi}{dt} = \mathbf{H}\Psi$$

$$\mathrm{H}\Psi = E \cdot \Psi$$

$$i\hbar\frac{d\Psi}{dt} = E \cdot \Psi$$

$$\frac{d\Psi}{\Psi} = -\frac{i}{\hbar}E\,dt$$

$$\ln\Psi = -\frac{i}{\hbar}Et + \ln\Psi_o$$

$$\ln \boldsymbol{\Psi} = -\frac{i}{\hbar} Et + \ln \boldsymbol{\Psi}_o$$

$$\ln \boldsymbol{\Psi} - \ln \boldsymbol{\Psi}_o = \ln\left[\frac{\boldsymbol{\Psi}}{\boldsymbol{\Psi}_o}\right] = -\frac{i}{\hbar} Et$$

$$\frac{\boldsymbol{\Psi}}{\boldsymbol{\Psi}_o} = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} Et\right]$$

$$\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{\Psi}_o \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \boldsymbol{\Psi}_o \cdot e^{-i\omega t} \qquad (\omega = E/\hbar)$$

(ω — собственная частота стационарного состояния)

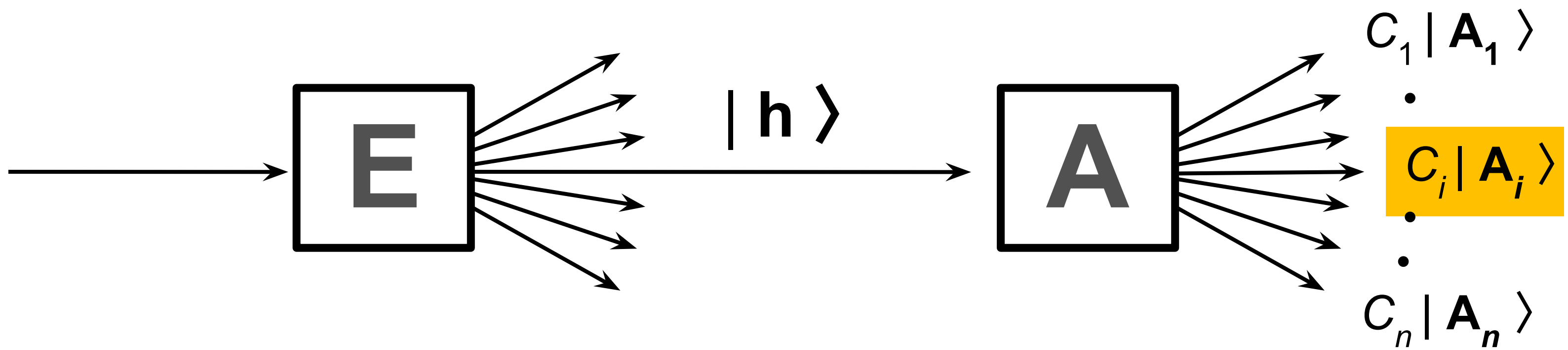
Каждое стационарное состояние $\boldsymbol{\Psi}_i$ характеризуется строго определенной и постоянной энергией $\boldsymbol{E}_i$ и собственной частотой $\boldsymbol{\omega}_i$

Нестационарные (суперпозиционные) состояния

$$\boldsymbol{\Psi}(t) = C_1 \cdot \boldsymbol{\Psi}_1 + \ldots + C_n \cdot \boldsymbol{\Psi}_n =$$

$$= C_1 \cdot (\boldsymbol{\Psi}_1)_o \exp(\mathbf{i}\boldsymbol{\omega}_1 t) + \ldots + C_n \cdot (\boldsymbol{\Psi}_n)_o \exp(\mathbf{i}\boldsymbol{\omega}_n t)$$

«монохроматические»
базисные состояния



$|h\rangle = |h_o\rangle \cdot \bar{e}^{i\omega t}$ **(стационарное состояние)**

$$P_i = |C_i|^2 = C_i^* \cdot C_i = \langle A_i | h \rangle^* \langle A_i | h \rangle =$$

$$= \langle h | A_i \rangle \langle A_i | h \rangle = e^{i\omega t} \cdot \langle h_o | A_i \rangle \langle A_i | h_o \rangle \cdot \bar{e}^{i\omega t} =$$

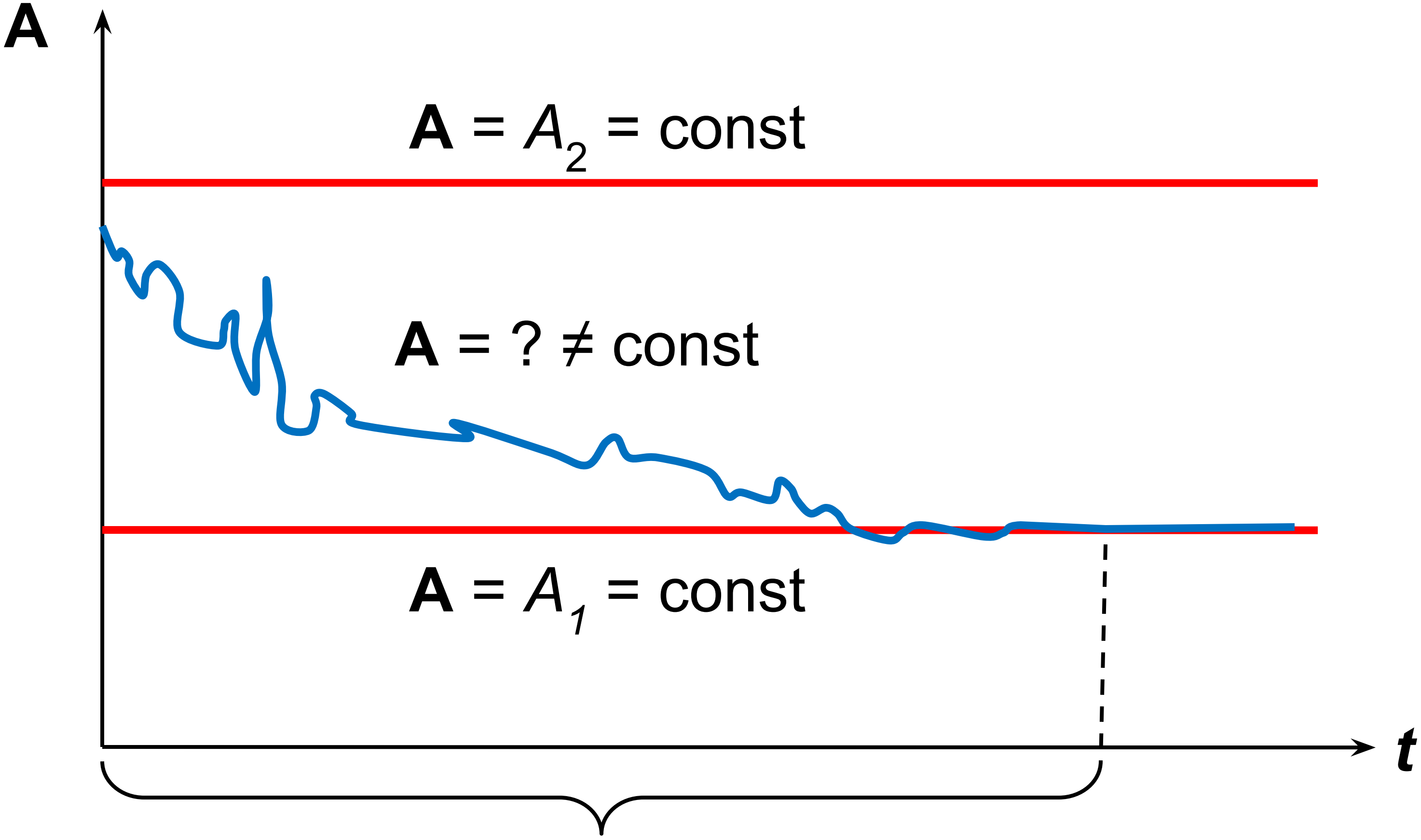
$$= \langle h_o | A_i \rangle \langle A_i | h_o \rangle = \text{const}$$

Когда система находится в одном из стационарных состояний, все ее свойства постоянны (не изменяются со временем)

Выводы

- любая собственная функция (собственный вектор) гамильтониана описывает стационарное состояние,
- стационарное состояние обязательно монохроматическое и имеет строго определенную энергию,
- любые физические свойства системы, находящейся в стационарном состоянии, не изменяются с течением времени,
- если оператор наблюдаемой **A** коммутирует с гамильтонианом $\boldsymbol{H}$ (т.е. $\boldsymbol{AH} - \boldsymbol{HA} = 0$), то величина **A** не только сохраняется постоянной, но и имеет строго определенное числовое значение (т.е. выражается не функцией распределения, а единственным числом).

Нестационарные состояния



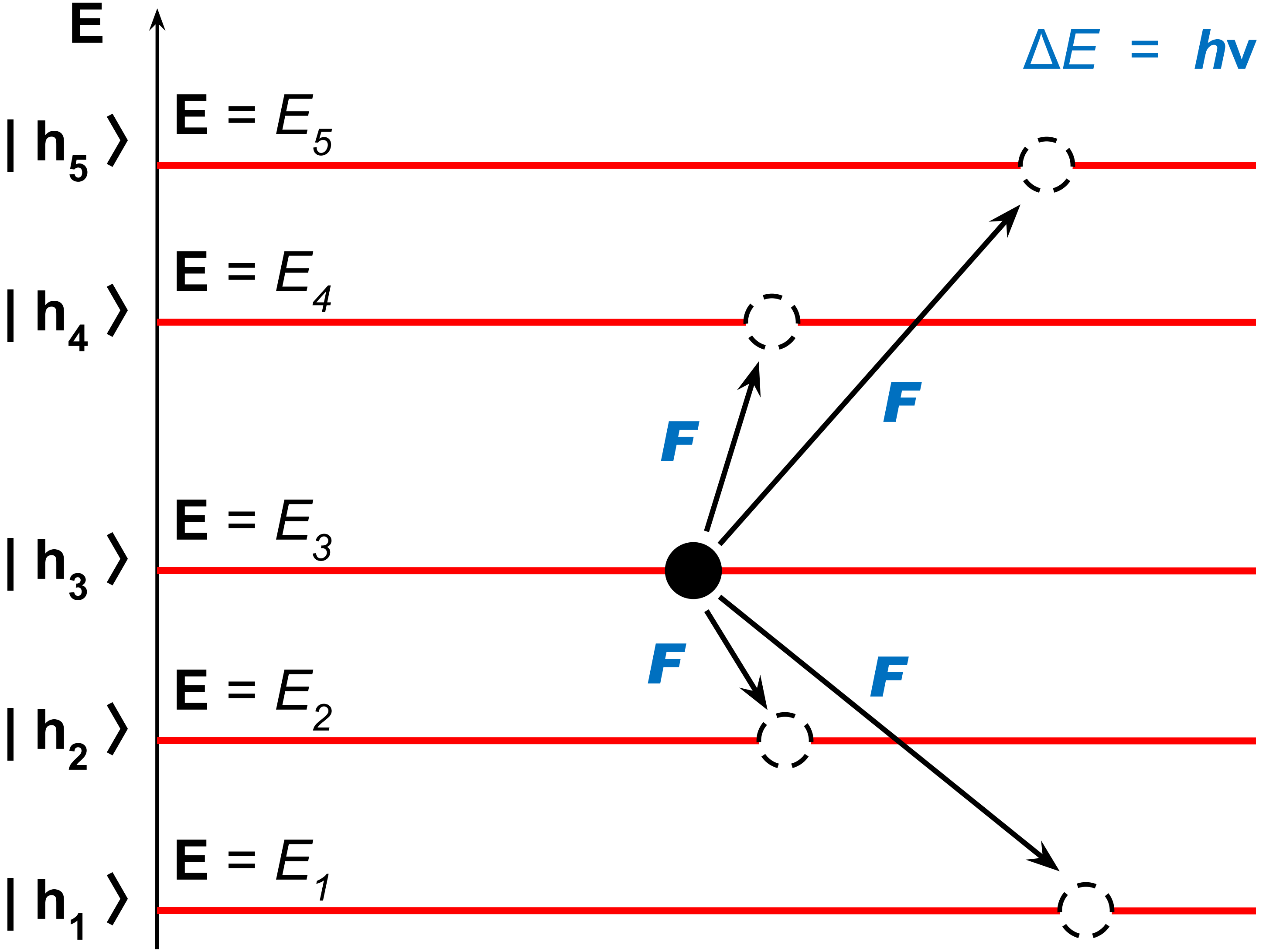
τ ≈ 10^{-8} с

(время релаксации)

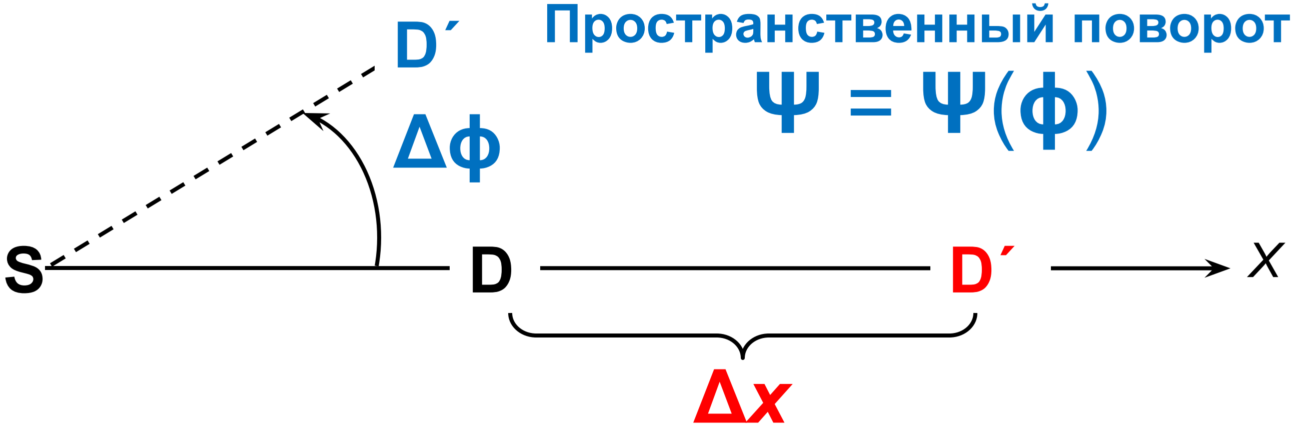
Возмущения стационарных состояний

Энергетический эффект: $\Delta E = E_i - E_j$

$\Delta E = h\nu$



Пространственная зависимость амплитуд



Пространственный поворот

$$\Psi = \Psi(\phi)$$

Пространственный сдвиг

$$\Psi = \Psi(x)$$

Время (t)

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi\rangle = \mathbf{H}|\Psi\rangle$$

Сдвиг (x)

$$i\hbar \frac{d}{dx}|\Psi\rangle = \mathbf{P}_{\mathbf{x}}|\Psi\rangle$$

Поворот (ϕ)

$$i\hbar \frac{d}{d\phi}|\Psi\rangle = \mathbf{L}_{\phi}|\Psi\rangle$$

Операторы проекций вектора импульса:

$$\mathbf{P}_x \quad \mathbf{P}_y \quad \mathbf{P}_z$$

Оператор импульса:

$$\mathbf{P} = (\mathbf{P}_x \quad \mathbf{P}_y \quad \mathbf{P}_z)$$

Оператор квадрата импульса:

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}_x^2 + \mathbf{P}_y^2 + \mathbf{P}_z^2$$

Оператор кинетической энергии (трансляции):

$$\mathrm{T} = (1/2m)\mathbf{P}^2$$

Операторы проекций вектора момента импульса:

$$L_x \quad L_y \quad L_z$$

Оператор момента импульса:

$$L = (L_x \quad L_y \quad L_z)$$

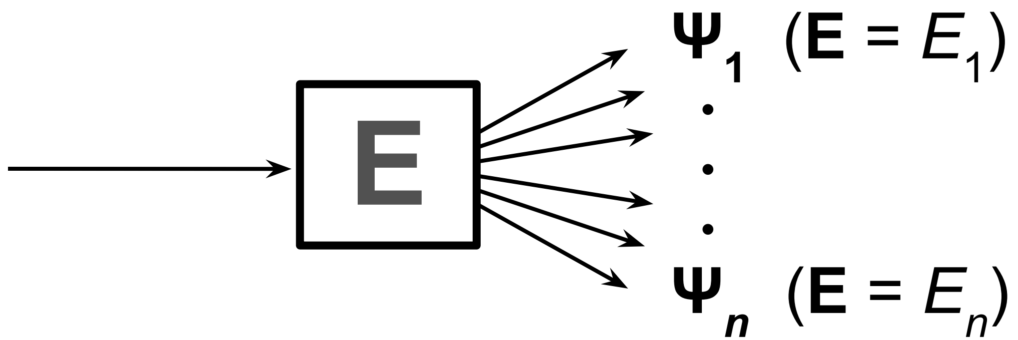
Оператор квадрата момента импульса:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 \quad L_z^2$$

Оператор кинетической энергии (вращения):

$$T = (1/2I)L^2$$

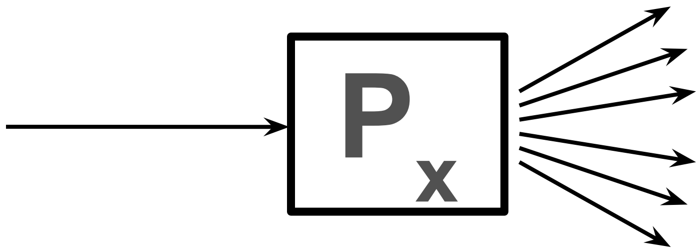
Собственные функции (векторы)



$$\mathbf{H}\Psi = E\,\Psi$$

$$\Psi_i = \Psi_{oi} \cdot e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t} = \Psi_o \cdot e^{-i\omega_i t}$$

($E = \hbar\omega$, где ω — частота)



$\Psi_1 \quad (\mathbf{P}_x = P_{x1})$

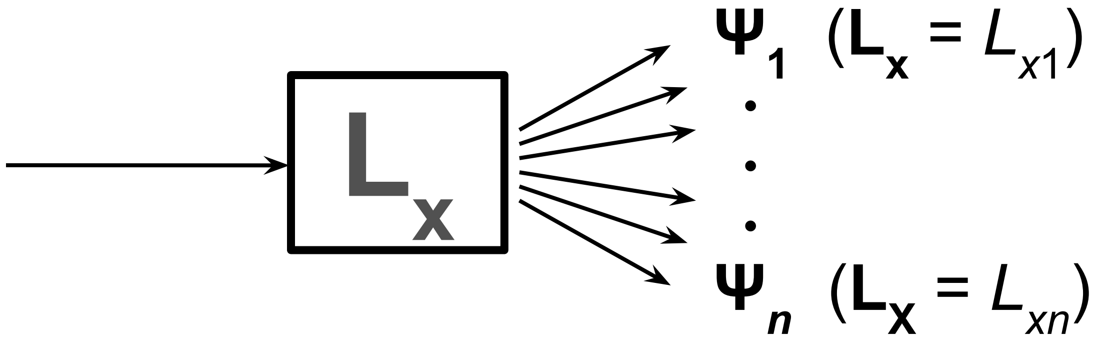
$\vdots$

$\Psi_n \quad (\mathbf{P}_x = P_{xn})$

$$\mathbf{P}_x \Psi = P_x \Psi$$

$$\Psi_i = \Psi_{oi} \cdot e^{-i\frac{P_{xi}}{\hbar}x} = \Psi_o \cdot e^{-ik_i x}$$

$(P_x = \hbar k$, где k — волновой вектор$)$



$$\hat{L}_x \Psi = L_x \Psi$$

$$\Psi_i = \Psi_{oi} \cdot e^{-i \frac{L_{xi}}{\hbar} \phi} = \Psi_o \cdot e^{-i m_i \phi}$$

$(L_x = \hbar m$, где m — вращательное число)