1 Гармонический осциллятор

1.1 Нет усреднения

Рассмотрим динамику Гауссовых волновых пакетов в гармоническом потенциале:

$$|\Psi\rangle = \sum_k D_k |g_k\rangle$$

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,\ \dot{q}_k = \frac{p_k}{m},\ \dot{p}_k = -\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{q_k} = -m\omega^2 q_k$$

$$\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar}\mathbb{S}^{-1}(\mathbb{H} - i\hbar\tau)\vec{D}$$

Для удобства проведем замену переменных:

$$g_k = N\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}m\omega(x-q_k)^2 + ip_k x\right)\right) = \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}m\omega x^2 + \xi_k x + \eta_k\right)\right)$$

$$\xi_k = m\omega q_k + ip_k,\ \eta_k = \hbar\ln N - \frac{1}{2}m\omega q_k^2$$

$$\dot{\xi}_k = m\omega\dot{q}_k + i\dot{p}_k = \omega p_k - im\omega^2 q_k = -\omega(im\omega q_k - p_k) = -i\omega(m\omega q_k + ip_k) = -i\omega\xi_k$$

$$\dot{\eta}_k = -m\omega q_k\dot{q}_k = -\omega q_k p_k$$

Получим явный вид некоторых матричных элементов:

1. элементы матрицы перекрывания:

$$\mathbb{S}_{mk} = \langle g_m|g_k\rangle = \int \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k\right)\right)dx =$$

$$= \int \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega\left[x - \frac{\xi_m^*+\xi_k}{2m\omega}\right]^2 + \frac{(\xi_m^*+\xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k\right)\right)dx =$$

$$= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(\frac{(\xi_m^*+\xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k\right)\right)\int \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}y^2\right)dy =$$

$$= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(\frac{(\xi_m^*+\xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k\right)\right)\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}$$

$$\mathbb{S}_{kk} = N^2\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} = 1 \ \Rightarrow\ N = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

2. элементы матрицы M_1 — первых моментов:

$$\langle g_m |x| g_k\rangle = \int x \cdot \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k\right)\right) dx =$$

$$= \hbar \int \frac{\partial}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)} \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k\right)\right) dx$$

$$= \hbar \frac{\partial \mathbb{S}_{mk}}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)} = \frac{(\xi_m^* + \xi_k)}{2m\omega}\mathbb{S}_{mk}$$

3. элементы матрицы M_2 — вторых моментов:

$$\left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle = \int x^2 \cdot \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k\right)\right) dx =$$

$$= \hbar^2 \frac{\partial^2 \mathbb{S}_{mk}}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)^2} = \frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega}\right)^2$$

4. элементы матрицы τ:

$$\tau_{mk} = \langle g_m | \dot{g}_k\rangle = \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(\dot{\eta}_k + \dot{\xi}_k \frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega}\right) = \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega q_k p_k - i\omega\xi_k \frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega q_k p_k - \frac{i\xi_k^2}{2m} - \frac{i\xi_m^*\xi_k}{2m}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega q_k p_k - \frac{i}{2m}(m^2\omega^2 q_k^2 - p_k^2 + 2im\omega q_k p_k) - \frac{i\xi_m^*\xi_k}{2m}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(iL_k - \frac{i\xi_m^*\xi_k}{2m}\right)$$

5. элементы матрицы Гамильтониана:

$$\mathbb{H}_{mk} = \left\langle g_m \left|\hat{T}\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\langle g_m \left|\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\langle g_m \left|\frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial x}(-m\omega x + \xi_k)\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\langle g_m | g_k\rangle - \frac{1}{2m}\left\langle g_m \left|(-m\omega x + \xi_k)^2\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= \left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m}\right)\langle g_m | g_k\rangle + \omega\xi_k \langle g_m |x| g_k\rangle - \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= \left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m}\right) + \omega\xi_k \frac{(\xi_m^* + \xi_k)}{2m\omega}\right)\langle g_m | g_k\rangle = \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\xi_m^*\xi_k}{2m}\right)\langle g_m | g_k\rangle$$

Теперь соберем все это в выражение для $\dot{\vec{D}}$

$$\mathbb{H}_{mk} - i\hbar\tau_{mk} = \mathbb{S}_{mk}\left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_k\right) \in \mathbb{R}$$

$$\dot{D}_n = -\frac{i}{\hbar}\sum_{m,k}\mathbb{S}^{-1}_{nm}\mathbb{S}_{mk}\left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_k\right)D_k = -\frac{i}{\hbar}\sum_k\left(\sum_m \mathbb{S}^{-1}_{nm}\mathbb{S}_{mk}\right)\left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_k\right)D_k$$

$$\dot{D}_n = -\frac{i}{\hbar}\sum_k\left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_k\right)\delta_{nk}D_k = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_n\right)D_n$$

$$L_n = \frac{p_n^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q_n^2$$

Таким образом получили следующий результат: в гармоническом осцилляторе задача факторизуется не только на уровне расчета траекторий, но и на стадии расчета коэффициента. Для расчета n-го коэффициента нужны только q_n и p_n.

При расчете коэффициентов возникает функция Лагранжа n-го волнового пакета. Рассмотрим среднее значение функции Лагранжа:

$$L = \vec{D}^\dagger\left(\mathbb{T} - \mathbb{V}\right)\vec{D} = \sum_{m,k} D^*_m D_k\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left\langle g_m\left|\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right|g_k\right\rangle - \frac{1}{2}m\omega^2\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle\right) =$$

$$= \sum_{m,k} D^*_m D_k\left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m}\right)\mathbb{S}_{mk} + \omega\xi_k\left\langle g_m\left|x\right|g_k\right\rangle - \right.$$

$$\left. -\frac{1}{2}m\omega^2\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle - \frac{1}{2}m\omega^2\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle\right)$$

$$= \sum_{m,k} D^*_m D_k\left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m}\right)\mathbb{S}_{mk} + \omega\xi_k\left\langle g_m\left|x\right|g_k\right\rangle - m\omega^2\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle\right) =$$

$$= \sum_{m,k} D^*_m D_k\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m} + \frac{\omega\xi_k(\xi^*_m + \xi_k)}{2m\omega} - m\omega^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{\xi^*_m + \xi_k}{2m\omega}\right)^2\right)\right)\mathbb{S}_{mk}$$

$$= \sum_{m,k} D^*_m D_k \mathbb{S}_{mk}\left(\frac{2\xi_k\xi^*_m - (\xi^*_m + \xi_k)^2}{4m}\right) = -\sum_{m,k} D^*_m D_k \mathbb{S}_{mk}\frac{(\xi^*_m)^2 + \xi_k^2}{4m} =$$

$$= -\frac{1}{4m}\left(\sum_{m,k} D^*_m D_k \mathbb{S}_{mk}\xi_k^2 + \sum_{m,k} D^*_m D_k \mathbb{S}_{mk}(\xi_m^2)^*\right) =$$

$$= -\frac{1}{4m}\left(\sum_{m,k} D^*_m D_k \mathbb{S}_{mk}\xi_k^2 + \sum_{m,k}(D_m D^*_k \mathbb{S}_{km}\xi_m^2)^*\right) =$$

$$= -\frac{1}{2m}\sum_{m,k} Re(D_m^* D_k \$_{mk}\xi_k^2) = -\frac{1}{2m}\sum_{m,k}\left(m^2\omega^2 q_k^2 - p_k^2\right) Re(D_m^* \$_{mk} D_k) =$$

$$= \sum_{m,k}\left(\frac{p_k^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q_k^2\right) Re(D_m^* \$_{mk} D_k) =$$

$$= \sum_{m,k} L_k Re\left(D_m^*(0) D_k(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t (L_m - L_k)\, dt'\right)\$_{mk}\right) =$$

$$= \sum_{m,k} L_k \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^t (L_m - L_k)\, dt'\right) Re(D_m^*(0)\$_{mk} D_k(0))$$

Поскольку задача факторизовалась полностью, найдем явный вид зависимости коэффициента D от времени:

$$D(t) = D(0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right)\, dt\right)$$

$$\begin{cases} \dot{q} = p/m \\ \dot{p} = -m\omega^2 q \end{cases}$$

$$\ddot{q} = \frac{\dot{p}}{m} = -\omega^2 q$$

$$q(t) = A_1 e^{i\omega t} + A_2 e^{-i\omega t}$$

$$\begin{cases} q(0) = A_1 + A_2 \\ \dot{q}(0) = p(0)/m = i\omega(A_1 - A_2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 = \frac{1}{2}\left(q(0) - \frac{ip(0)}{m\omega}\right) \\ A_2 = \frac{1}{2}\left(q(0) + \frac{ip(0)}{m\omega}\right) \end{cases}$$

$$q(t) = \frac{1}{2}\left(\left(q(0) - \frac{ip(0)}{m\omega}\right)e^{i\omega t} + \left(q(0) + \frac{ip(0)}{m\omega}\right)e^{-i\omega t}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(q(0)\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) - \frac{ip(0)}{m\omega}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right)\right) =$$

$$= q(0)\cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega}\sin(\omega t)$$

$$p(t) = m\dot{q}(t) = -m\omega q(0)\sin(\omega t) + p(0)\cos(\omega t)$$

$$\int_0^t \frac{p(t')^2}{2m}\, dt' = \frac{1}{2m}\left(p(0)^2\int_0^t \cos^2(\omega t')\, dt' + m^2\omega^2 q(0)^2\int_0^t \sin^2(\omega t')\, dt' - \right.$$

$$\left. - m\omega q(0)p(0)\int_0^t 2\sin(\omega t)\cos(\omega t')\, dt'\right) =$$

$$= \frac{p(0)^2}{4m}\int_0^t (1+\cos(2\omega t'))\,dt' + \frac{m\omega^2 q(0)^2}{4}\int_0^t (1-\cos(2\omega t'))\,dt' -$$

$$-q(0)p(0)\int_0^t \sin(\omega t')\,d\sin(\omega t') =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{p(0)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right)t + \frac{1}{4\omega}\left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right)\sin(2\omega t) -$$

$$-\frac{q(0)p(0)}{2}\sin^2(\omega t)$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2\int_0^t q(t')^2\,dt' = \frac{1}{2}m\omega^2\left(q(0)^2\int_0^t \cos^2(\omega t')\,dt' + \frac{p(0)^2}{m^2\omega^2}\int_0^t \sin^2(\omega t')\,dt' +\right.$$

$$\left.+\frac{q(0)p(0)}{m\omega}\int_0^t 2\sin(\omega t')\cos(\omega t')\,dt'\right) =$$

$$= \frac{1}{4}m\omega^2 q(0)^2\int_0^t (1+\cos(2\omega t'))\,dt' + \frac{p(0)^2}{4m}\int_0^t (1-\cos(2\omega t'))\,dt' +$$

$$+q(0)p(0)\int_0^t \sin(\omega t')\,d\sin(\omega t') =$$

$$= \frac{t}{2}\left(\frac{p(0)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right) - \frac{1}{4\omega}\left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right)\sin(2\omega t) +$$

$$+\frac{q(0)p(0)}{2}\sin^2(\omega t)$$

$$\int_0^t \left(\frac{p(t')^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q(t')^2\right)dt' = \left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right)\frac{\sin(2\omega t)}{2\omega} - q(0)p(0)\sin^2(\omega t)$$

$$D(t) = D(0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar\omega t}{2} + L(0)\frac{\sin(2\omega t)}{2\omega} - q(0)p(0)\sin^2(\omega t)\right)\right) \qquad (1)$$

Проверим, что при данном способе задания динамики сохраняется норма:

$$\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar}\mathbb{S}^{-1}(\mathbb{H} - i\hbar\tau)\vec{D}$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \vec{D}^\dagger\mathbb{S}\vec{D},\ \frac{d}{dt}\langle\Psi|\Psi\rangle = 2Re(\vec{D}^\dagger\mathbb{S}\dot{\vec{D}}) + \vec{D}^\dagger\dot{\mathbb{S}}\vec{D}$$

$$\vec{D}^\dagger\mathbb{S}\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar}\vec{D}^\dagger\mathbb{S}\mathbb{S}^{-1}(\mathbb{H} - i\hbar\tau)\vec{D} = -\frac{i}{\hbar}\vec{D}^\dagger(\mathbb{H} - i\hbar\tau)\vec{D}$$

$$\dot{\vec{D}}^\dagger\mathbb{S}\vec{D} + \vec{D}^\dagger\mathbb{S}\dot{\vec{D}} = \frac{i}{\hbar}\vec{D}^\dagger\left(\mathbb{H} + i\hbar\tau^\dagger - \mathbb{H} + i\hbar\tau\right)\vec{D} = -\vec{D}^\dagger\left(\tau^\dagger + \tau\right)\vec{D} = -\vec{D}^\dagger\dot{\mathbb{S}}\vec{D}$$

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\Psi\rangle = -\vec{D}^\dagger\dot{\mathbb{S}}\vec{D} + \vec{D}\dot{\mathbb{S}}\vec{D} = 0$$

Базис — три волновых пакета: $\{q_k\}_{k=1}^{3} = \{0, \pm 0.2\}$, $\langle p \rangle = \sqrt{2}$. Частота потенциала = частоте пакета = 1

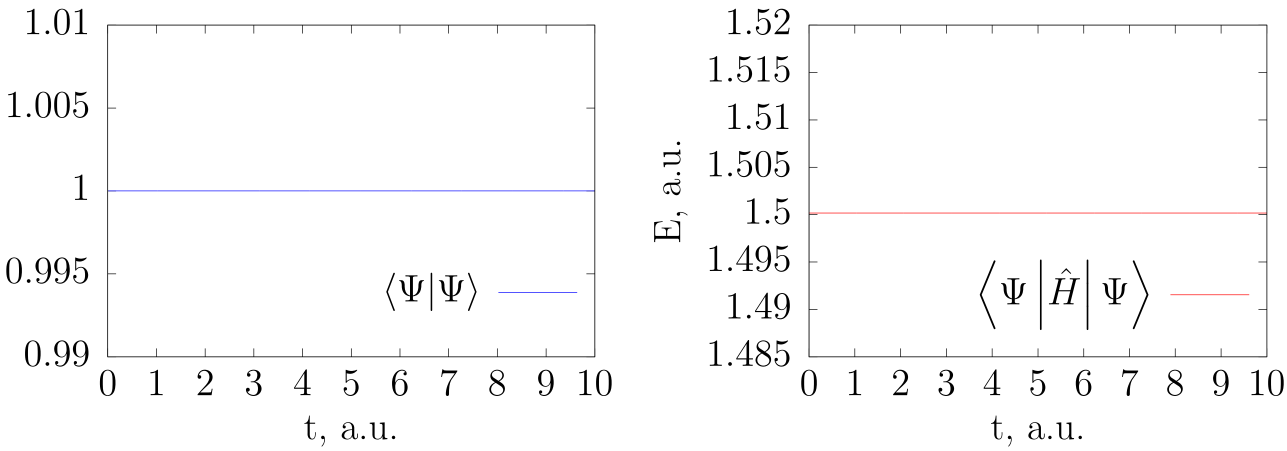

Рис. 1: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

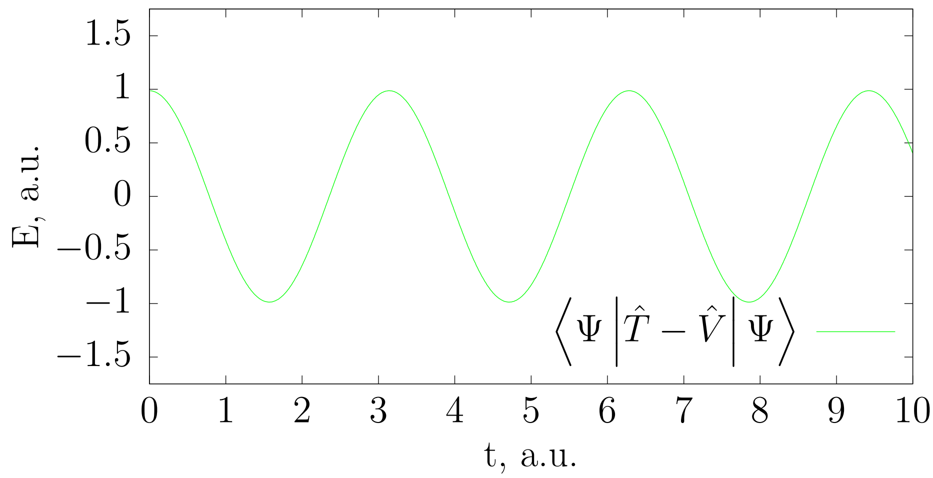

Рис. 2: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

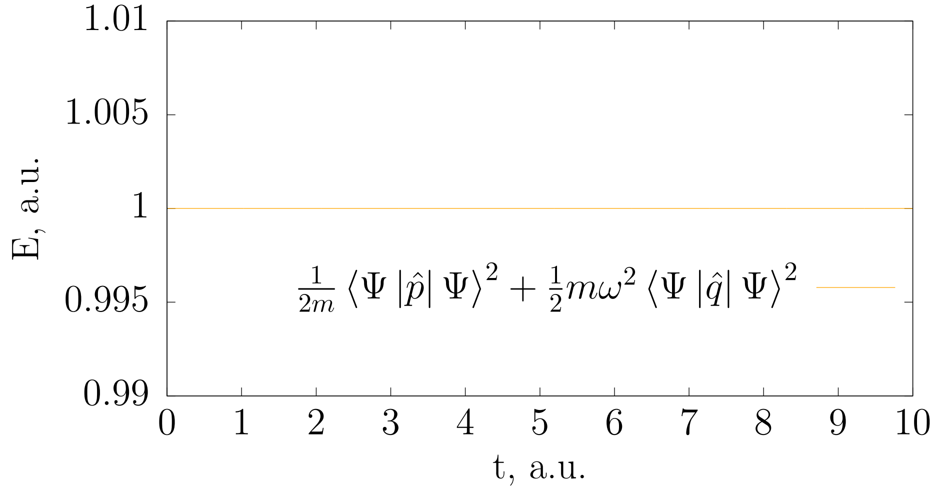

Рис. 3: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

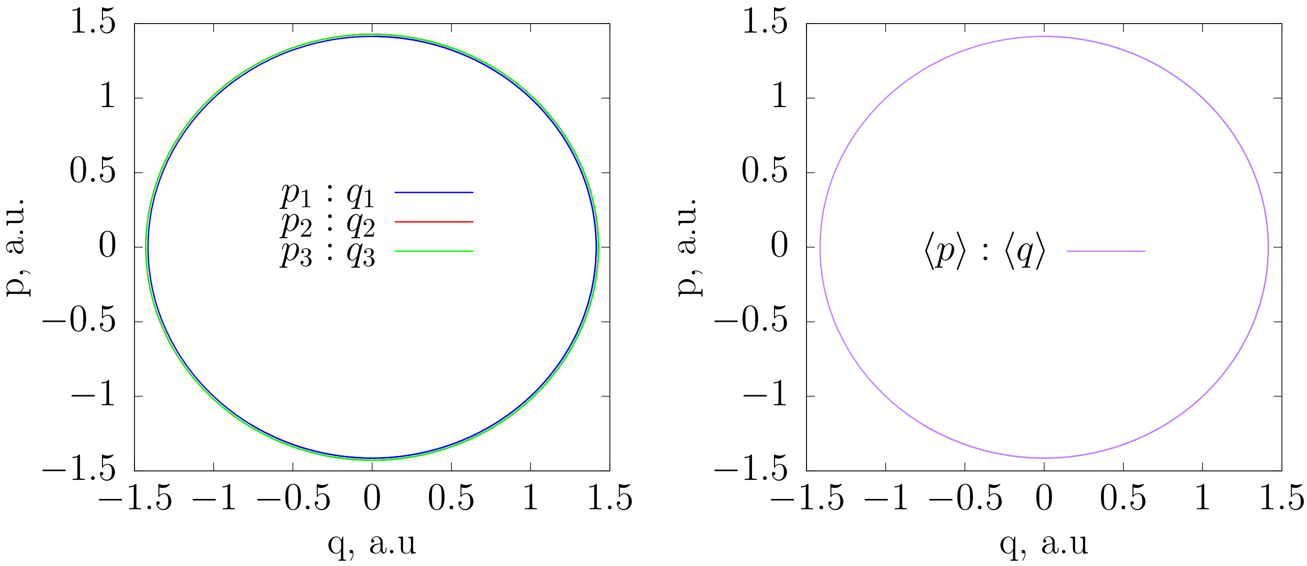

Рис. 4: Фазовый портрет базисных функций

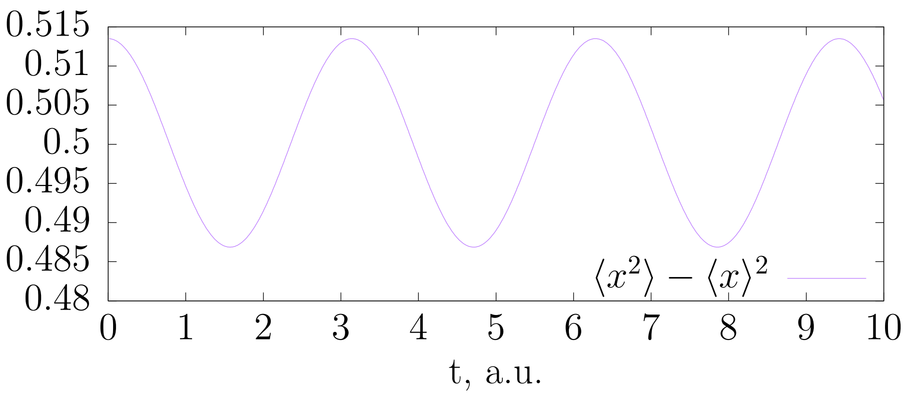

Рис. 5: Зависимость дисперсии ВФ от времени

1.2 Усреднение импульса — полное усреднение градиента

Пускай все волновые пакеты движутся с одинаковым импульсом, изменение которого расчитывается в центре функции $|\Psi\rangle$

$$|g_k\rangle = N\mathrm{exp}\left(\frac{1}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}m\omega(x-q_k)^2 + i\langle p\rangle x\right)\right) = \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}m\omega x^2 + \xi_k x + \eta_k\right)\right)$$

$$\xi_k = m\omega q_k + i\langle p\rangle, \eta_k = \hbar\ln N - \frac{1}{2}m\omega q_k^2$$

$$\dot{\xi}_k = m\omega\dot{q}_k + i\langle\dot{p}\rangle = \omega\langle p\rangle - i\left\langle\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

$$\left\langle\frac{dV}{dx}\right\rangle = m\omega^2\langle x\rangle = \sum_{m,k} D_m^* D_k \langle g_m|x|g_k\rangle = \sum_{m,k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk}\frac{q_m+q_k}{2}$$

$$\dot{\eta}_k = -m\omega q_k\dot{q}_k = -\omega q_k\langle p\rangle$$

Матричные элементы примут вид:

1. матрица перекрывания:

$$\mathbb{S}_{mk} = \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}\mathrm{exp}\left(\frac{1}{\hbar}\left(\frac{(m\omega q_k + m\omega q_m)^2}{4m\omega} + 2\hbar\ln N - \frac{1}{2}m\omega(q_k^2+q_m^2)\right)\right) =$$

$$= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(\frac{1}{4}m\omega(q_m+q_k)^2 - \frac{1}{2}m\omega(q_m^2+q_k^2)\right)\right) =$$

$$= \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}(q_m-q_k)^2\right)$$

2. матрица первых моментов:

$$\langle g_m|x|g_k\rangle = \frac{q_m+q_k}{2}\mathbb{S}_{mk}$$

3. матрица вторых моментов:

$$\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{q_m+q_k}{2}\right)^2\right)\mathbb{S}_{mk}$$

4. матрица τ:

$$\tau_{mk} = \langle g_m|\dot{g}_k\rangle = \frac{1}{\hbar}\left(\dot{\eta}_k + \dot{\xi}_k\frac{(q_k+q_m)}{2}\right)\mathbb{S}_{mk} =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\left(-\omega q_k\langle p\rangle + \frac{1}{2}(\omega\langle p\rangle - im\omega^2\langle x\rangle)(q_m+q_k)\right)\mathbb{S}_{mk} =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\left(\frac{1}{2}\omega\langle p\rangle(q_m-q_k) - \frac{i}{2}m\omega^2\langle x\rangle(q_m+q_k)\right)\mathbb{S}_{mk}$$

5. матрица оператора Гамильтона:

$$\mathbb{H}_{mk} = \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{(m\omega q_m - i\langle p\rangle)(m\omega q_k + i\langle p\rangle)}{2m}\right)\mathbb{S}_{mk} =$$

$$= \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q_m q_k + \frac{\langle p\rangle^2}{2m} + \frac{i}{2}\omega\langle p\rangle(q_m - q_k)\right)\mathbb{S}_{mk}$$

Соберем матричные элементы:

$$\mathbb{H}_{mk} - i\hbar\tau_{mk} = \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2(q_m q_k - \langle x\rangle(q_m + q_k)) + \frac{\langle p\rangle^2}{2m}\right)\mathbb{S}_{mk}$$

Таким образом, матрица $\mathbb{H} - i\hbar\tau$ действительна.

$$\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar}\mathbb{S}^{-1}(\mathbb{H} - i\hbar\tau)\vec{D}$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \vec{D}^\dagger\mathbb{S}\vec{D},\ \frac{d}{dt}\langle\Psi|\Psi\rangle = 2Re(\vec{D}^\dagger\mathbb{S}\dot{\vec{D}}) + \vec{D}^\dagger\dot{\mathbb{S}}\vec{D}$$

$$\vec{D}^\dagger\mathbb{S}\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar}\vec{D}^\dagger\mathbb{S}\mathbb{S}^{-1}(\mathbb{H} - i\hbar\tau)\vec{D} = -\frac{i}{\hbar}\vec{D}^\dagger(\mathbb{H} - i\hbar\tau)\vec{D}$$

$$\dot{\vec{D}}^\dagger\mathbb{S}\vec{D} + \vec{D}^\dagger\mathbb{S}\dot{\vec{D}} = \frac{i}{\hbar}\vec{D}^\dagger\left(\mathbb{H} + i\hbar\tau^\dagger - \mathbb{H} + i\hbar\tau\right)\vec{D} = -\vec{D}^\dagger\left(\tau^\dagger + \tau\right)\vec{D} = -\vec{D}^\dagger\dot{\mathbb{S}}\vec{D}$$

$$\dot{\mathbb{S}}_{mk} = \langle\dot{g}_m|g_k\rangle + \langle g_m|\dot{g}_k\rangle =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(\dot{\eta}_m^* + \dot{\eta}_k + \frac{1}{2}(\dot{\xi}_m^* + \dot{\xi}_k)(q_m + q_k)\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega\langle p\rangle(q_m + q_k) + \omega\langle p\rangle(q_m + q_k)\right) = 0$$

Тогда $\frac{d}{dt}\langle\Psi|\Psi\rangle = 0$

Базис — три волновых пакета: $\{q_k\}_{k=1}^3 = \{0, \pm 0.2\}$, $\langle p\rangle = \sqrt{2}$. Частота потенциала = частоте пакета = 1

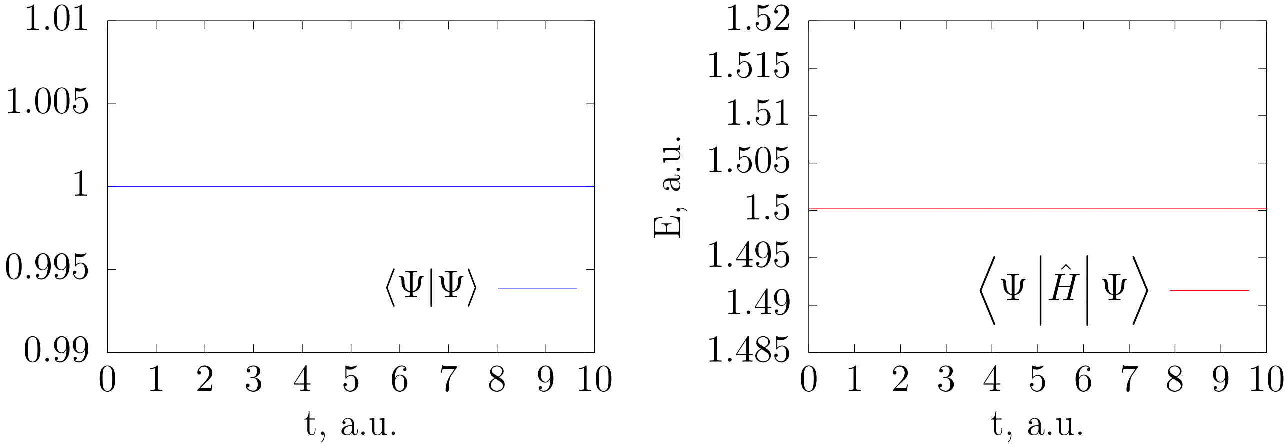

Рис. 6: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

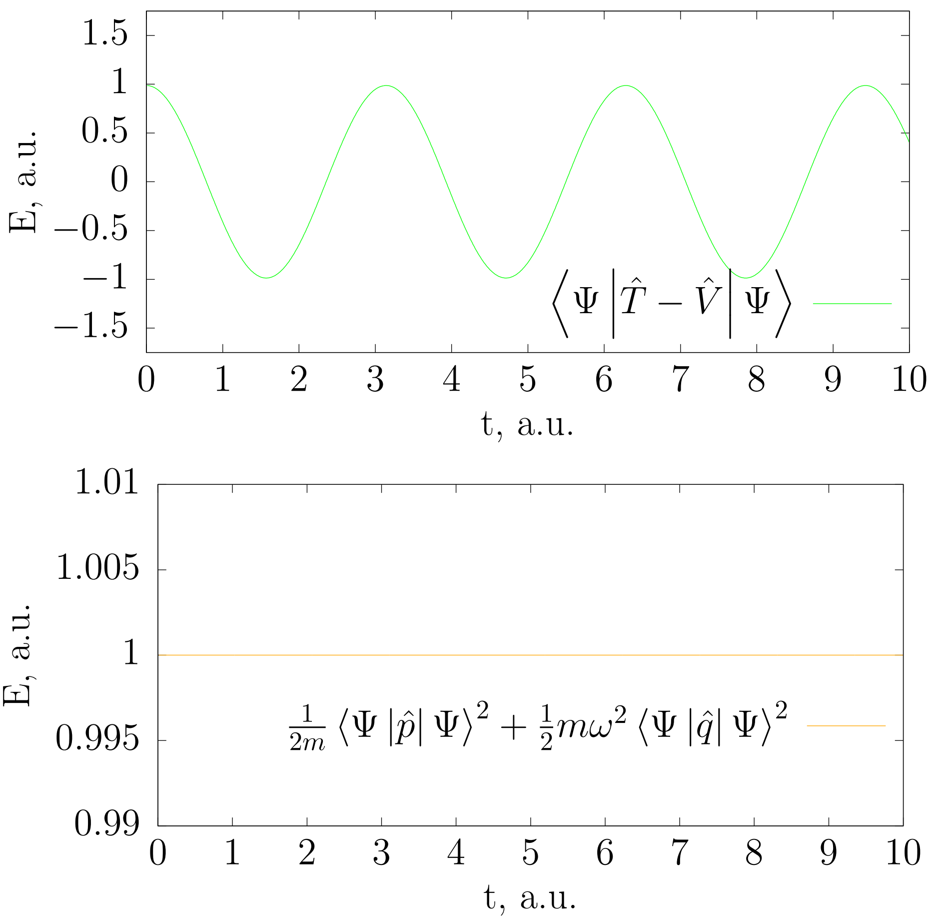

Рис. 7: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа и классической энергии полной ВФ от времени

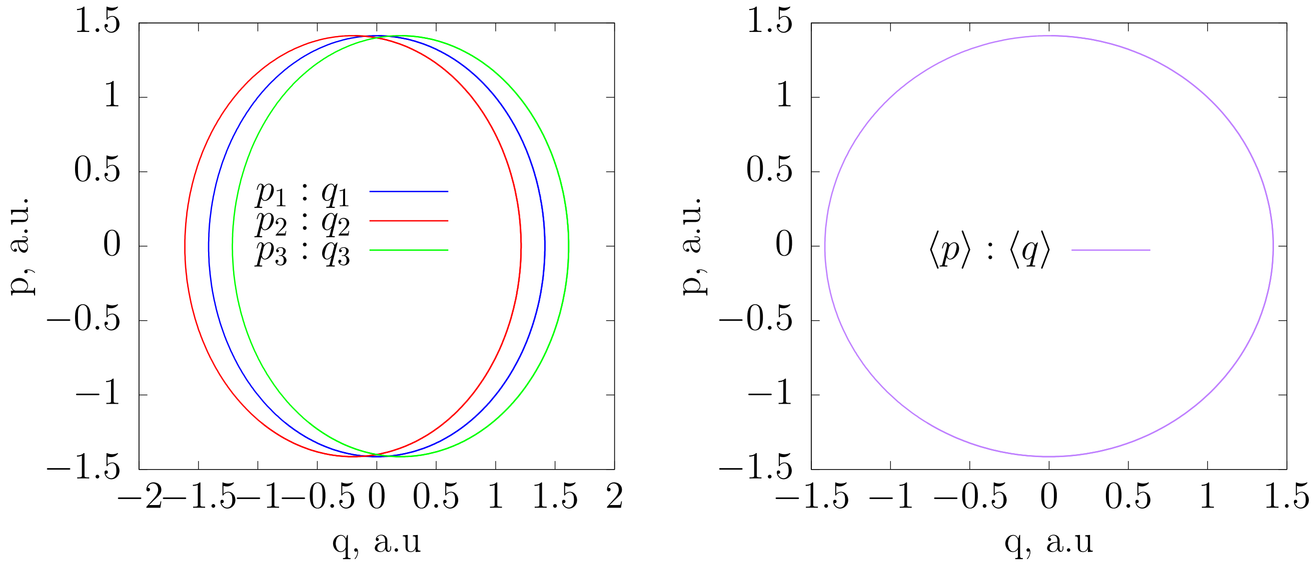

Рис. 8: Фазовый портрет базисных функций

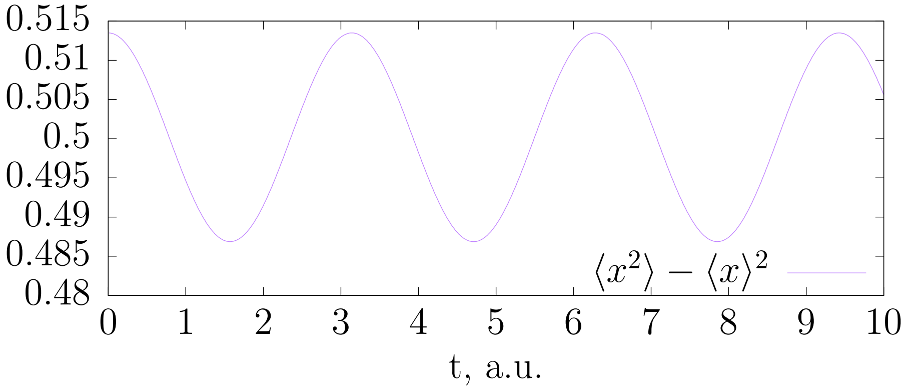

Рис. 9: Зависимость дисперсии ВФ от времени

1.3 Средний импульс — локальное усреднение градиента

В качестве третьей альтернативы попробуем использовать одинаковый импульс, изменение которого будем рассчитывать с помощью локально усредненного градиента: при усреднении градиент пудет браться в центрах базисных функций:

$$|g_k\rangle = N\mathrm{exp}\left(\frac{1}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}m\omega(x-q_k)^2 + i\langle p\rangle x\right)\right) = \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}m\omega x^2 + \xi_k x + \eta_k\right)\right)$$

$$\xi_k = m\omega x + i\langle p\rangle,\ \ \eta_k = \hbar \ln N - \frac{1}{2}m\omega q_k^2$$

$$\dot{\xi}_k = m\omega\dot{q}_k + i\langle\dot{p}\rangle = \omega\langle p\rangle - i\left\langle \left.\frac{dV}{dx}\right|_q \right\rangle = \omega\langle p\rangle - i\sum_{m,k} D_m^* D_k \left\langle g_m \left| \left.\frac{dV}{dx}\right|_{q_k} \right| g_k \right\rangle =$$

$$= \omega\langle p\rangle - im\omega^2 \sum_{m.k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} q_k = \omega\langle p\rangle - im\omega^2\{x\}$$

$$\dot{\eta}_k = -m\omega q_k \dot{q}_k = -\omega q_k\langle p\rangle$$

При этом элементы матрицы Гамильтониана не изменятся:

$$\mathbb{H}_{mk} = \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q_m q_k + \frac{\langle p\rangle^2}{2m} + \frac{i}{2}\omega\langle p\rangle(q_m - q_k)\right)\mathbb{S}_{mk}$$

А в матрице τ изменится только форма расчета среднего значения координаты:

$$\tau_{mk} = \langle g_m|\dot{g}_k\rangle = \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(\dot{\eta}_k + \dot{\xi}_k\frac{q_k+q_m}{2}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega q_k\langle p\rangle + (\omega\langle p\rangle - im\omega^2\{x\})\frac{q_k+q_m}{2}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(\omega\langle p\rangle\frac{q_m-q_k}{2} - im\omega^2\{x\}\frac{q_m+q_k}{2}\right)$$

При объединении видим, что выражении по форме совпадает с таковым, полученным при полном усреднении:

$$\mathbb{H}_{mk} - i\hbar\tau_{mk} = \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2(q_m q_k - \{x\}(q_m+q_k)) + \frac{\langle p\rangle^2}{2m}\right)$$

Снова видим, что $\mathbb{H} - i\hbar\tau$ действительна.

$$\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar}\mathbb{S}^{-1}\left(\mathbb{H} - i\hbar\tau\right)\vec{D}$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \vec{D}^{\dagger}\mathbb{S}\vec{D},\ \ \frac{d}{dt}\langle\Psi|\Psi\rangle = 2Re(\vec{D}^{\dagger}\mathbb{S}\dot{\vec{D}}) + \vec{D}^{\dagger}\dot{\mathbb{S}}\vec{D}$$

Первое слагаемое снова равно 0, изучим $\dot{\mathbb{S}}$:

$$\dot{\mathbb{S}}_{mk} = \langle\dot{g}_m|g_k\rangle + \langle g_m|\dot{g}_k\rangle = \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(\dot{\eta}_m^* + \dot{\eta}_k + (\dot{\xi}_m^* + \dot{\xi}_k)\frac{q_m + q_k}{2}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega\langle p\rangle(q_m + q_k) + \omega\langle p\rangle(q_m + q_k)\right) = 0$$

Таким образом, данная динамика сохраняет норму.

Базис — три волновых пакета: $\{q_k\}_{k=1}^{3} = \{0, \pm 0.2\}$, $\langle p\rangle = \sqrt{2}$. Частота потенциала = частоте пакета = 1

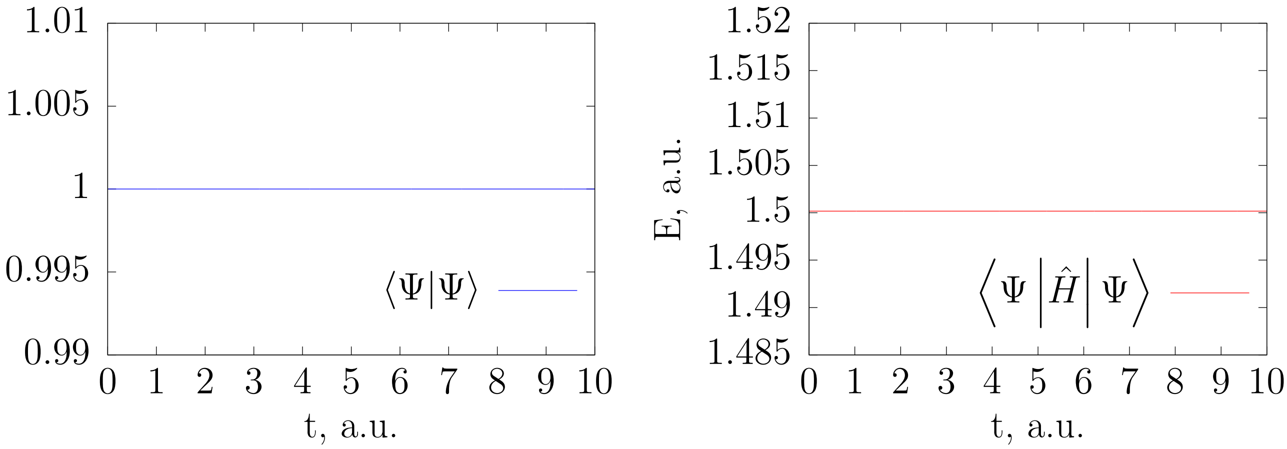

Рис. 10: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

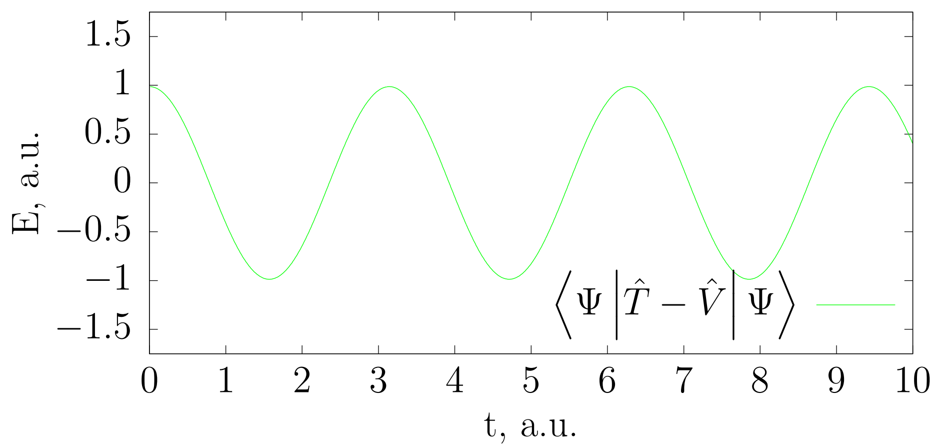

Рис. 11: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

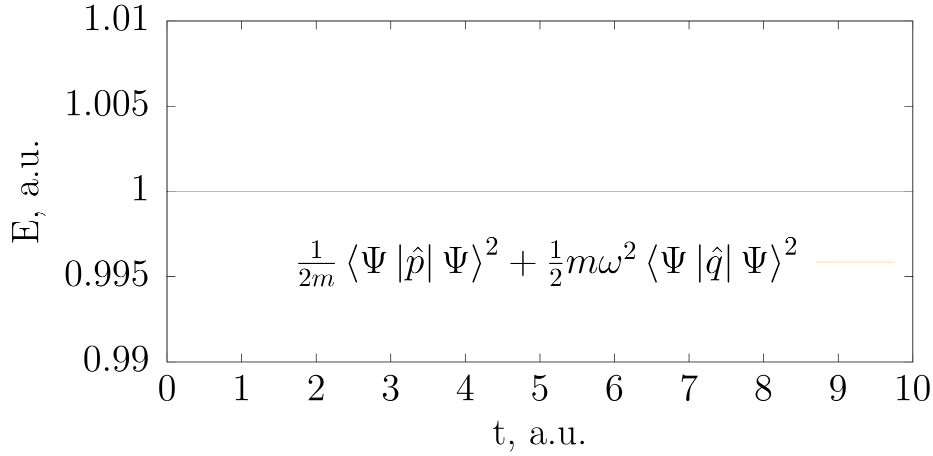

Рис. 12: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

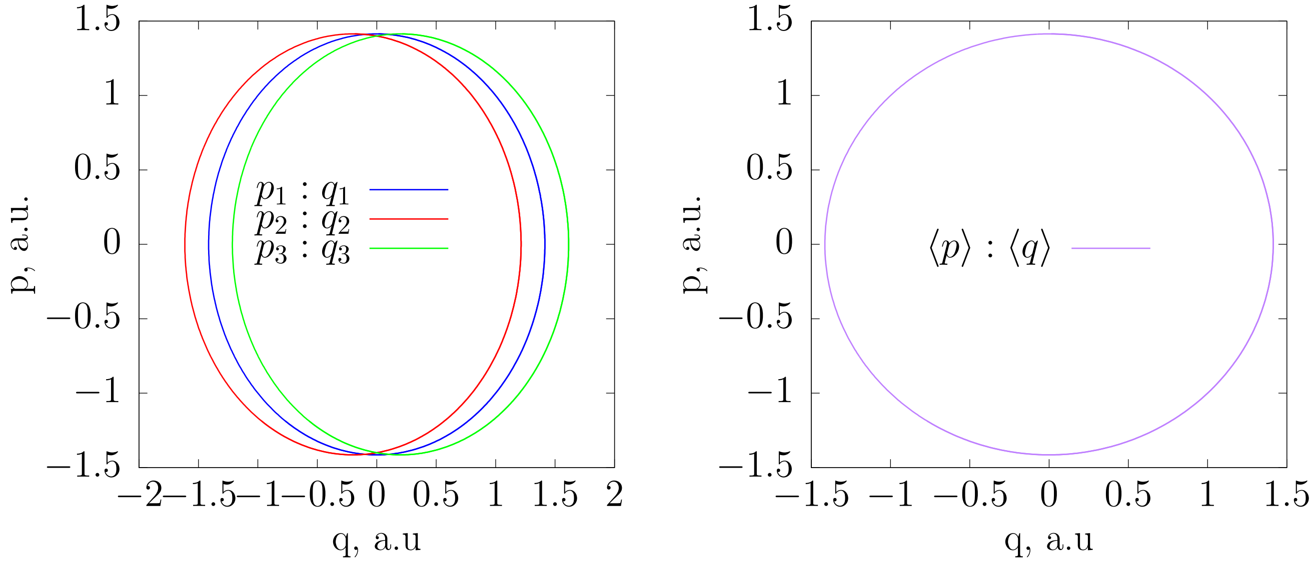

Рис. 13: Фазовый портрет базисных функций

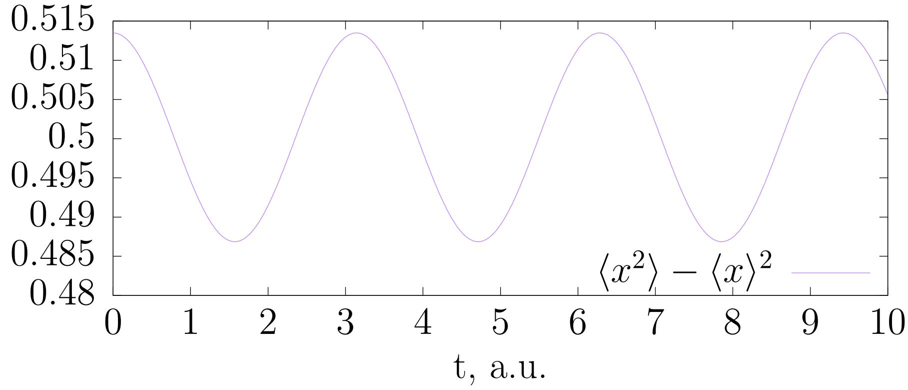

Рис. 14: Зависимость дисперсии ВФ от времени

2 Эксперименты с частотой потенциала

Пусть частота потенциала $\neq$ частота пакета. При сохранении параметров базисных функций возьмем частоту гармонического осциллятора равной 0.1

2.1 Нет усреднения

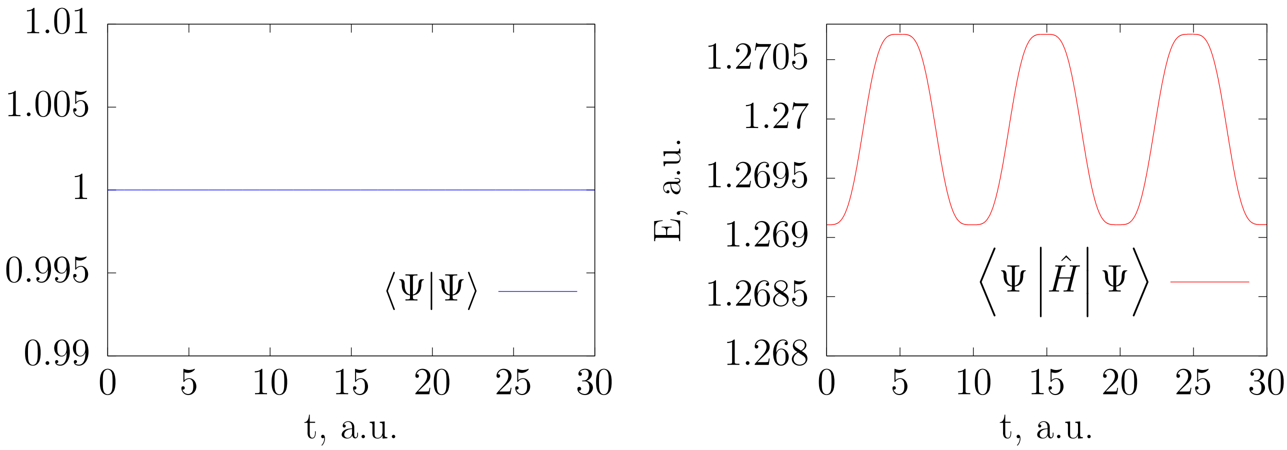

Рис. 15: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

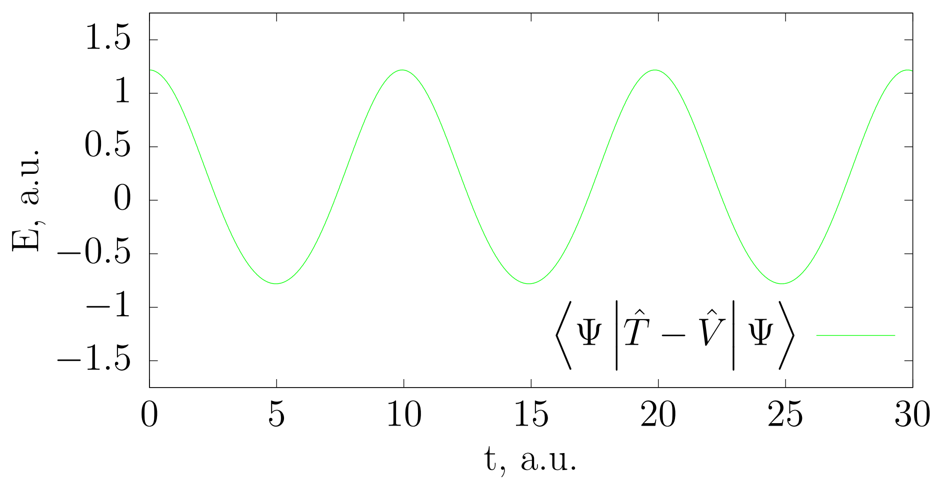

Рис. 16: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

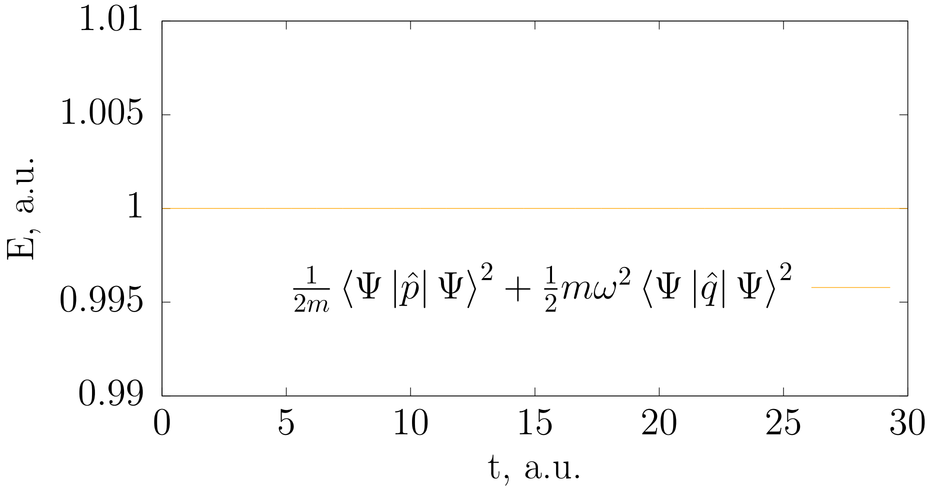

Рис. 17: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

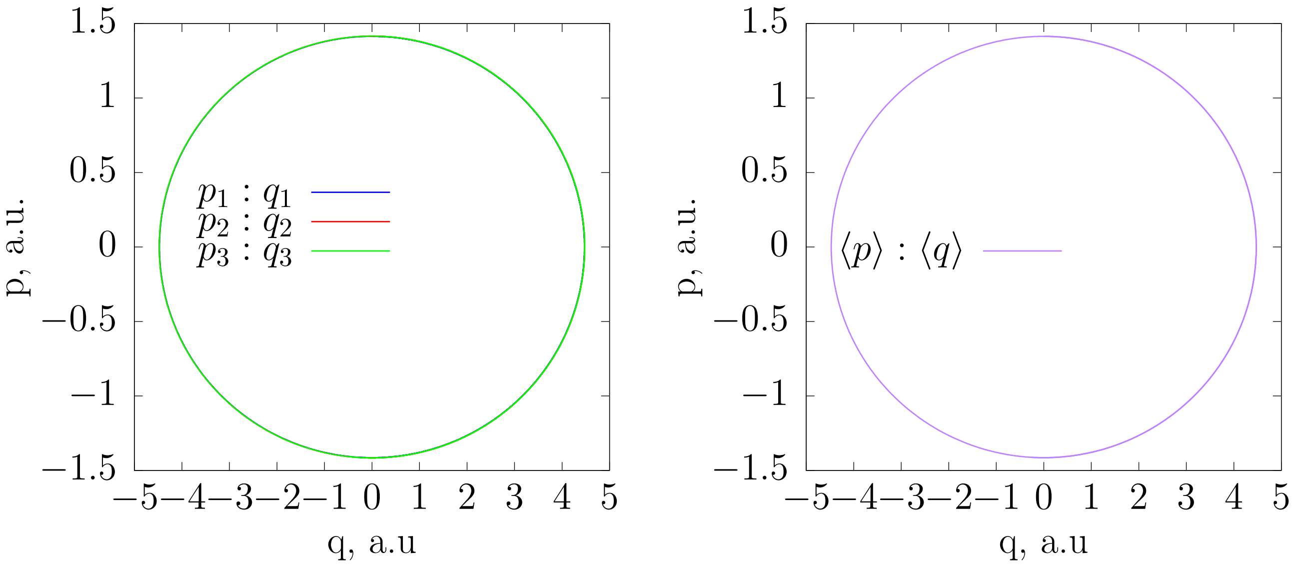

Рис. 18: Фазовый портрет базисных функций

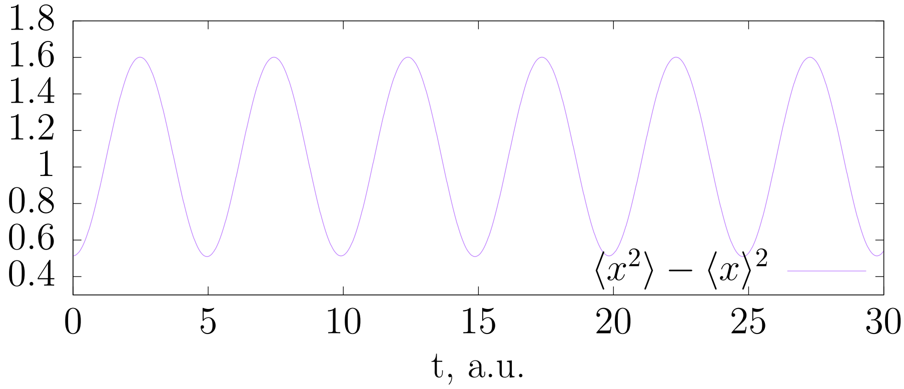

Рис. 19: Зависимость дисперсии ВФ от времени

2.2 Усреднение импульса — полное усреднение градиента

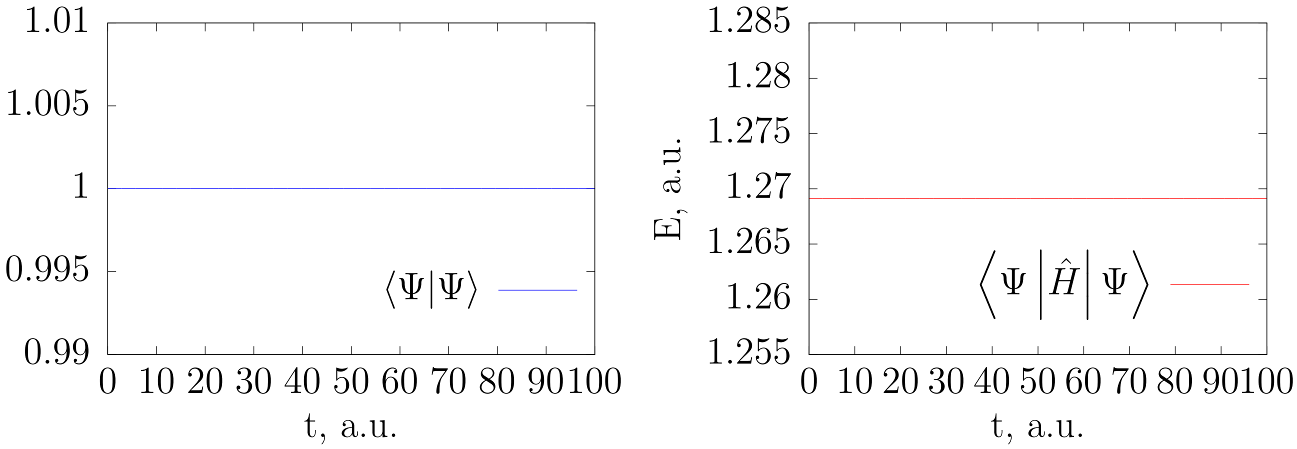

Рис. 20: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

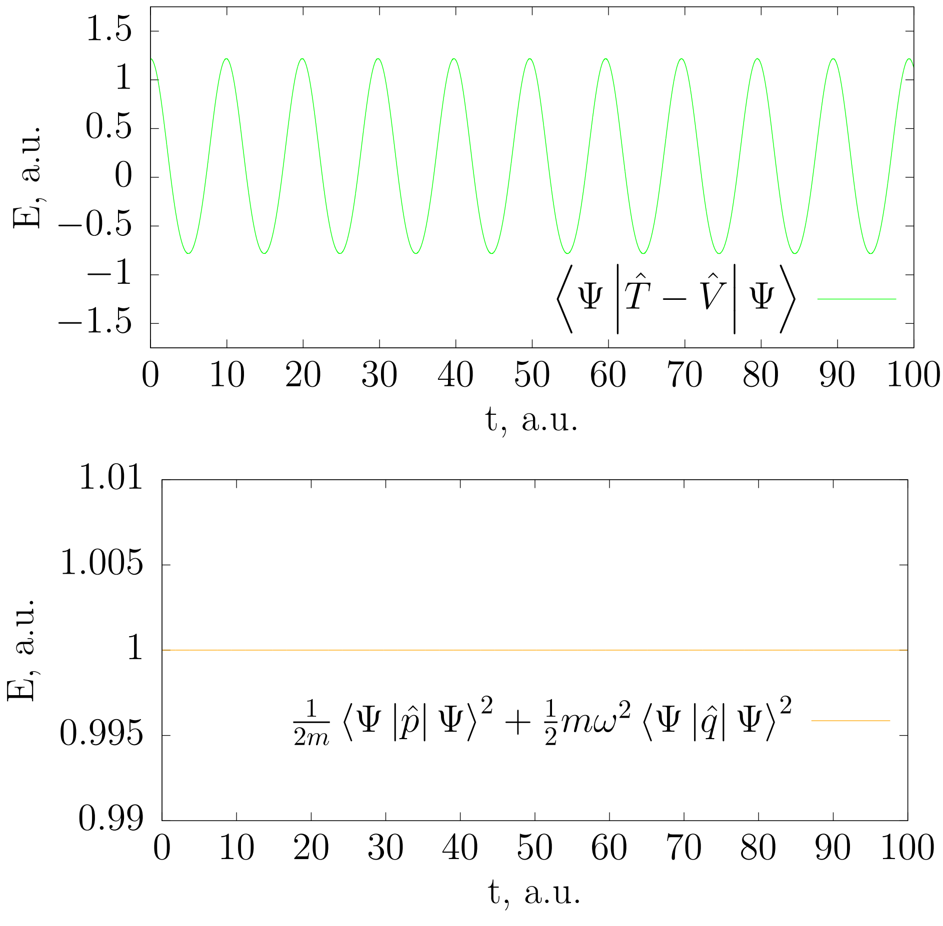

Рис. 21: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа и классической энергии полной ВФ от времени

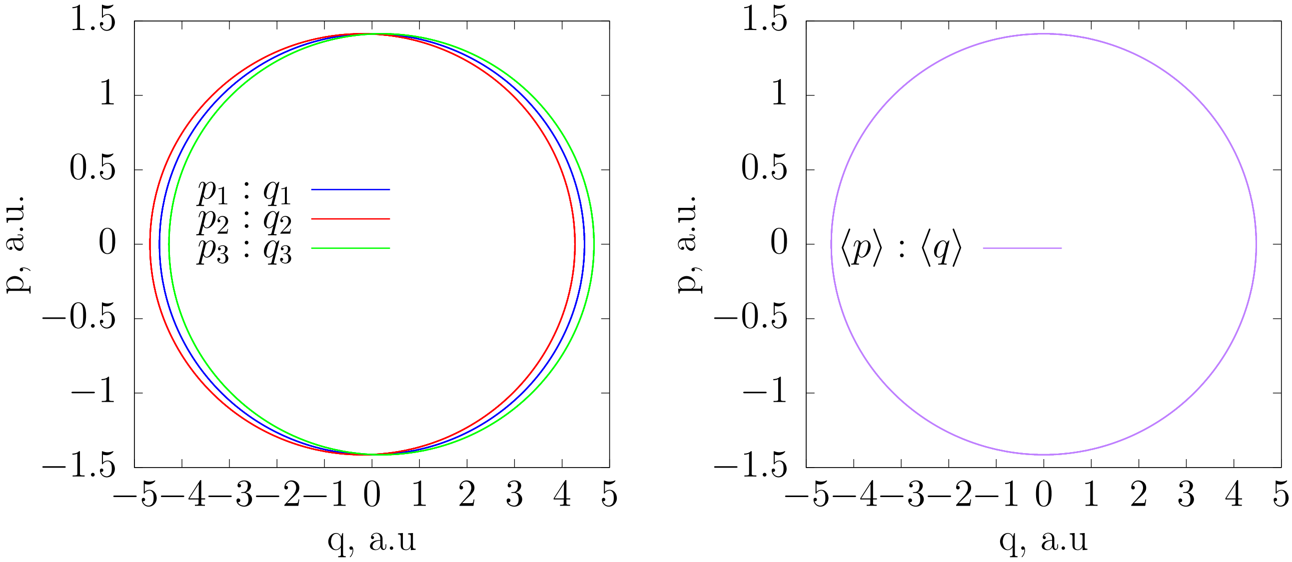

Рис. 22: Фазовый портрет базисных функций

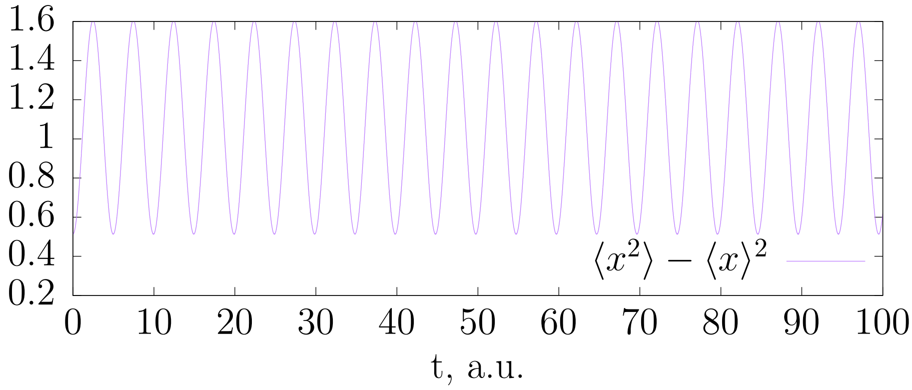

Рис. 23: Зависимость дисперсии ВФ от времени

2.3 Средний импульс — локальное усреднение градиента

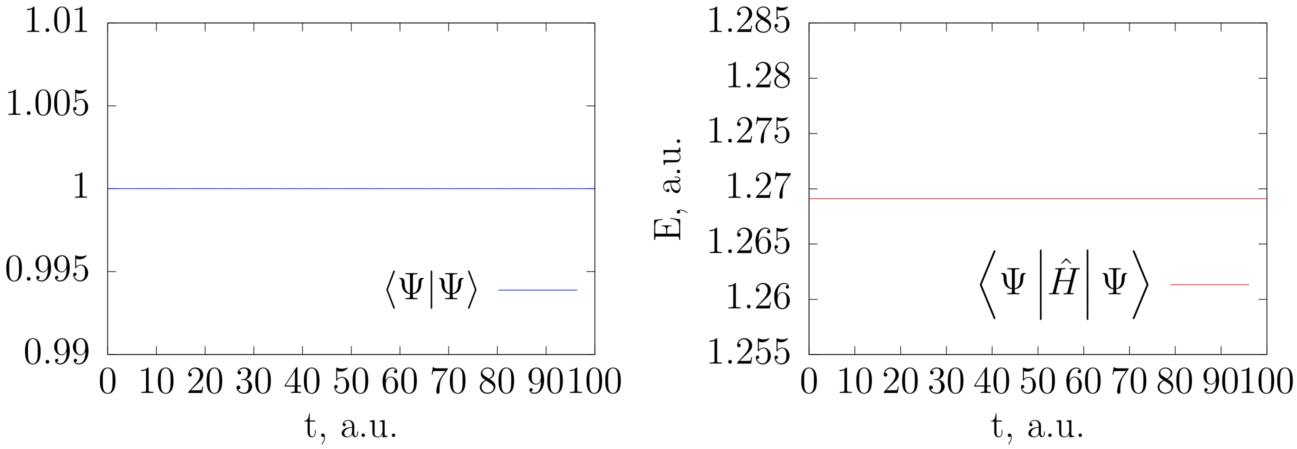

Рис. 24: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

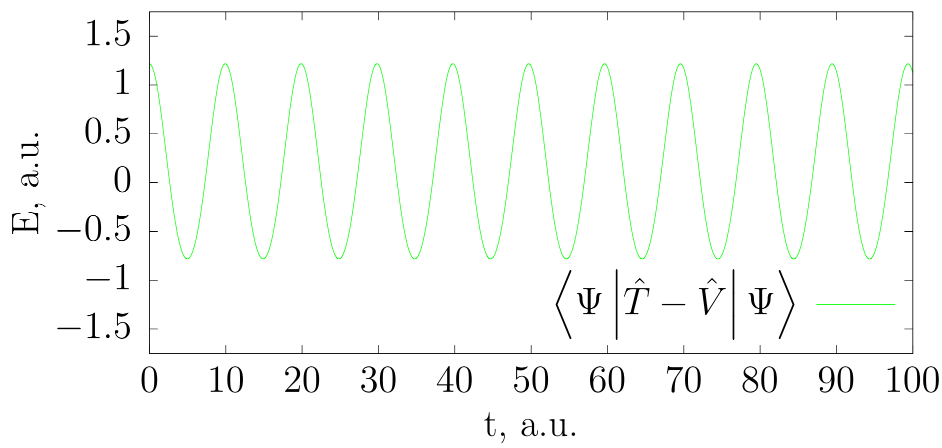

Рис. 25: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

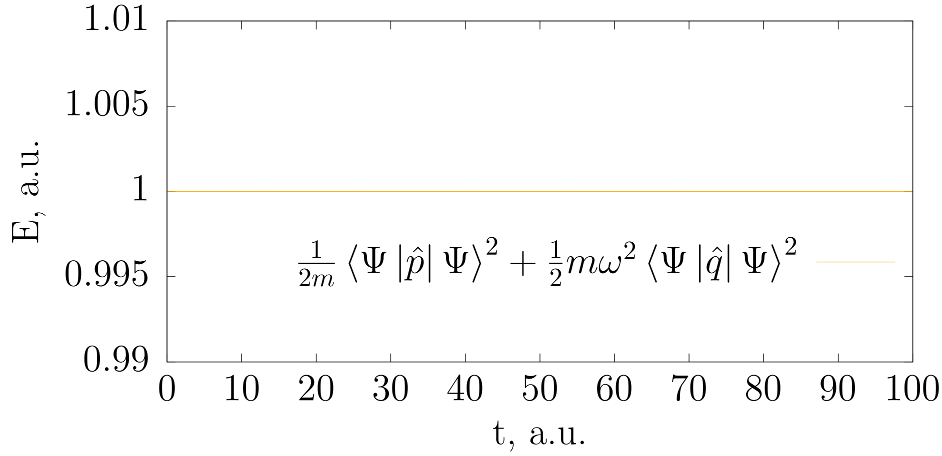

Рис. 26: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

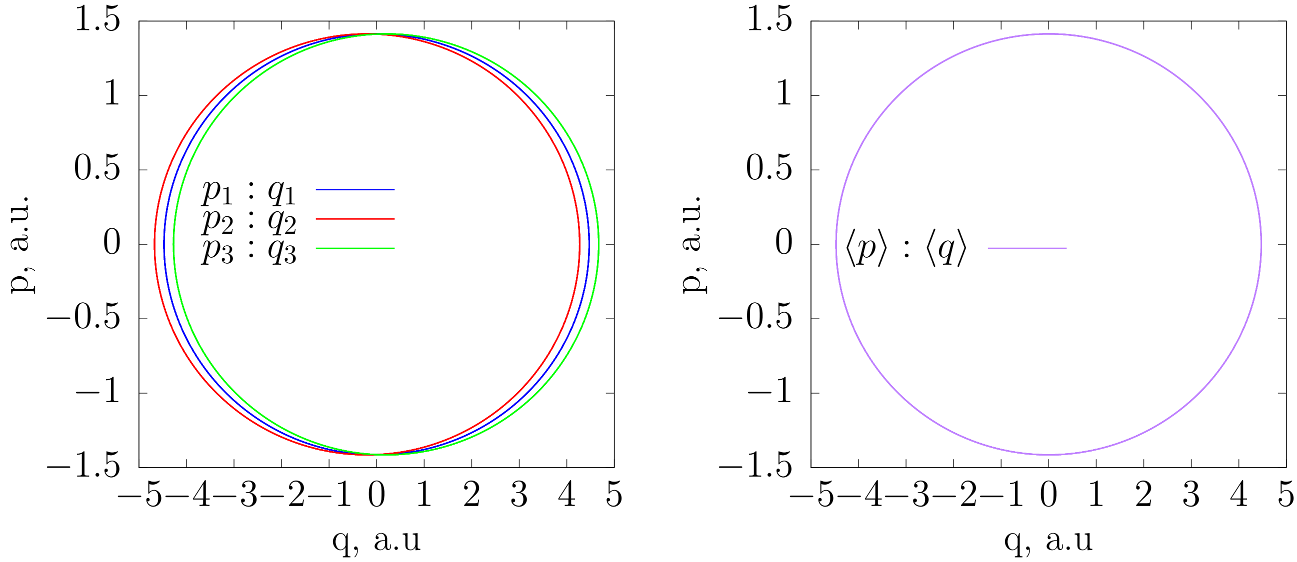

Рис. 27: Фазовый портрет базисных функций

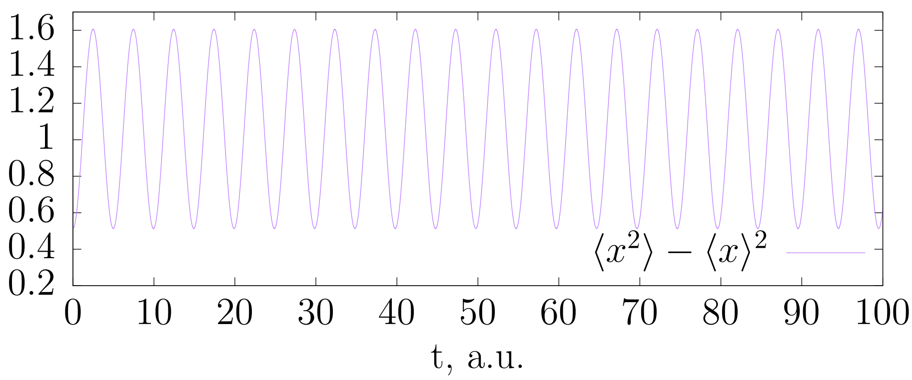

Рис. 28: Зависимость дисперсии ВФ от времени

3 Потенциал — спадающая экспонента

Рассматриваемый потенциал имеет вид:

$$V(x) = \hbar\Omega e^{-x/l}$$

Начнем с рассмотрения базиса из одного волнового пакета. Изучим вопрос сохранения энергии:

$$< V >= \hbar\Omega \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \int \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + \left(2Re(\xi) - \frac{\hbar}{l}\right)x + 2Re(\eta)\right)\right) dx =$$

$$= \hbar\Omega \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \int \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + \left(2m\omega q - \frac{\hbar}{l}\right)x - m\omega q^2\right)\right) dx =$$

$$= \hbar\Omega \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}q^2\right) \int \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x^2 - 2\left(q - \frac{\hbar}{2ml\omega}\right)x\right)\right) dx =$$

$$= \hbar\Omega \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\left(q^2 - \left(q - \frac{\hbar}{2ml\omega}\right)^2\right)\right) =$$

$$= \hbar\Omega \exp\left(-\frac{q}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right)$$

$$< T >= \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{|\xi|^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{Re(\xi)}{m\omega}\right)^2\right) =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{m^2\omega^2q^2 + p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2q^2 = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{p^2}{2m}$$

$$< H >'_t = < V >'_t + < T >'_t = \frac{p\dot{p}}{m} - \frac{\hbar\Omega\dot{q}}{l}\exp\left(-\frac{q}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right) =$$

$$= \frac{p}{m}\left(\dot{p} - \frac{\hbar\Omega}{l}\exp\left(-\frac{q}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right)\right)$$

Если принять, что $\dot{p} = -V'_x(q)$, то получим

$$< H >'_t = \frac{\hbar\Omega p}{lm}\exp\left(-\frac{q}{l}\right)\left(1 - \exp\left(\frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right)\right)$$

Если же принять, что $\dot{p} = - < V'_x >= \hbar\Omega < V > /l$, то получим $< H >'_t = 0$

3.1 Нет усреднения

Базис из двух функций:

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} \hbar\Omega \exp\left(-\frac{q_1}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right) & V_{12} \\ V_{12}^* & \hbar\Omega \exp\left(-\frac{q_2}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right) \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{p_1^2}{2m} & T_{12} \\ T_{12}^* & \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{p_2^2}{2m} \end{pmatrix}$$

Обобщая предыдущие рассуждения, предполагаем, что среднее значение энергии теперь сохраняться не будет. Однако, след марицы оператора Гамильтона все еще представляет собой сумму классических функций Гамильтона отдельных пакетов и поправки. Таким образом, след матрицы оператора Гамильтона будет сохраняться с течением времени.

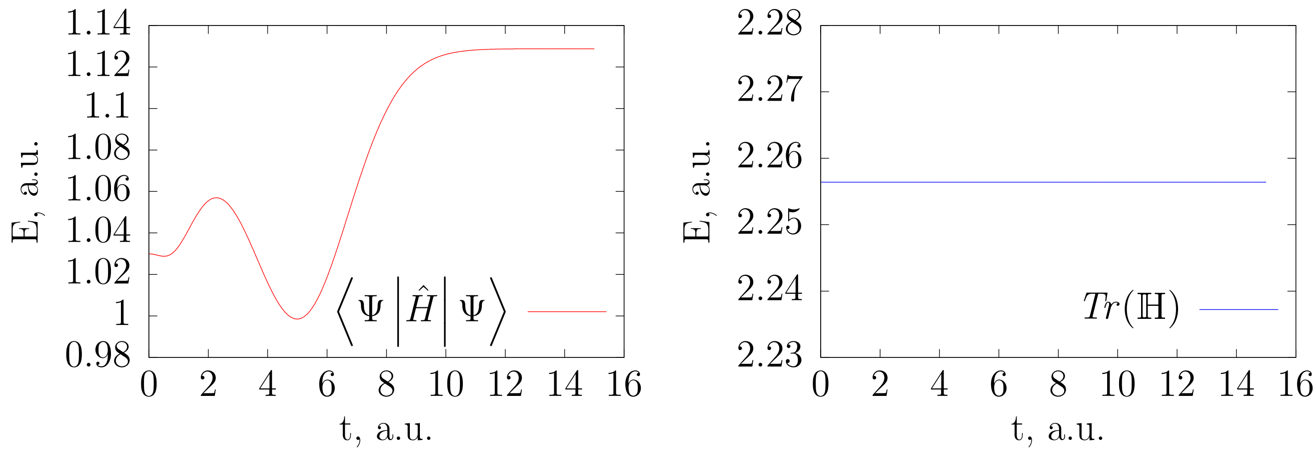

Рис. 29: Зависимость среднего значения оператора Гамильтона и следа матрицы оператора Гамильтона от времени

3.2 Средний импульс

Пускай наши базисные функции имеют вид:

$$|g_k\rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}m\omega(x-q_k)^2 + ipx\right)\right)$$

Тогда след матрицы Гамильтона имеет вид:

$$Tr(\mathbb{H}) = N\left(\frac{\hbar\omega}{4} + \frac{p^2}{2m}\right) + \sum_{k=1}^{N} \langle g_k \left| V \right| g_k \rangle$$

Потребуем, чтобы след матрицы Гамильтона являлся интегралом движения. Тогда имеем следующее:

$$0 = \frac{d}{dt} Tr\mathbb{H} = \frac{Np}{m}\dot{p} + \sum_{k=1}^{N} (\langle \dot{g}_k \left| V \right| g_k \rangle + \langle g_k \left| V \right| \dot{g}_k \rangle) =$$

$$= \frac{Np}{m}\dot{p} + \frac{1}{\hbar}\sum_{k=1}^{N} \Big(\langle g_k \left| V \right| g_k \rangle \left(\dot{\eta}_k^* + \dot{\eta}_k \right) + \langle g_k \left| Vx \right| g_k \rangle \left(\dot{\xi}_k^* + \dot{\xi}_k \right) \Big) =$$

$$= \frac{Np}{m}\dot{p} + \frac{1}{\hbar}\sum_{k=1}^{N} \left(-2m\omega q_k \dot{q}_k \langle g_k \left| V \right| g_k \rangle + 2m\omega \dot{q}_k \langle g_k \left| Vx \right| g_k \rangle \right) =$$

$$= \frac{Np}{m}\left(\dot{p} + \frac{2m\omega}{N\hbar}\sum_{k=1}^{N} \left(\langle g_k \left| Vx \right| g_k \rangle - q_k \langle g_k \left| V \right| g_k \rangle \right) \right)$$

$$\dot{p} = -\frac{2m\omega}{N\hbar}\sum_{k=1}^{N} \langle g_k \left| V(x - q_k) \right| g_k \rangle$$

Распишем последний интеграл в явном виде:

$$\langle g_k \left| V(x - q_k) \right| g_k \rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}(x - q_k)^2 \right) (x - q_k) V(x)\, dx =$$

$$= -\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\, d\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}(x - q_k)^2 \right) =$$

$$= -\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega\pi} \right)^{1/2} V(x)\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}(x - q_k)^2 \right)\Bigg|_{-\infty}^{\infty} +$$

$$+\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega\pi} \right)^{1/2} \int_{\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}(x - q_k)^2 \right) \frac{\partial V}{\partial x}\, dx$$

Первое слагаемое равно нулю. Рассмотрим второе:

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega\pi} \right)^{1/2} \int_{\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}(x - q_k)^2 \right) \frac{\partial V}{\partial x}\, dx = \frac{\hbar}{2m\omega} \left\langle g_k \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| g_k \right\rangle$$

Таким образом, выражение для $\dot{p}$ принимает вид:

$$\dot{p} = -\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \left\langle g_k \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| g_k \right\rangle$$

В случае двух функций новый градиент имеет вид:

$$\dot{p} = -\frac{\hbar\Omega}{Nl}\sum_{k} \exp\left(-\frac{q_k}{l} + \frac{\hbar}{4m\omega l^2} \right)$$

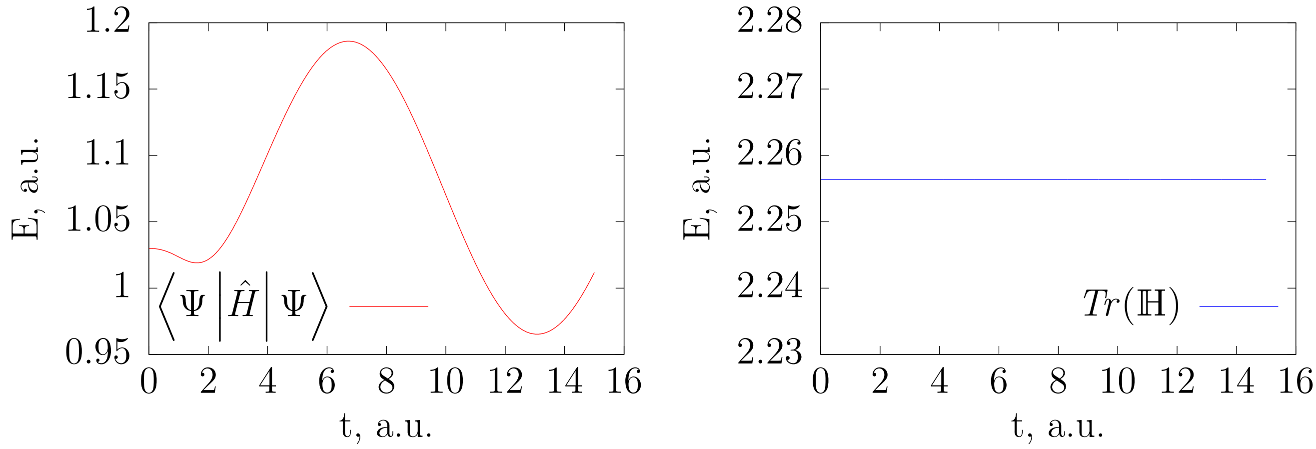

Рис. 30: Зависимость среднего значения оператора Гамильтона и следа матрицы оператора Гамильтона от времени

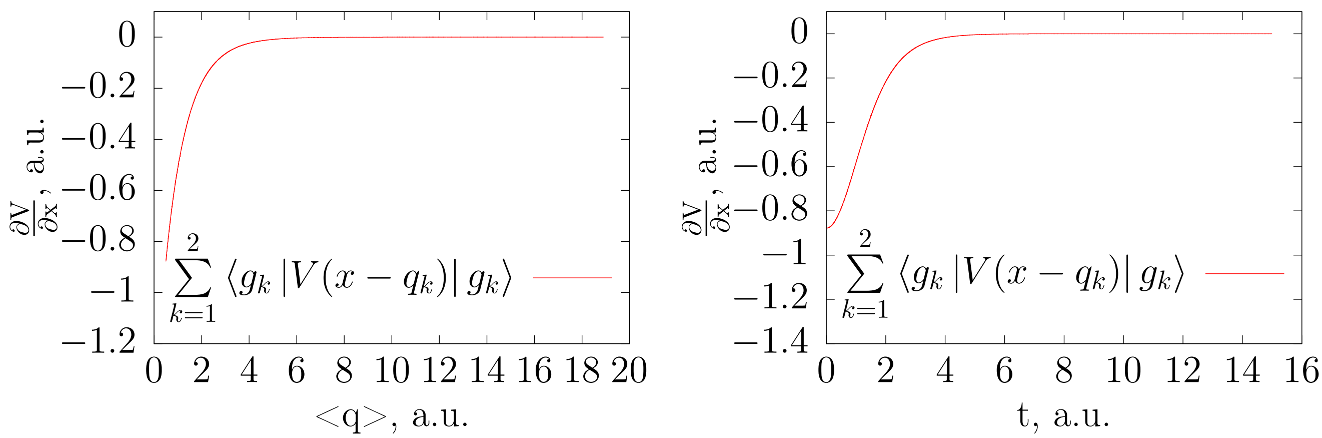

Рис. 31: Зависимость эффективного градиента от времени и координаты

Рассмотрим модифицированный след:

$$eTr(\mathbb{H}) = \sum_{k=1}^{N} \mathbb{H}_{kk} |D_k|^2$$

$$\frac{d}{dt} eTr\mathbb{H} = \sum_{k=1}^{N} \left(|D_k|^2 \dot{\mathbb{H}}_{kk} + (\dot{D}_k^* D_k + D_k^* \dot{D}_k) \mathbb{H}_{kk} \right)$$

$$\dot{D}_k = -\frac{i}{\hbar} \sum_{m,n=1}^{N} \left(\mathbb{S}^{-1} \right)_{km} (\mathbb{H}_{mn} - i\hbar\tau_{mn}) D_n$$

$$\mathbb{H}_{mn} = \$_{mn}\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\xi_m^*\xi_n}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{\xi_m^* + \xi_n}{2m\omega}\right)^2\right)\right) + \langle g_m |V| g_n\rangle =$$

$$= \$_{mn}\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2m}(m^2\omega^2 q_m q_n + p^2 + im\omega p(q_m - q_n)) - \frac{\hbar\omega}{4} - \frac{1}{8}m\omega^2(q_m + q_k)^2\right)$$
$$+ \langle g_m |V| g_n\rangle$$

$$= \$_{mn}\left(\frac{\hbar\omega}{4} - \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{q_m - q_n}{2}\right)^2 + \frac{p^2}{2m} + \frac{i}{2}\omega p(q_m - q_n)\right) + \langle g_m |V| g_n\rangle$$

$$\tau_{mn} = \langle g_m | \dot{g_n}\rangle = \frac{1}{\hbar}\$_{mn}\left(\dot{\eta}_n + \dot{\xi}_n\frac{\xi_m^* + \xi_n}{2m\omega}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\$_{mn}\left(-\omega q_n p + (\omega p + i\dot{p})\frac{q_m + q_n}{2}\right) = \frac{1}{\hbar}\$_{mn}\left(\omega p\frac{q_m - q_n}{2} + i\dot{p}\frac{q_m + q_n}{2}\right)$$

$$\mathbb{H}_{mn} - i\hbar\tau_{mn} = \$_{mn}\left(\frac{\hbar\omega}{4} - \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{q_m - q_n}{2}\right)^2 + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\dot{p}(q_m + q_n)\right) + \langle g_m |V| g_n\rangle$$

$$\left(\dot{D}_k^* D_k + D_k^* \dot{D}_k\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\left(\$^{-1}\right)_{km}^* (\mathbb{H}_{mn} - i\hbar\tau_{mn})^* D_n^* D_k - \left(\$^{-1}\right)_{km}(\mathbb{H}_{mn} - i\hbar\tau_{mn}) D_k^* D_n\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\$^{-1}\right)_{km}(\mathbb{H}_{mn} - i\hbar\tau_{mn})(D_n^* D_k - D_k^* D_n) =$$

$$= -\frac{2}{\hbar}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\$^{-1}\right)_{km}(\mathbb{H}_{mn} - i\hbar\tau_{mn}) Im(D_n^* D_k) \neq 0$$

$$\frac{d}{dt}eTr(\mathbb{H}) = \sum_{k=1}^{N}\left(|D_k|^2\frac{p}{m}\left(\dot{p}+\left\langle g_k\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|g_k\right\rangle\right)-\right.$$

$$\left.-\frac{2}{\hbar}\mathbb{H}_{kk}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}(\mathbb{H}_{mn}-i\hbar\tau_{mn})Im(D_n^*D_k)\right)=$$

$$=\dot{p}\sum_{k=1}^{N}\left(|D_k|^2\frac{p}{m}-\frac{1}{\hbar}\mathbb{H}_{kk}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}\mathbb{S}_{mn}(q_m+q_n)Im(D_n^*D_k)\right)-$$

$$-\sum_{k=1}^{N}\left(|D_k|^2\frac{p}{m}\left\langle g_k\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|g_k\right\rangle-\right.$$

$$-\frac{2}{\hbar}\mathbb{H}_{kk}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}\mathbb{S}_{mn}\left(\frac{\hbar\omega}{4}+\frac{p^2}{2m}-\right.$$

$$\left.-\frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{q_m-q_n}{2}\right)^2\right)Im(D_n^*D_k)-$$

$$\left.-\frac{2}{\hbar}\mathbb{H}_{kk}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}\left\langle g_m\left|V\right|g_n\right\rangle Im(D_n^*D_k)\right)=$$

$$=\dot{p}\sum_{k=1}^{N}\left(|D_k|^2\frac{p}{m}-\frac{1}{\hbar}\mathbb{H}_{kk}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}\mathbb{S}_{mn}q_mIm(D_n^*D_k)\right)-$$

$$-\sum_{k=1}^{N}\left(|D_k|^2\frac{p}{m}\left\langle g_k\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|g_k\right\rangle-\right.$$

$$-\frac{m\omega^2}{4\hbar}\mathbb{H}_{kk}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}\mathbb{S}_{mn}\left(2q_mq_n-q_m^2\right)Im(D_n^*D_k)-$$

$$\left.-\frac{2}{\hbar}\mathbb{H}_{kk}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}\left\langle g_m\left|V\right|g_n\right\rangle Im(D_n^*D_k)\right)=0$$

$$\dot{p}=\frac{\sum\limits_{k=1}^{N}|D_k|^2\left\langle g_k\left|\frac{\partial V}{\partial x}\right|g_k\right\rangle}{\sum\limits_{k=1}^{N}|D_k|^2-\frac{m}{\hbar p}\mathbb{H}_{kk}\sum\limits_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}\mathbb{S}_{mn}q_mIm(D_n^*D_k)}+$$

$$+\frac{\frac{2m}{\hbar p}\mathbb{H}_{kk}\sum\limits_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km} Im(D_n^* D_k)\left(\langle g_m\left|V\right|g_n\rangle+\frac{m\omega^2}{8}\mathbb{S}_{mn}(2q_m q_n-q_m^2)\right)}{\sum\limits_{k=1}^{N}|D_k|^2-\frac{m}{\hbar p}\mathbb{H}_{kk}\sum\limits_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{km}\mathbb{S}_{mn}q_m Im(D_n^* D_k)}$$

Итак, мы хотим:

1. Иметь "взвешенный"след $\Rightarrow$ "взвешенный"градиент
2. Веса должны иметь смысл вероятностей (сумма равна единице)
3. Градиент должен иметь "простой"вид и понятный физический смысл (желательно)

В общем виде это можно записать следующим образом:

$$eTr(\mathbb{H})=\sum_{i=1}^{N}\mathbb{H}_{ii}P_i,\sum_{i=1}^{N}P_i=1$$

Рассмотрим такое выражение для вероятности:

$$P_i=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\mathbb{S}_{ij}\left(D_i^* D_j+D_i D_j^*\right)$$

$$\sum_{i=1}^{N}P_i=\left(\vec{D}^{\dagger}\mathbb{S}\vec{D}\right)=1$$

$$eTr(\mathbb{H})=\sum_{i=1}^{N}\mathbb{H}_{ii}P_i,\ \frac{d}{dt}eTr(\mathbb{H})=\sum_{i=1}^{N}\dot{\mathbb{H}}_{ii}P_i+\mathbb{H}_{ii}\dot{P}_i$$

$$\dot{P}_i=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\mathbb{S}_{ij}\left(\dot{D}_i^* D_j+D_i^*\dot{D}_j+\dot{D}_i D_j^*+D_i\dot{D}_j^*\right)$$

$$\mathbb{R}_{mn}=\mathbb{H}_{mn}-i\hbar\tau_{mn}$$

$$\dot{D}_i^* D_j=\frac{i}{\hbar}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{im}\mathbb{R}_{mn}D_n^* D_j$$

$$D_i^*\dot{D}_j=-\frac{i}{\hbar}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{jm}\mathbb{R}_{mn}D_i^* D_n$$

$$\dot{D}_i D_j^* = -\frac{i}{\hbar}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{im}\mathbb{R}_{mn}D_nD_j^*$$

$$D_i\dot{D}_j^* = \frac{i}{\hbar}\sum_{m,n=1}^{N}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{jm}\mathbb{R}_{mn}D_n^*D_i$$

$$\dot{P}_i = \frac{i}{2\hbar}\sum_{j,m,n=1}^{N}\mathbb{S}_{ij}\mathbb{R}_{mn}\Big(\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{im}(D_n^*D_j - D_nD_j^*) + \left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{jm}(D_n^*D_i - D_nD_i^*)\Big) =$$

$$= -\frac{1}{\hbar}\left(\sum_{n,m=1}^{N}\delta_{im}\mathbb{R}_{mn}Im(D_n^*D_i) + \sum_{j,n,m=1}^{N}\mathbb{S}_{ij}\mathbb{R}_{mn}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{im}Im(D_n^*D_j)\right) =$$

$$= -\frac{1}{\hbar}\left(\sum_{n=1}^{N}\mathbb{R}_{im}Im(D_n^*D_i) + \sum_{j,n,m=1}^{N}\mathbb{S}_{ij}\mathbb{R}_{mn}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{im}Im(D_n^*D_j)\right) = ...$$

$$[\mathbb{R}_{mn} = \mathbb{H}_{mn} - i\hbar\tau_{mn} = \mathbb{S}_{mn}\mathbb{A}_{mn} + \langle g_m | V | g_n\rangle]$$

$$... = -\frac{1}{\hbar}\left(\sum_{n=1}^{N}(\mathbb{S}_{in}\mathbb{A}_{in} + \langle g_i | V | g_n\rangle)Im(D_n^*D_i) + \right.$$

$$\left. + \sum_{j,m,n=1}^{N}\mathbb{S}_{ij}\left(\mathbb{S}^{-1}\right)_{im}(\mathbb{S}_{mn}\mathbb{A}_{mn} + \langle g_m | V | g_n\rangle)Im(D_n^*D_j)\right)$$