Представления в квантовой механике

11 марта 2017 г.

Picture	Wavefunctions	Operators	Evolution	Density matrix
Schrodinger	$i\frac{d}{dt}\left\|\psi(t)\right\rangle = \hat{H}\left\|\psi(t)\right\rangle$	$\hat{O}(t)$	$i\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}$	$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i[\hat{H}, \hat{\rho}]$
	$\left\|\psi(t)\right\rangle = \hat{U}\left\|\psi_0\right\rangle$		$\hat{U} = \hat{T}\left\{\exp\left(-i\int_{t_0}^{t}\hat{H}(\tau)d\tau\right)\right\}$	$\hat{\rho} = \hat{U}\hat{\rho}_0\hat{U}^\dagger$
Heisenberg	$\left\|\psi^{(H)}\right\rangle = \left\|\psi_0\right\rangle$	$\frac{d\hat{O}^{(H)}(t)}{dt} = i\left[\hat{H}(t), \hat{O}^{(H)}(t)\right]$	n/a	$\hat{\rho}^{(H)} = \hat{\rho}_0$
		$\hat{O}^{(H)}(t) = \hat{U}^\dagger\hat{O}(t)\hat{U}$		
Interaction	$i\frac{d}{dt}\left\|\psi^{(I)}(t)\right\rangle = \hat{V}^{(I)}\left\|\psi^{(I)}(t)\right\rangle$	$\frac{d\hat{O}^{(I)}(t)}{dt} = i\left[\hat{H}_0, \hat{O}^{(I)}\right]$	$i\frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = \hat{V}^{(I)}\hat{S}$	$\frac{d\hat{\rho}^{(I)}}{dt} = -i[\hat{V}^{(I)}, \hat{\rho}^{(I)}]$
	$\left\|\psi^{(I)}(t)\right\rangle = \hat{U}_0^\dagger\left\|\psi(t)\right\rangle = \hat{S}\left\|\psi_0\right\rangle$	$\hat{O}^{(I)}(t) = \hat{U}_0^\dagger\hat{O}(t)\hat{U}_0$	$\hat{S} = \hat{T}\left\{\exp\left(-i\int_{t_0}^{t}\hat{V}^{(I)}(\tau)d\tau\right)\right\}$	$\hat{\rho}^{(I)} = \hat{S}\hat{\rho}_0\hat{S}^\dagger$

Таблица 1: Представления квантовой механики

1 Представление Шрёдингера

В представлении Шрёдингера, волновые функции эволюционируют согласно уравнению Шрёдингера:

$$i\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{H}(t)\left|\psi(t)\right\rangle. \tag{1}$$

В общем виде решение этого уравнения записываются через унитарный оператор эволюции $\hat{U}(t, t_0)$ как

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{U}(t, t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle, \quad \hat{U}(t_0, t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0). \tag{2}$$

Сам оператор эволюции удовлетворяет уравнениям

$$i\frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0), \quad i\frac{\partial \hat{U}(t_0, t)}{\partial t} = -\hat{U}(t_0, t)\hat{H}(t), \tag{3}$$

формальное решение которого можно выразить через так называемую T-упорядоченную экспоненту:

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{k=0}^{\infty}(-i)^k\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{k-1}}dt_k\hat{H}(t_1)\ldots\hat{H}(t_k) \underset{def}{\equiv} \hat{T}\left\{\exp\left(-i\int_{t_0}^{t}\hat{H}(\tau)d\tau\right)\right\} \tag{4}$$

Альтернативно, T-экспоненту можно определить как произведение операторов эволюции на бесконечно малые времена:

$$\hat{U}(t, t_0) = \lim_{N\to\infty}\prod_{k=1}^{N}e^{-i\hat{H}(t_k)(t_k - t_{k-1})}, \quad t_N = t, \quad t_0 = t_0 \tag{5}$$

(если в разные моменты времени гамильтониан коммутирует сам с собой $[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] = 0$, то T-экспонента превращается в обычную экспоненту). Символ T-упорядочения упорядочивает операторы так, чтобы слева стояли операторы с большим временем. Матрица плотности ведёт себя так же как произведение волновых функций:

$$\hat{\rho}(t) = \left|\psi(t)\right\rangle\left\langle\psi(t)\right| = \hat{U}(t, t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle\left\langle\psi(t_0)\right|\hat{U}(t_0, t) \equiv \hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}(t_0, t), \quad \frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right] \tag{6}$$

Ну и, наконец, матричные элементы операторов в представлении Шрёдингера определяется согласно выражению:

$$O_{mn}(t) = \left\langle\psi_m(t)\left|\hat{O}(t)\right|\psi_n(t)\right\rangle \equiv \left\langle\psi_m(t_0)\left|\hat{U}(t_0, t)\hat{O}(t)\hat{U}(t, t_0)\right|\psi_n(t_0)\right\rangle \tag{7}$$

2 Представление Гейзенберга

В конечном итоге, наблюдаются именно матричные элементы операторов — именно эти объекты не должны зависеть от представления, в котором мы работаем (Шрёдингера, Гейзенберга, взаимодействия). Поэтому, если мы определим волновые функции в представлении Гейзенберга согласно $\left|\psi^{(H)}\right\rangle \underset{def}{\equiv} |\psi(t_0)\rangle$ (а значит, аналогично можно поступить и с матрицей плотности $\hat{\rho}^{(H)} \equiv \hat{\rho}(t_0)$) и положим их независящими от времени, а операторы мы определим согласно

$$\hat{O}^{(H)}(t) \underset{def}{\equiv} \hat{U}(t_0,t)\hat{O}(t)\hat{U}(t,t_0) \tag{8}$$

то матричные элементы можно считать согласно $O_{mn}(t) \equiv \left\langle \psi_m^{(H)} \left| \hat{O}^{(H)}(t) \right| \psi_n^{(H)} \right\rangle$. Будучи так определёнными, операторы подчиняются следующему уравнению движения (уравнению Гейзенберга):

$$\frac{d\hat{O}^{(H)}(t)}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{O}}{\partial t}\right)^{(H)} + i\left[\hat{H}(t), \hat{O}^{(H)}(t)\right] \tag{9}$$

Наконец, в представлении Гейзенберга также оказываются осмыленными разновременные корреляционные функции, например:

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{O}_1(t_1)\dots\hat{O}_N(t_N)\right\rangle \underset{def}{\equiv} \left\langle \psi^{(H)} \right| \hat{O}_1^{(H)}(t_1)\dots\hat{O}_N^{(H)}(t_N) \left|\psi^{(H)}\right\rangle \equiv \\ = \langle\psi(t_0)|\, \hat{U}(t_0,t_1)\hat{O}_1(t_1) \underbrace{\hat{U}(t_1,t_2)}_{\hat{U}(t_1,t_0)\hat{U}(t_0,t_2)} \hat{O}_2(t_2)\dots\hat{O}_N(t_N)\hat{U}(t_N,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle\end{aligned} \tag{10}$$

Последняя формула показывает, как определяются разновременные корреляторы в представлении Шрёдингера.

3 Представление взаимодействия

Представление взаимодействия прекрасно подходит для построения теории возмущений. Для его построения мы разбиваем гамильтониан на две части $\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{V}(t)$ — на “невозмущённый” гамильтониан $\hat{H}_0$, про который мы предположительно знаем всё, и на $\hat{V}$ — предположительно малое возмущение. В таком случае оказывается удобным комбинировать два подхода: рассматривать эволюцию операторов с гамильтонианом $\hat{H}_0$; а оставшуюся эволюцию “перекинуть” на волновые функции. Следуя этой логике, мы вводим операторы в представлении взаимодействия:

$$\hat{O}^{(I)}(t) \underset{def}{\equiv} \hat{U}_0(t_0,t)\hat{O}(t)\hat{U}_0(t,t_0) \tag{11}$$

(где $\hat{U}_0$ — оператор эволюции относительно гамильтониана $\hat{H}_0$). Будучи так определёнными, они удовлетворяют уравнению движения:

$$\frac{d\hat{O}^{(I)}(t)}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{O}}{\partial t}\right)^{(I)} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{O}^{(I)}(t), \hat{H}_0(t)\right] \tag{12}$$

Теперь выясним, как будут эволюционировать волновые функции, исходя из соображения, что матричный элемент — величина инвариантная в разных представлениях:

$$O_{nm}(t) = \left\langle \psi_n(t) \left| \hat{O}(t) \right| \psi_m(t) \right\rangle \equiv \underbrace{\langle\psi_n(t)|\, \hat{U}_0(t,t_0)}_{\left\langle \psi_n^{(I)}(t)\right|} \underbrace{\hat{U}_0(t_0,t)\hat{O}(t)\hat{U}_0(t,t_0)}_{\hat{O}^{(I)}(t)} \underbrace{\hat{U}_0(t_0,t)\,|\psi_m(t)\rangle}_{\left|\psi_m^{(I)}(t)\right\rangle}. \tag{13}$$

где мы определили волновые функции в представлении взаимодействия согласно

$$\left|\psi^{(I)}(t)\right\rangle \underset{def}{\equiv} \hat{U}_0(t_0,t)\,|\psi(t)\rangle = \hat{U}_0(t_0,t)\hat{U}(t,t_0)\left|\psi^{(H)}\right\rangle. \tag{14}$$

Наконец, тут удобно ввести оператор эволюции в представлении взаимодействия согласно $\hat{S}(t,t_0) \underset{def}{\equiv} \hat{U}_0(t_0,t)\hat{U}(t,t_0)$. Этот оператор эволюции удовлетворяет уравнению движения:

$$i\frac{\partial \hat{S}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{V}^{(I)}(t)\hat{S}(t,t_0) \Rightarrow \hat{S}(t,t_0) \equiv \hat{T}\left\{\exp\left(-i\int_{t_0}^{t} \hat{V}^{(I)}(\tau)d\tau\right)\right\} \tag{15}$$

(что эквивалентно утверждению о том, что волновые функции эволюционируют согласно модифицированному уравнению Шрёдингера $i\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi^{(I)}(t)\right\rangle = \hat{V}^{(I)}(t)\left|\psi^{(I)}(t)\right\rangle$). Также можно обойтись и с матрицей плотности в представлении взаимодействия:

$$\hat{\rho}^{(I)}(t) = \left|\psi^{(I)}(t)\right\rangle\left\langle\psi^{(I)}(t)\right| = \hat{S}(t,t_0)\hat{\rho}^{(H)}\hat{S}(t_0,t) = \hat{U}_0(t_0,t)\hat{\rho}(t)\hat{U}_0(t,t_0), \quad \frac{d\hat{\rho}^{(I)}}{dt} = -i\left[\hat{V}^{(I)},\hat{\rho}^{(I)}\right] \tag{16}$$

Для того, чтобы понять, как устроены разновременные корреляторы, удобно заметить, что операторы в представлении взаимодействия и Гейзенберга связаны следующим соотношением: $\hat{O}^{(H)} = \hat{S}(t_0,t)\hat{O}^{(I)}(t)\hat{S}(t,t_0)$. Поэтому:

$$\left\langle\hat{O}_1(t_1)\ldots\hat{O}_N(t_N)\right\rangle \underset{def}{\equiv} \left\langle\psi^{(H)}\right|\hat{O}_1^{(H)}(t_1)\ldots\hat{O}_N^{(H)}(t_N)\left|\psi^{(H)}\right\rangle \equiv \left\langle\psi^{(H)}\right|\hat{S}(t_0,t_1)\hat{O}_1^{(I)}(t_1)\hat{S}(t_1,t_2)\ldots\hat{O}_N^{(I)}(t_N)\hat{S}(t_N,t_1)\left|\psi^{(H)}\right\rangle$$