Решение заданий
ОП "Квантовая теория поля, теория струн и математическая физика"

Семинары по квантовой механике – I
(И.В. Побойко, Д.С. Антоненко, Н.А. Степанов)

Коцевич Андрей Витальевич, группа Б02-920

5 семестр, 2021

Содержание

1 Основы квантовой механики.

Упражнения (20 баллов)

Упражнение 1. Унитарные матрицы (5 баллов).
Покажите, что унитарные матрицы, как и эрмитовы, диагонализуемы. *Указание*: покажите, что эрмитова и анти-эрмитова часть унитарного оператора диагонализуемы совместно.
Решение.
Разложим унитарный оператор на эрмитову и анти-эрмитову части:

$$\hat{U} = \frac{\hat{U} + \hat{U}^\dagger}{2} + i\frac{\hat{U} - \hat{U}^\dagger}{2i} \tag{1}$$

Вычислим их коммутатор, учитывая унитарность оператора $\hat{U}$ ($\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbb{I}$):

$$[\hat{U}+\hat{U}^\dagger, \hat{U}-\hat{U}^\dagger] = \hat{U}\hat{U}+\hat{U}^\dagger\hat{U}-\hat{U}\hat{U}^\dagger-\hat{U}^\dagger\hat{U}^\dagger-\hat{U}\hat{U}+\hat{U}^\dagger\hat{U}-\hat{U}\hat{U}^\dagger+\hat{U}^\dagger\hat{U}^\dagger = 2(\hat{U}^\dagger\hat{U}-\hat{U}\hat{U}^\dagger) = 0 \tag{2}$$

Часть $\frac{\hat{U}+\hat{U}^\dagger}{2}$ эрмитова, $i\frac{\hat{U}-\hat{U}^\dagger}{2i}$ антиэрмитова. Докажем следующее предложение:

Предложение 1. *Если операторы коммутируют, то их можно одновременно диагонализировать.*

Доказательство. Пусть $\vec{a}$ – собственный вектор оператора $\hat{A}$, соответствующий некратному собственному значению λ ($\hat{A}\vec{a} = \lambda\vec{a}$). Вектор $\hat{B}\vec{a}$ тоже будет принадлежать собственному значению λ матрицы A:

$$\hat{A}\hat{B}\vec{a} = \hat{B}\hat{A}\vec{a} = \lambda\hat{B}\vec{a} \tag{3}$$

Следовательно, вектор $B\vec{a}$ пропорционален $\vec{a}$, т.е. $\vec{a}$ является собственным вектором матрицы $\hat{B}$.
В случае кратного собственного значения λ имеем несколько собственных векторов x_i, принадлежащим этому собственному значению. Пусть $Bx_i = b_{ij}x^j$, где b_{ij} – некоторые числа. Матрицу b_{ij} можно диагонализовать, выбрав в качестве принадлежащих λ собственных векторов матрицы A другие векторы $y_i = c_{ij}x^j : Ay_i = \lambda y_i$ и $By_i = \Lambda_i y_i$ (в последнем равенстве суммы по i нет).
Т.е. у операторов общая система собственных векторов. Можно перейти к базису, состоящему из собственных векторов, и в этом базисе обе матрицы будут диагональны. □

Таким образом, эрмитова и анти-эрмитовы части диагонализуемы совместно. Следовательно, и их сумма – унитарный оператор $\hat{U}$ диагонализуем.

Упражнение 2. Замена базиса (5 баллов).
В квантовой механике замена базиса реализуется унитарными преобразованиями $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$.

1. Покажите, что гамильтониан при этом заменяется на $\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger$.

2. Последнее утверждение необходимо модифицировать, если унитарное преобразование зависит явно от времени $\hat{U} = \hat{U}(t)$. Покажите, что в таком случае гамильтониан необходимо заменить на $\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - i\hbar\hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger$.

Решение.
Запишем нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \tag{4}$$

Поскольку преобразование $\hat{U}$ унитарное, то

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{\mathbb{I}} \to \hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger \to |\psi\rangle = \hat{U}^\dagger |\psi'\rangle \tag{5}$$

1.
$$i\hbar\frac{\partial(\hat{U}^\dagger |\psi'\rangle)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}^\dagger |\psi'\rangle \to i\hbar\frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger |\psi'\rangle \tag{6}$$

   Таким образом,
$$\boxed{\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger} \tag{7}$$

2.
$$i\hbar\frac{\partial(\hat{U}^\dagger(t) |\psi'\rangle)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}^\dagger |\psi'\rangle \to i\hbar\hat{U}^\dagger\frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} + i\hbar |\psi'\rangle \partial_t\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger |\psi'\rangle \tag{8}$$

$$i\hbar\frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} = (\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - i\hbar\hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger) |\psi'\rangle \tag{9}$$

$$\boxed{H' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - i\hbar\hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger} \tag{10}$$

Упражнение 3. Матрицы Паули (10 баллов).
Покажите следующие свойства матриц Паули (по повторяющимся индексам подразумевается суммирование):

1. Они, совместно с единичной матрицей $\sigma^0 = \hat{\mathbb{I}}_{2\times 2}$, представляют собой базис в пространстве эрмитовых матриц 2×2.

2. Они удовлетворяют следующими правилам перемножения: $\hat{\sigma}^\alpha\hat{\sigma}^\beta = \delta_{\alpha\beta}\hat{\mathbb{I}} + i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\sigma}^\gamma$ ($\alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}$, а $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – символ Леви-Чивиты).

3. Они удобно экспоненциируются: $\exp(ian_\alpha\hat{\sigma}^\alpha) = \cos a + in_\alpha\hat{\sigma}^\alpha \sin a$ (тут $\vec{n}$ – произвольный единичный вектор). *Указание*: разложите экспоненту в ряд; из-за простого правила произведения матриц Паули, произвольные степени отих линейных комбинаций вычисляются достаточно просто.

Решение.
Матрицы Паули:

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

1. Проверим, что матрицы Паули являются линейно независимой системой от противного: предположим, что существуют a_0, a_1, a_2, $a_3 \in \mathbb{R}$:

$$a_0\hat{\sigma}^0 + a_1\hat{\sigma}^1 + a_2\hat{\sigma}^2 + a_3\hat{\sigma}^3 = 0 \tag{12}$$

$$\begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_0 - a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{13}$$

   Единственное решение: $a_0 = a_1 = a_2 = a_3 = 0$, значит матрицы Паули действительно линейно независимы. Покажем, что любая эрмитова матрица 2×2 $B = (b_i)$ лежит в их линейной оболочке:

$$\begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_0 - a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{pmatrix} \tag{14}$$

Заметим, что матрица слева (а значит и справа) является эрмитовой (на главной диагонали величины вещественные, на побочной – комплексно-сопряжённые). Единственное решение: $a_0 = \frac{b_1+b_4}{2}$, $a_1 = \frac{b_2+b_3}{2}$, $a_2 = \frac{i(b_2-b_3)}{2}$, $a_3 = \frac{b_1-b_4}{2}$. Таким образом, матрицы Паули совместно с единичной матрицей образуют базис в пространстве эрмитовых матриц 2×2.

2. Проверим соотношения на матрицы Паули:

$$\sigma^1\sigma^1 = \sigma^2\sigma^2 = \sigma^3\sigma^3 = \mathbb{I} \tag{15}$$

$$\sigma^1\sigma^2 = -\sigma^2\sigma^1 = -i\sigma^3, \quad \sigma^1\sigma^3 = -\sigma^3\sigma^1 = -i\sigma^2, \quad \sigma^2\sigma^3 = -\sigma^3\sigma^2 = -i\sigma^1 \tag{16}$$

Таким образом,

$$\boxed{\hat{\sigma}^\alpha\hat{\sigma}^\beta = \delta_{\alpha\beta}\hat{\mathbb{I}} + i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\sigma}^\gamma} \tag{17}$$

3.

$$\exp(ian_\alpha\hat{\sigma}^\alpha) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(ian_\alpha\hat{\sigma}^\alpha)^k}{k!} \tag{18}$$

Найдём $(n_\alpha\hat{\sigma}^\alpha)^2$. Для этого воспользуемся правилом перемножения матриц Паули из п. 2:

$$n_\alpha\hat{\sigma}^\alpha n_\beta\hat{\sigma}^\beta = \hat{\mathbb{I}} + i\epsilon^{\alpha\beta\gamma}n_\alpha n_\beta\hat{\sigma}_\gamma = \hat{\mathbb{I}} \tag{19}$$

Из этого следует:

$$(n_\alpha\hat{\sigma}^\alpha)^{2k} = \hat{\mathbb{I}}, \quad (n_\alpha\hat{\sigma}^\alpha)^{2k+1} = n_\alpha\hat{\sigma}^\alpha, \quad k \in \{0\} \cup \mathbb{N} \tag{20}$$

$$\exp(ian_\alpha\hat{\sigma}^\alpha) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k a^{2k}(n_\alpha\hat{\sigma}^\alpha)^{2k}}{(2k)!} + i\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k a^{2k+1}(n_\alpha\hat{\sigma}^\alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!} \tag{21}$$

$$\exp(ian_\alpha\hat{\sigma}^\alpha) = \mathbb{I}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k a^{2k}}{(2k)!} + in_\alpha\hat{\sigma}^\alpha\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k a^{2k+1}}{(2k+1)!} \tag{22}$$

$$\boxed{\exp(ian_\alpha\hat{\sigma}^\alpha) = \mathbb{I}\cos a + in_\alpha\hat{\sigma}^\alpha\sin a} \tag{23}$$

Задачи (80 баллов)

Задача 1.* Осцилляция Раби (50 баллов).

На двухуровневую систему накладывается периодическое поле, которое может вызывать переходы между этой парой уровней:

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & Ve^{-i\omega t} \\ Ve^{i\omega t} & \varepsilon_2 \end{pmatrix} \tag{24}$$

В начальный момент времени система находилась в состоянии $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle$. Определите вероятность обнаружить её в состоянии $|\downarrow\rangle$ через произвольное время t. Что происходит при резонансе, когда отстройка частоты $\delta \equiv \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \hbar\omega$ обращается в нуль?

Указание: покажите, что от зависимости гамильтониана от времени можно избавиться «переходом во вращающуюся систему отсчёта» (rotating wave approximation) – унитарным преобразованием (см. упражнения 2, 3) вида $\hat{U}(t) = e^{i\hat{\sigma}_z\omega_0 t}$. Чему равна соответствующая частота

ω_0?

Решение.

Воспользуемся п. 3 из упражнения 3:

$$U(t) = e^{i\hat{\sigma}_z\omega_0 t} = \cos\omega_0 t + i\sin\omega_0 t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix}, \quad U^\dagger(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_0 t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix} \tag{25}$$

Воспользуемся п. 2 из упражнения 2:

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - i\hbar\hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger \tag{26}$$

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & Ve^{i(2\omega_0-\omega)t} \\ Ve^{-i(2\omega_0-\omega)t} & \varepsilon_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 - \hbar\omega_0 & Ve^{i(2\omega_0-\omega)t} \\ Ve^{-i(2\omega_0-\omega)t} & \varepsilon_2 + \hbar\omega_0 \end{pmatrix} \tag{27}$$

Избавимся от зависимости от времени, подобрав соответствующее ω_0:

$$\boxed{\omega_0 = \frac{\omega}{2}} \tag{28}$$

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 - \frac{\hbar\omega}{2} & V \\ V & \varepsilon_2 + \frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix} \tag{29}$$

При этом переходе собственные векторы гамильтониана меняются на фазу:

$$\begin{pmatrix} |1'\rangle \\ |2'\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t}|1\rangle \\ e^{-i\omega_0 t}|2\rangle \end{pmatrix} \tag{30}$$

Собственные числа дают спектр возможных значений энергии:

$$\left(\varepsilon_1 - \frac{\hbar\omega}{2} - E\right)\left(\varepsilon_2 + \frac{\hbar\omega}{2} - E\right) - V^2 = 0 \tag{31}$$

$$E_{1,2} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \pm \sqrt{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 + \hbar\omega)^2 + 4V^2}}{2} \tag{32}$$

Соответствующие нормированные собственные состояния системы:

$$|1'\rangle = \frac{1}{C_1}\begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2-\hbar\omega+\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}}{2V} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |2'\rangle = \frac{1}{C_2}\begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2-\hbar\omega-\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}}{2V} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{33}$$

$$|1\rangle = e^{-i\omega_0 t}|1'\rangle = \frac{e^{-i\omega_0 t}}{C_1}\begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2-\hbar\omega+\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}}{2V} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{e^{-i\omega_0 t}}{C_1}\begin{pmatrix} a \\ 1 \end{pmatrix} = e^{-i\omega_0 t}\frac{a|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{C_1} \tag{34}$$

$$|2\rangle = e^{i\omega_0 t}|2'\rangle = \frac{e^{i\omega_0 t}}{C_2}\begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_1-\varepsilon_2-\hbar\omega-\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}}{2V} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{e^{i\omega_0 t}}{C_2}\begin{pmatrix} b \\ 1 \end{pmatrix} = e^{i\omega_0 t}\frac{b|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{C_2} \tag{35}$$

Разложим начальное условие по стационарным состояниям:

$$|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle = \frac{C_1 e^{i\omega_0 t}|1\rangle - C_2 e^{-i\omega_0 t}|2\rangle}{a - b} \tag{36}$$

Дальнейшая эволюция:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{C_1 e^{i\omega_0 t} e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} |1\rangle - C_2 e^{-i\omega_0 t} e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} |2'\rangle}{a-b} = \frac{e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}(a|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) - e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}(b|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)}{a-b} \tag{37}$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{e^{-\frac{i(\varepsilon_1+\varepsilon_2)t}{2\hbar}}}{a-b}\left(e^{-\frac{i\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}t}{2\hbar}}(a|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) - e^{\frac{i\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}t}{2\hbar}}(b|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)\right) \tag{38}$$

$$\psi_\downarrow(t) = \langle\downarrow|\psi(t)\rangle = \frac{e^{-\frac{i(\varepsilon_1+\varepsilon_2)t}{2\hbar}}}{a-b}\left(e^{-\frac{i\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}t}{2\hbar}} - e^{\frac{i\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}t}{2\hbar}}\right) \tag{39}$$

Вероятность обнаружить систему в состоянии $|\downarrow\rangle$ через время t:

$$P_\downarrow(t) = |\psi_\downarrow(t)|^2 = \frac{4\sin^2\left(\frac{\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}t}{2\hbar}\right)}{(a-b)^2} \tag{40}$$

$$\boxed{P_\downarrow(t) = \frac{4V^2\sin^2\left(\frac{\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}t}{2\hbar}\right)}{(\varepsilon_2-\varepsilon_1+\hbar\omega)^2+4V^2}} \tag{41}$$

Случай резонанса:

$$\delta \equiv \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \hbar\omega = 0 \tag{42}$$

$$\boxed{P_\downarrow(t) = \sin^2\frac{Vt}{\hbar}} \tag{43}$$

Задача 2. Два спина (30 баллов).

Найдите уровни энергии и собственные состояния для следующего гамильтониана, описывающего систему двух взаимодействующих спинов 1/2:

$$\hat{H} = -J(\vec{\sigma}_1 \otimes \vec{\sigma}_2) = -J(\hat{\sigma}_1^x \otimes \hat{\sigma}_2^x + \hat{\sigma}_1^y \otimes \hat{\sigma}_2^y + \hat{\sigma}_1^z \otimes \hat{\sigma}_2^z) \tag{44}$$

Решение.

$$\hat{H} = -J\left(\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0&0&0&-1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\-1&0&0&0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\right) \tag{45}$$

$$\hat{H} = J\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&2&0\\0&2&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix} \tag{46}$$

Собственные числа дают спектр возможных значений энергии:

$$\boxed{E_1 = 3J, \quad E_{2,3,4} = -J} \tag{47}$$

Соответствующие нормированные собственные состояния системы:

$$\boxed{|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\-1\\1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle), \quad |2\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix} = |\downarrow\downarrow\rangle} \tag{48}$$

$$\boxed{|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle), \quad |4\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} = |\uparrow\uparrow\rangle} \tag{49}$$

2 Матрица плотности

Упражнения (20 баллов)

Упражнение 1. (10 баллов).
Вычислите среднее значение спина $\langle\vec{S}\rangle$ и его дисперсию $\langle(\vec{S}-\langle\vec{S}\rangle)^2\rangle$ для чистого $|\chi\rangle = \frac{|\uparrow\rangle+|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$ и смешанного $\hat{\rho} = \frac{\hat{\mathbb{P}}_\uparrow+\hat{\mathbb{P}}_\downarrow}{2}$ состояний спина 1/2. *Комментарий*: первая величина – это вектор, а вторая – это скаляр, длина вектора. *Указание*: Для частицы со спином 1/2 (например, электрон) *оператор спина* (собственного момента) равен $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$ (то есть $\hat{S}_x = (\hbar/2)\hat{\sigma}_x$ и т. д.).

Решение.
Решим упражнение для чистого состояния:

$$|\chi\rangle\langle\chi| = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix} \tag{50}$$

$$\langle\hat{S}_x\rangle = \mathrm{Tr}(|\chi\rangle\langle\chi|\,\hat{S}_x) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{2} \tag{51}$$

$$\langle\hat{S}_y\rangle = \mathrm{Tr}(|\chi\rangle\langle\chi|\,\hat{S}_y) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\right) = 0 \tag{52}$$

$$\langle\hat{S}_z\rangle = \mathrm{Tr}(|\chi\rangle\langle\chi|\,\hat{S}_z) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right) = 0 \tag{53}$$

Среднее значение спина:

$$\boxed{\langle\vec{S}\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}} \tag{54}$$

$$\vec{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2+\sigma_y^2+\sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \tag{55}$$

$$\langle\vec{S}\rangle^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \tag{56}$$

Дисперсия:

$$\boxed{\langle\vec{S}^2\rangle - \langle\vec{S}\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2}} \tag{57}$$

Решим упражнение для смешанного состояния:

$$\hat{\rho} = \frac{\hat{\mathbb{P}}_\uparrow + \hat{\mathbb{P}}_\downarrow}{2} = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle] \langle\uparrow| + |\downarrow\rangle] \langle\downarrow|) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \tag{58}$$

$$\langle\hat{S}_x\rangle = \mathrm{Tr}(|\chi\rangle\langle\chi|\hat{S}_x) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\right) = 0 \tag{59}$$

$$\langle\hat{S}_y\rangle = \mathrm{Tr}(|\chi\rangle\langle\chi|\hat{S}_y) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\right) = 0 \tag{60}$$

$$\langle\hat{S}_z\rangle = \mathrm{Tr}(|\chi\rangle\langle\chi|\hat{S}_z) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right) = 0 \tag{61}$$

Среднее значение спина:

$$\boxed{\langle\vec{S}\rangle = 0} \tag{62}$$

$$\vec{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \tag{63}$$

$$\langle\vec{S}\rangle^2 = 0 \tag{64}$$

Дисперсия:

$$\boxed{\langle\vec{S}^2\rangle - \langle\vec{S}\rangle^2 = \frac{3\hbar^2}{4}} \tag{65}$$

Упражнение 2. (10 баллов).
Предположим, наблюдатель С хочет придумать эксперимент, который сможет отличить состояние «ЭПР» от классически запутанного («Носки») (из семинара). Какую наблюдаемую ему нужно придумать? Выразите её через матрицы Паули (и их тензорные произведения)?
Решение.
Наблюдаемая – гамильтониан из задачи 2 семинара 1:

$$\hat{H} = -J(\hat{\sigma}_1^x \otimes \hat{\sigma}_2^x + \hat{\sigma}_1^y \otimes \hat{\sigma}_2^y + \hat{\sigma}_1^z \otimes \hat{\sigma}_2^z) \tag{66}$$

Для «ЭПР»:

$$\mathrm{tr}(\hat{\rho}_{AB}\hat{H}) = \mathrm{tr}\left(\frac{J}{2}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & 0\\ 0 & 2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\right) = J \tag{67}$$

Для «Носок»:

$$\mathrm{tr}(\hat{\rho}_{AB}\hat{H}) = \mathrm{tr}\left(\frac{J}{2}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & 0\\ 0 & 2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{J}{2}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & 0\\ 0 & 2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\right) = -J \tag{68}$$

Как видно, следы не совпадают. Искомая наблюдаемая:

$$\boxed{\hat{H} = -J(\hat{\sigma}_1^x \otimes \hat{\sigma}_2^x + \hat{\sigma}_1^y \otimes \hat{\sigma}_2^y + \hat{\sigma}_1^z \otimes \hat{\sigma}_2^z)} \tag{69}$$

Задачи (80 баллов)

Задача 1. Блоховское представление двухуровневой системы (10 баллов).

1. Покажите, что матрицу плотности произвольной двухуровневой системы самого общего вида можно разложить по матрицам Паули в следующем виде:
$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{n}) \tag{70}$$
где $\boldsymbol{n}$ – какой-то вектор. При каком условии на $\boldsymbol{n}$ это корректная матрица плотности?

2. При каком условии на $\boldsymbol{n}$, эта матрица плотности описывает чистое состояние?

3. Вычислите средние значения $\langle\hat{\sigma}_{x,y,z}\rangle$ по состоянию, описываемому такой матрицей плотности.

Решение.
Пусть с вероятностью p_α система может быть приготовлена в состоянии $|\alpha\rangle$. Тогда для такого усреднения мы можем записать:
$$\langle\hat{O}\rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle = \mathrm{Tr}(|\alpha\rangle\, p_\alpha \langle\alpha|\, \hat{O}) \equiv \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) \tag{71}$$
Матрица плотности:
$$\hat{\rho} = \sum_\alpha p_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{72}$$
Матрица плотности – эрмитов оператор $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$ с нормировкой $\mathrm{Tr}\hat{\rho} = \sum\limits_\alpha p_\alpha = 1$.

Удобно диагонализовать матрицу плотности (любая эрмитова матрица диагонализуема с вещественными собственными числами λ_n):
$$\hat{\rho}\,|n\rangle = \lambda_n\,|n\rangle\,, \tag{73}$$
$$\mathrm{Tr}\hat{\rho} = \sum_n \lambda_n = 1 \tag{74}$$
Матрица плотности неотрицательно определена:
$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle\psi|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle\psi|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = \sum_\alpha p_\alpha |\langle\alpha|\psi\rangle|^2 \geq 0 \tag{75}$$
Следовательно, все $\lambda_n \geq 0$. А поскольку $\sum\limits_n \lambda_n = 1$, то все $\lambda_n \in [0,1]$. Собственные числа λ_n являются вероятностями оказаться в состоянии $|n\rangle$.

1. Матрицы Паули совместно с единичной матрицей $\sigma^0 = \hat{\mathbb{I}}_{2\times2}$ представляют собой базис в пространстве эрмитовых матриц 2×2 (см. упр. 3 недели 1). Поскольку $\mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1$ и $\mathrm{Tr}\sigma_i = 0$, то коэффициент перед $\mathbb{I}$ равен $\frac{1}{2}$:
$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{n}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & 1-n_z \end{pmatrix} \tag{76}$$
$$\det\hat{\rho} = \frac{1}{2}(1 - n_z^2 - n_x^2 - n_y^2) = \frac{1}{2}(1 - \boldsymbol{n}^2) \tag{77}$$
$$\det\hat{\rho} = \prod_n \lambda_n \geq 0 \to \boxed{|\boldsymbol{n}| \leq 1} \tag{78}$$
Таким образом, конец вектора $\boldsymbol{n}$ лежит в шаре радиуса 1.

2. Квантовая система, описываемая какой-то волновой функцией $|\psi\rangle$ (с вероятностью $p = 1$) можно описать на языке матрицы плотности

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle\psi| \tag{79}$$

Состояние, описываемое такой матрицей плотности, носит название *чистого*. В противном случае состояние называется *смешанным*.
Матрица плотности чистого состояния является проектором:

$$\hat{\rho}^2 = |\psi\rangle \langle\psi|\psi\rangle \langle\psi| = |\psi\rangle \langle\psi| = \hat{\rho} \tag{80}$$

$$\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2 = \mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1 \tag{81}$$

В общем случае

$$\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2 = \sum_\alpha p_\alpha^2 \leq \sum_\alpha p_\alpha = \mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1 \tag{82}$$

В случае чистого состояния одно из собственных значений равно 1, остальные равны 0.

$$\det\hat{\rho} = \frac{1}{2}(1 - |\boldsymbol{n}|^2) = 0 \to \boxed{|\boldsymbol{n}| = 1} \tag{83}$$

Таким образом, конец вектора $\boldsymbol{n}$ лежит на сфере радиуса 1.

3. Среднее значение по состоянию:

$$\langle\sigma_i\rangle = \mathrm{Tr}(\rho\sigma_i) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_i + \hat{\sigma}_i{}^2 n_i) = n_i \tag{84}$$

$$\boxed{\langle\sigma_{x,y,z}\rangle = n_{x,y,z}} \tag{85}$$

Задача 2. Термодинамика двухуровневой системы (10 баллов).
Двухуровневая система описывается гамильтонианом $\hat{H} = -\boldsymbol{h}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, где $\boldsymbol{h} = (h_x, h_y, h_z)$, и находится при температуре T. Вычислите средние значения $\hat{\sigma}_{x,y,z}$. *Указание*: воспользуйтесь результатом упражнений из первого семинара.
Решение.
Гиббсовский (канонический) ансамбль:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}e^{-\beta\hat{H}}, \quad Z = \mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{H}}) = \mathrm{Tr}(e^{\beta\vec{h}\cdot\hat{\vec{\sigma}}}) \tag{86}$$

Воспользуемся упр. 3, п. 3 семинара 1 (там был случай $h = 1$, но он очевидным образом обобщается на случай $h \neq 1$):

$$e^{\beta\boldsymbol{h}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \mathbb{I}\cosh\beta h + \frac{\sinh\beta h}{h}\boldsymbol{h}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} \tag{87}$$

$$Z = \mathrm{Tr}\left(\mathbb{I}\cosh\beta h + \frac{\sinh\beta h}{h}\boldsymbol{h}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = 2\cosh\beta h \tag{88}$$

$$\hat{\rho} = \frac{\mathbb{I}\cosh\beta h + \frac{\sinh\beta h}{h}\boldsymbol{h}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2\cosh\beta h} = \frac{1}{2}\mathbb{I} + \frac{1}{2h}\boldsymbol{h}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\tanh\beta h = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + \frac{h_z}{h}\tanh\beta h & \frac{h_x - ih_y}{h}\tanh\beta h \\ \frac{h_x + ih_y}{h}\tanh\beta h & 1 + \frac{h_z}{h}\tanh\beta h \end{pmatrix} \tag{89}$$

$$\langle\hat{\sigma}_\alpha\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\sigma_\alpha) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\hat{\sigma}_\alpha + \frac{h_\alpha \tanh\beta h}{h}\mathbb{I}\right) = \frac{h_\alpha}{h}\tanh\beta h \tag{90}$$

$$\boxed{\langle\hat{\sigma}_x\rangle = \frac{h_x}{h}\tanh\beta h, \quad \langle\hat{\sigma}_y\rangle = \frac{h_y}{h}\tanh\beta h, \quad \langle\hat{\sigma}_z\rangle = \frac{h_z}{h}\tanh\beta h} \tag{91}$$

Задача 3.* Квантовый парадокс Зенона (30 баллов).
Рассмотрите двухуровневую систему, описываемую следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta \\ -\Delta & E_0 \end{pmatrix} \tag{92}$$

В начальный момент система приготовлена в состоянии $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$. Если бы мы позволили системе эволюционировать самой по себе, то она бы совершала осцилляции Раби; в частности, через время $T = \frac{\pi\hbar}{2\Delta}$ мы бы обнаружили её в состоянии $|\downarrow\rangle$ с вероятностью $P_\downarrow(T) = 1$. Однако теперь вместо этого через каждый промежуток времени $\tau \ll T$ мы проводим измерение наблюдаемой $\hat{\sigma}^z$. Определите вероятность $P_\downarrow(T)$ в таком случае.
Решение.
Волновая функция в начальный момент:

$$|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle \tag{93}$$

Матрица плотности в начальный момент:

$$\hat{\rho}(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{94}$$

Оператор эволюции:

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{it}{\hbar}(\Delta\hat{\sigma}_x - E_0\hat{\mathbb{I}})\right) = \exp\left(\frac{it}{\hbar}\Delta\hat{\sigma}_x\right)\exp\left(-\frac{it}{\hbar}E_0\right) \tag{95}$$

Воспользуемся упражнением 3 семинара 1:

$$\exp\left(\frac{it}{\hbar}\Delta\hat{\sigma}_x\right) = \hat{\mathbb{I}}\cos\frac{\Delta t}{\hbar} + i\hat{\sigma}_x\sin\frac{\Delta t}{\hbar} \tag{96}$$

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\Delta t}{\hbar} & i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} \\ i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} & \cos\frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix}\exp\left(-\frac{it}{\hbar}E_0\right) \tag{97}$$

Действие оператора эволюции:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle, \quad \langle\psi(t)| = \langle\psi(0)|\hat{U}^\dagger(t) \tag{98}$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t) = \\ = \begin{pmatrix} \cos\frac{\Delta t}{\hbar} & i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} \\ i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} & \cos\frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\Delta t}{\hbar} & -i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} \\ -i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} & \cos\frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\Delta t}{\hbar} & -\frac{i}{2}\sin\frac{2\Delta t}{\hbar} \\ \frac{i}{2}\sin\frac{2\Delta t}{\hbar} & \sin^2\frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{99}$$

После измерения происходит редукция фон-Неймана, приводящая к дефазировке:

$$\hat{\rho}(\tau) = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & 0 \\ 0 & \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \tag{100}$$

Вероятность направлений спина после 1 измерения:

$$P_\uparrow(\tau) = \rho_{11} = \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar}, \quad P_\downarrow(\tau) = \rho_{22} = \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \tag{101}$$

Те же вероятности были получены в разделе 1.4 без матрицы плотности. Найдём марицу плотности $\hat{\rho}(n\tau)$ через $\hat{\rho}((n-1)\tau)$.

$$\hat{U}(\tau)\hat{\rho}((n{-}1)\tau)\hat{U}^\dagger(\tau) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\Delta t}{\hbar} & i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} \\ i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} & \cos\frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_\uparrow((n-1)\tau) & 0 \\ 0 & P_\downarrow((n-1)\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\Delta t}{\hbar} & -i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} \\ -i\sin\frac{\Delta t}{\hbar} & \cos\frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} P_\uparrow((n-1)\tau)\cos^2\frac{\Delta t}{\hbar} + P_\downarrow((n-1)\tau)\sin^2\frac{\Delta t}{\hbar} & -\frac{i}{2}(P_\uparrow((n-1)\tau) - P_\downarrow((n-1)\tau))\sin\frac{2\Delta t}{\hbar} \\ \frac{i}{2}(P_\uparrow((n-1)\tau) - P_\downarrow((n-1)\tau))\sin\frac{2\Delta t}{\hbar} & P_\uparrow((n-1)\tau)\sin^2\frac{\Delta t}{\hbar} + P_\downarrow((n-1)\tau)\cos^2\frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix}$$

После дефазировки:

$$\hat{\rho}(n\tau) = \begin{pmatrix} P_\uparrow((n-1)\tau)\cos^2\frac{\Delta t}{\hbar} + P_\downarrow((n-1)\tau)\sin^2\frac{\Delta t}{\hbar} & 0 \\ 0 & P_\uparrow((n-1)\tau)\sin^2\frac{\Delta t}{\hbar} + P_\downarrow((n-1)\tau)\cos^2\frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix}$$

Вероятность направлений спина после n измерений:

$$P_\uparrow(n\tau) = P_\downarrow((n-1)\tau)\sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} + P_\uparrow((n-1)\tau)\cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \tag{102}$$

$$P_\downarrow(n\tau) = P_\downarrow((n-1)\tau)\cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} + P_\uparrow((n-1)\tau)\sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \tag{103}$$

Таким образом, нужно решить векторное рекуррентное уравнение (или, что эквивалентно, систему уравнений):

$$\begin{pmatrix} P_\uparrow(n\tau) \\ P_\downarrow(n\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \\ \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_\uparrow((n-1)\tau) \\ P_\downarrow((n-1)\tau) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} P_\uparrow(0) \\ P_\downarrow(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{104}$$

Решение этого уравнения:

$$\begin{pmatrix} P_\uparrow(n\tau) \\ P_\downarrow(n\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \\ \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{105}$$

Диагонализуем матрицу:

$$\begin{pmatrix} \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \\ \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos\frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{106}$$

$$\begin{pmatrix} \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \\ \sin^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} & \cos^2\frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix}^n = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} & 1 - \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} \\ 1 - \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} & 1 + \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} P_\uparrow(n\tau) \\ P_\downarrow(n\tau) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} & 1 - \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} \\ 1 - \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} & 1 + \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} \\ 1 - \cos^n\frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \tag{107}$$

Учитывая, что $T = n\tau$, получим

$$P_\downarrow(T) = \frac{1}{2}\left(1 - \cos^{\frac{T}{\tau}}\frac{2\Delta\tau}{\hbar}\right) \tag{108}$$

По формуле Тейлора до 2 порядка:

$$\boxed{P_\downarrow(T) = \frac{\Delta^2}{\hbar^2}T\tau} \tag{109}$$

Задача 4.* Дефазировка (30 баллов).
Спин-1/2 находится в магнитном поле, направленном вдоль оси z:

$$\hat{H} = -B\hat{\sigma}^z \tag{110}$$

В результате взаимодействия с окружающей средой, магнитное поле испытывает случайные флуктуации: $B \equiv B_0 + \delta B(t)$, которые мы предполагаем гауссовыми с нулевым средним и коррелятором $\langle \delta B(t)\delta B(t')\rangle = \Gamma\delta(t-t')$. Пусть в начальный момент времени, матрица плотности была самого общего вида:

$$\hat{\rho}(0) = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \tag{111}$$

Определите зависимость усреднённой по таким флуктуациям матрицы плотности от времени $\langle\hat{\rho}(t)\rangle$.

Указание: в процессе решения вам будет необходимо вычислять средние типа $\left\langle \exp\left(i\int\limits_{t_1}^{t_2} \delta B(t)dt \right) \right\rangle$.

Это предлагается сделать двумя способами:

1. Воспользоваться теоремой Вика, из которой следует, что для любой гауссовой величины с нулевым средним выполнено $\langle e^A\rangle = e^{\frac{1}{2}\langle A^2\rangle}$.
2. Дискретизовать время, разбив на маленькие участки $t \in (n\delta t, (n+1)\delta t)$ и предположив $\delta B_n = \text{const}$; тогда такой локальный по времени коррелятор эквивалентен $\langle \delta B_n \delta B_m\rangle = \delta_{nm}\frac{\Gamma}{\delta t}$. В результате вы получите дискретное Гауссово распределение, с которым вы уже умеете работать.

Решение.
Уравнение Гейзенберга для эволюции матрицы плотности $\hat{\rho}(t)$:

$$\frac{\partial\hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\rho}(t), \hat{H}(t)] = -\frac{iB(t)}{\hbar}[\hat{\rho}(t), \hat{\sigma}^z] \tag{112}$$

$$[\hat{\rho}(t), \hat{\sigma}^z] = \left[\begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & -\rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & -\rho_{22}(t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ -\rho_{21}(t) & -\rho_{22}(t) \end{pmatrix} \tag{113}$$

$$\frac{\partial\hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{iB(t)}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & 2\rho_{12}(t) \\ -2\rho_{21}(t) & 0 \end{pmatrix} \tag{114}$$

$$\frac{\partial\hat{\rho}_{11}(t)}{\partial t} = \frac{\partial\hat{\rho}_{22}(t)}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial\hat{\rho}_{12}(t)}{\partial t} = \frac{2iB}{\hbar}\hat{\rho}_{12}(t), \quad \frac{\partial\hat{\rho}_{21}(t)}{\partial t} = -\frac{2iB}{\hbar}\hat{\rho}_{21}(t) \tag{115}$$

$$\hat{\rho}(t) = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{11}(t_0) & \hat{\rho}_{12}(t_0)\exp\left(\frac{2i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} B(t')dt'\right) \\ \hat{\rho}_{21}(t_0)\exp\left(-\frac{2i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} B(t')dt'\right) & \hat{\rho}_{22}(t_0) \end{pmatrix} \tag{116}$$

$$\hat{\rho}(t) = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{11}(t_0) & \hat{\rho}_{12}(t_0)\exp\left(\frac{2i}{\hbar}B_0(t-t_0)\right)\exp\left(\frac{2i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} \delta B(t')dt'\right) \\ \hat{\rho}_{21}(t_0)\exp\left(-\frac{2i}{\hbar}B_0(t-t_0)\right)\exp\left(-\frac{2i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} \delta B(t')dt'\right) & \hat{\rho}_{22}(t_0) \end{pmatrix}$$

Усредним матрицу плотности $\hat{\rho}$ по случайным флуктуациям двумя способами:

1. Воспользуемся теоремой Вика:

$$\left\langle \exp\left(\frac{2i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t}\delta B(t')dt'\right)\right\rangle = \exp\left(-\frac{2}{\hbar^2}\left\langle\left(\int\limits_{t_0}^{t}\delta B(t')dt'\right)^2\right\rangle\right) =$$
$$= \exp\left(-\frac{2}{\hbar^2}\left\langle\int\limits_{t_0}^{t}\delta B(t')dt'\int\limits_{t_0}^{t}\delta B(t'')dt''\right\rangle\right) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar^2}\int\limits_{t_0}^{t}\int\limits_{t_0}^{t}\left\langle\delta B(t')\delta B(t'')\right\rangle dt'dt''\right) =$$
$$= \exp\left(-\frac{2}{\hbar^2}\int\limits_{t_0}^{t}\int\limits_{t_0}^{t}\Gamma\delta(t'-t'')dt'dt''\right) = \exp\left(-\frac{2\Gamma}{\hbar^2}\int\limits_{t_0}^{t}dt''\right) = \exp\left(-\frac{2\Gamma}{\hbar^2}(t-t_0)\right) \quad (117)$$

$$\boxed{\langle\hat{\rho}(t)\rangle = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{11}(t_0) & \hat{\rho}_{12}(t_0)\exp\left(\frac{2(iB_0\hbar-\Gamma)}{\hbar^2}(t-t_0)\right) \\ \hat{\rho}_{21}(t_0)\exp\left(-\frac{2(iB_0\hbar-\Gamma)}{\hbar^2}(t-t_0)\right) & \hat{\rho}_{22}(t_0)\end{pmatrix}} \quad (118)$$

2. Дискретизуем время:

$$\left\langle \exp\left(\frac{2i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t}\delta B(t')dt'\right)\right\rangle = \left\langle \exp\left(\frac{2i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\delta B_n\delta t\right)\right\rangle = \left\langle\prod_{n=1}^{N}\exp\left(\frac{2i\delta t}{\hbar}\delta B_n\right)\right\rangle \quad (119)$$

где $N = \frac{t-t_0}{\delta t}$. Разложим каждую экспоненту по формуле Тейлора до 1 порядка:

$$\exp\left(\frac{2i\delta t}{\hbar}\delta B_n\right) = 1 + \frac{2i\delta t}{\hbar}\delta B_n - \frac{2(\delta t)^2}{\hbar^2}(\delta B_n)^2 \quad (120)$$

Поскольку δB_n в каждой экспоненте независимы, то

$$\left\langle\prod_{n=1}^{N}\exp\left(\frac{2i\delta t}{\hbar}\delta B_n\right)\right\rangle = \prod_{n=1}^{N}\left\langle\exp\left(\frac{2i\delta t}{\hbar}\delta B_n\right)\right\rangle = \prod_{n=1}^{N}\left\langle 1 + \frac{2i\delta t}{\hbar}\delta B_n - \frac{2(\delta t)^2}{\hbar^2}(\delta B_n)^2\right\rangle =$$
$$= \prod_{n=1}^{N}\left(1 - \frac{2\delta t}{\hbar^2}\Gamma\right) = \prod_{n=1}^{N}\left(1 - \frac{2\Gamma(t-t_0)}{\hbar^2 N}\right)^N \quad (121)$$

Устремим число слагаемых в разбиении $N\to\infty$ и воспользуемся 2 замечательным пределом:

$$\left\langle\prod_{n=1}^{N}\exp\left(\frac{2i\delta t}{\hbar}\delta B_n\right)\right\rangle = \exp\left(-\frac{2\Gamma}{\hbar^2}(t-t_0)\right) \quad (122)$$

Таким образом, получаем тот же ответ:

$$\boxed{\langle\hat{\rho}(t)\rangle = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{11}(t_0) & \hat{\rho}_{12}(t_0)\exp\left(\frac{2(iB_0\hbar-\Gamma)}{\hbar^2}(t-t_0)\right) \\ \hat{\rho}_{21}(t_0)\exp\left(-\frac{2(iB_0\hbar-\Gamma)}{\hbar^2}(t-t_0)\right) & \hat{\rho}_{22}(t_0)\end{pmatrix}} \quad (123)$$

3 Связанные состояния. Мелкая яма

Упражнения (15 баллов)

Упражнение 1. Измерение (5 баллов).
Состояние трёхмерной частицы описывается нормированной волновой функцией $\psi(x, y, z)$. Какова вероятность того, что частица находится в интервале $z_1 < z < z_2$, а её импульс при этом — в интервале $p_1 < p_y < p_2$?
Решение.
Преобразование Фурье волновой функции $\psi(x, y, z)$ по y:

$$\Psi(x, p_y, z) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \psi(x, y, z) \tag{124}$$

Плотность вероятности:

$$\rho = |\Psi(x, p_y, z)|^2 = \left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \psi(x, y, z) \right|^2 \tag{125}$$

Искомая вероятность:

$$P = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{p_1}^{p_2} \int\limits_{z_1}^{z_2} dx \frac{dp_y}{2\pi\hbar} dz \rho \tag{126}$$

$$\boxed{P = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{p_1}^{p_2} \int\limits_{z_1}^{z_2} dx \frac{dp_y}{2\pi\hbar} dz \left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \psi(x, y, z) \right|^2} \tag{127}$$

Упражнение 2. Прямоугольная яма (10 баллов).
В стандартном курсе квантовой механики вы наверняка сталкивались с задачей о частице в прямоугольной яме:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & -\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{128}$$

Продемонстрируйте, что в случае, когда эта яма — мелкая, точное решение совпадает с приближённой формулой для мелкой ямы.
Решение.
Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - U(x))\psi(x) \tag{129}$$

Подставим $U(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \begin{cases} E\psi(x), & x \in (-\infty, -\frac{a}{2}) \cup (\frac{a}{2}, \infty) \\ (E + U_0)\psi(x), & -\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2} \end{cases} \tag{130}$$

Условие связанного состояния:

$$-U_0 < E < 0 \tag{131}$$

Введём обозначения:

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2} \tag{132}$$

Поскольку потенциал $U(x)$ – чётная функция, то и гамильтониан $H(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$ чётный и коммутирует с оператором инверсии. Собственные функции оператора инверсии – чётные и нечётные функции. Будем искать чётные $\psi(x)$. Из существования нормировки $\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ следует, что в решении нужно оставить только затухающие экспоненты:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{\kappa x}, \quad x < -\frac{a}{2} \\ \psi_{II}(x) = B\cos kx, \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ \psi_{III}(x) = Ae^{-\kappa x}, \quad x > \frac{a}{2} \end{cases} \tag{133}$$

Запишем граничные условия (из чётности достаточно их записать в одной точке $x = \frac{a}{2}$):

$$\psi_{II}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_{III}\left(\frac{a}{2}\right), \quad \psi'_{II}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi'_{III}\left(\frac{a}{2}\right) \tag{134}$$

$$Ae^{\frac{-\kappa a}{2}} = B\cos\frac{ka}{2}, \quad -\kappa Ae^{\frac{-\kappa a}{2}} = -\kappa B\sin\frac{ka}{2} \tag{135}$$

$$\tan\frac{ka}{2} = \frac{\kappa}{k} > 0 \tag{136}$$

Вернёмся к начальным величинам:

$$\tan\sqrt{\frac{m(E+U_0)}{2}}\frac{a}{\hbar} = \sqrt{-\frac{E}{E+U_0}} \tag{137}$$

В случае мелкой ямы:

$$U_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad |E| < U_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{138}$$

В случае нечётных функций $\tan\frac{ka}{2}$ получился бы отрицательным и условие мелкой ямы выполниться бы не могло. Поскольку $\sqrt{\frac{m(E+U_0)}{2}}\frac{a}{\hbar}$ мало, то и $\sqrt{-\frac{E}{E+U_0}}$ тоже, значит $E \ll U_0$

$$\sqrt{\frac{mU_0}{2}}\frac{a}{\hbar} = \sqrt{-\frac{E}{U_0}} \tag{139}$$

$$\boxed{E = -\frac{ma^2U_0^2}{2\hbar^2}} \tag{140}$$

Сравниваем с формулой мелкой ямы:

$$\boxed{|E| = \frac{m}{2\hbar^2}\left(\int\limits_{-\infty}^{\infty} U(x)dx\right)^2 = \frac{ma^2U_0^2}{2\hbar^2}} \tag{141}$$

Как видно, формулы совпадают.

Задачи (85 баллов)

Задача 1. Каноническое квантование (10 баллов).
Один из способов построения квантовой механики заключается в постулировании коммутационных соотношений, свя-занных с классической скобкой Пуассона: $[\hat{A},\hat{B}] \to i\hbar\{\hat{A},\hat{B}\}$; для канонически сопряжённых операторов координаты иимпульса это даёт $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$.
Пусть известно, что у оператора $\hat{x}$ имеется непрерывный спектр собственных значений $\mathbb{R}$, а также известны коммутационные соотношения $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$. Продемонстрируйте, что только этих знаний достаточно, чтобы вывести явный видоператора импульса в координатном представлении $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.
Дополнительно: покажите, что не существует конечномерных представлений этой алгебры: операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}$, определённые таким образом, не могут действовать в гильбертовом пространстве конечной размерности.
Указания:

1. Вычислите по индукции $[\hat{x},\hat{p}^n]$.
2. Оператор трансляции определим стандартным образом как $\hat{T}_a = e^{i\hat{p}a/\hbar}$. Используя предыдущий пункт, вычислите коммутатор $[\hat{x},\hat{T}_a]$.
3. Пусть $|x\rangle$ – базис собственных состояний оператора $\hat{x}$, так что $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$. Покажите, что построенный оператор $\hat{T}_a$ действительно является оператором трансляции: $\hat{T}_a\,|x\rangle = |x-a\rangle$.
4. Используя матричный элемент $\langle x|\hat{T}_a|\psi\rangle$ для инфинитезимальной трансляции $a \to 0$, найдите матричный элемент $\langle x|\hat{p}|\psi\rangle \equiv \hat{p}\psi(x)$.

Решение.
Воспользуемся указаниями:

1. Вычислим $[\hat{x},\hat{p}^n]$ по индукции:
$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \tag{142}$$
$$\begin{aligned}[\hat{x},\hat{p}^n]\psi(x) \equiv \hat{x}\hat{p}^n\psi(x) - \hat{p}^n\hat{x}\psi(x) = \hat{x}\hat{p}^{n-1}\hat{p}\psi(x) - \hat{p}^{n-1}\hat{p}\hat{x}\psi(x) = \hat{x}\hat{p}^{n-1}\hat{p}\psi(x) - \\ - \hat{p}^{n-1}(\hat{x}\hat{p} - i\hbar)\psi(x) = [\hat{x},\hat{p}^{n-1}]\hat{p}\psi(x) + i\hbar\hat{p}^{n-1}\psi(x)\end{aligned} \tag{143}$$
$$\boxed{[\hat{x},\hat{p}^n] = i\hbar n\hat{p}^{n-1}} \tag{144}$$
2. Распишем оператор трансляции в ряд Тейлора:
$$\hat{T}_a = e^{i\hat{p}a/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i\hat{p}a}{\hbar}\right)^n \tag{145}$$
$$[\hat{x},\hat{T}_a] = \left[\hat{x},\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i\hat{p}a}{\hbar}\right)^n\right] = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{ia}{\hbar}\right)^n[\hat{x},\hat{p}^n] \tag{146}$$
Воспользуемся предыдущим пунктом:
$$[\hat{x},\hat{T}_a] = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{ia}{\hbar}\right)^n i\hbar n\hat{p}^{n-1} = -a\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{ia\hat{p}}{\hbar}\right)^n \tag{147}$$
$$\boxed{[\hat{x},\hat{T}_a] = -a\hat{T}_a} \tag{148}$$

3. Воспользуемся предыдущим пунктом:

$$[\hat{x}, \hat{T}_a] |x\rangle = -a\hat{T}_a |x\rangle \tag{149}$$

$$\hat{x}\hat{T}_a |x\rangle - \hat{T}_a\hat{x} |x\rangle = -a\hat{T}_a |x\rangle \tag{150}$$

$$\hat{x}\hat{T}_a |x\rangle = \hat{T}_a x |x\rangle - a\hat{T}_a |x\rangle = (x-a)\hat{T}_a |x\rangle \tag{151}$$

Как видно, действие оператора $\hat{x}$ на $|x-a\rangle$

$$\hat{x} |x-a\rangle = (x-a) |x-a\rangle \tag{152}$$

совпадает с действием на $\hat{T}_a |x\rangle$, следовательно

$$\boxed{\hat{T}_a |x\rangle = |x-a\rangle} \tag{153}$$

4. Для инфинитезимальной трансляции $a \to 0$:

$$\langle x|\hat{T}_a|\psi\rangle = \langle x|\mathbb{I} + i\hat{p}a/\hbar|\psi\rangle = \psi(x) + \frac{ia}{\hbar}\hat{p}\psi(x) \tag{154}$$

$$\langle x|\hat{T}_a|\psi\rangle = \langle \hat{T}_a^\dagger x|\psi\rangle = \langle x+a|\psi\rangle = \psi(x+a) = \psi(x) + a\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} \tag{155}$$

Сравнивая предущие равенства, получаем

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}} \tag{156}$$

Покажем, что не существует конечномерных представлений этой алгебры. От противного, предположим существуют представления $\hat{x}$ и $\hat{p}$ в виде матриц конечного размера $n \times n$.

$$\mathrm{tr}([\hat{x}, \hat{p}]_{n\times n}) = \mathrm{tr}(i\hbar\mathbb{I}_{n\times n}) = i\hbar n \tag{157}$$

$$\mathrm{tr}([\hat{x}, \hat{p}]_{n\times n}) = \mathrm{tr}(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = 0 \tag{158}$$

$i\hbar n \neq 0$, противоречие.

Задача 2. Преобразование Галлилея (10 баллов).
Пусть частица находится в потенциале, который движется со скоростью v:

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x} - vt) \tag{159}$$

Придумайте унитарное преобразование $\hat{U}(t)$ («преобразование Галлилея»), которое приведёт Гамильтониан к аналогичному, но независящему от времени виду:

$$\hat{H}' \equiv \hat{U}(t)\hat{H}(t)\hat{U}^\dagger(t) - i\hbar\hat{U}(t)\partial_t\hat{U}^\dagger(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{160}$$

Запишите явно его действие на произвольную волновую функцию $\langle x|\hat{U}(t)|\psi(t)\rangle$.
Решение.

Избавимся от зависимости от времени в качестве преобразования при помощи оператора трансляции $\hat{T}_{vt}$:

$$\hat{T}_{vt} = \exp\left(vt\frac{\partial}{\partial x}\right) = \exp\left(\frac{ivt}{\hbar}\hat{p}\right), \quad \hat{T}^{\dagger}_{vt} = \hat{T}^{-1}_{vt} = \exp\left(-\frac{ivt}{\hbar}\hat{p}\right) \tag{161}$$

$$\hat{T}_{vt}(t)\hat{H}(t)\hat{T}^{\dagger}_{vt}(t) = \hat{T}_{vt}(t)\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x} - vt)\right)\hat{T}^{\dagger}_{vt}(t) - i\hbar\hat{T}_{vt}(t)\partial_t\hat{T}^{\dagger}_{vt}(t) \tag{162}$$

Поскольку $\left[\hat{T}_{vt}(t), \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] = 0$, то

$$\hat{T}_{vt}(t)\hat{H}(t)\hat{T}^{\dagger}_{vt}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - i\hbar\exp\left(\frac{ivt}{\hbar}\hat{p}\right)\left(-\frac{iv\hat{p}}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{ivt}{\hbar}\hat{p}\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - v\hat{p} \tag{163}$$

Избавимся от слагаемого $-v\hat{p}$ при помощи оператора трансляции по импульсу:

$$\exp\left(a\frac{\partial}{\partial p}\right) = \exp\left(-\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right) \tag{164}$$

Поскольку $[\exp\left(-\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right), V(x)] = 0$, то

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right)\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - v\hat{p}\right)\exp\left(\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right) = \frac{(\hat{p}+a)^2}{2m} - v(\hat{p}+a) + V(\hat{x}) = \\ = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{a\hat{p}}{m} + \frac{a^2}{2m} - v\hat{p} - va + V(\hat{x})\end{aligned} \tag{165}$$

Выберем $a = mv$:

$$\exp\left(-\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right)\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - v\hat{p}\right)\exp\left(\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{mv^2}{2} + V(\hat{x}) \tag{166}$$

Избавимся от слагаемого $-\frac{mv^2}{2}$ при помощи оператора e^{ibt}, который коммутирует и с $\hat{x}$, и с $\hat{p}$:

$$\begin{aligned}\exp(ibt)\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{mv^2}{2} + V(\hat{x})\right)\exp(-ibt) - i\hbar\exp(ibt)(-ib)\exp(-ibt) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{mv^2}{2} + \\ + V(\hat{x}) - \hbar b\end{aligned} \tag{167}$$

Выберем $b = -\frac{mv^2}{2\hbar}$. Таким образом, искомое унитарное преобразование:

$$\boxed{U(t) = \exp\left(-\frac{imv^2t}{2\hbar}\right)\exp\left(-\frac{imv\hat{x}}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{ivt\hat{p}}{\hbar}\right)} \tag{168}$$

Подействуем оператором $\hat{U}(t)$ на функцию ψ:

$$\langle x|\hat{U}(t)|\psi(t)\rangle = \langle\hat{U}^{\dagger}(t)x|\psi(t)\rangle = \langle x + vt|\psi(t)\rangle\exp\left(-\frac{imv(x+vt)}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{imv^2t}{2\hbar}\right) \tag{169}$$

$$\boxed{\langle x|\hat{U}(t)|\psi(t)\rangle = \psi(t, x + vt)\exp\left(-\frac{imv(x+vt)}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{imv^2t}{2\hbar}\right)} \tag{170}$$

Задача 3. Туннельное расщепление (10 баллов).
Рассмотрите две мелкие ямы, моделируемые следующим потенциалом:

$$U(x) = -\frac{\hbar^2\kappa}{m}(\delta(x+L/2)+\delta(x-L/2)) \tag{171}$$

Такая задача включена в стандартный курс квантовой механики; предлагается провести её исследование.

1. Нарисуйте (схематично, но со всеми ключевыми особенностями) зависимость уровней энергии связанных состояний от расстояния между ямами L.

2. Пусть расстояние между ямами много больше характерного масштаба волновых функций для каждой из отдельных ям (туннельный режим), $L \gg \kappa^{-1}$. Определите расщепление между связанными состояниями.

3. Эта задача может быть рассмотрена как модель ковалентной связи. Считая теперь L классической динамической переменной, определите силу (в туннельном режиме) и характер взаимодействия между ямами, если частица находится в основном состоянии.

Решение.

1. Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E-U(x))\psi(x) = E\psi(x) \tag{172}$$

Условие связанного состояния:

$$E < 0 \tag{173}$$

Обозначим $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$.
Поскольку потенциал $U(x)$ – чётная функция, то и гамильтониан $H(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$ чётный и коммутирует с оператором инверсии. Собственные функции оператора инверсии – чётные и нечётные функции. Из существования нормировки $\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ следует, что в решении нужно оставить только затухающие на бесконечности экспоненты.

   (a) Будем искать чётные $\psi(x)$.

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{kx}, \quad x < -\frac{L}{2} \\ \psi_{II}(x) = B\cosh kx, \quad -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \psi_{III}(x) = Ae^{-kx}, \quad x > \frac{L}{2} \end{cases} \tag{174}$$

Запишем граничные условия (из чётности достаточно их записать в одной точке $x = \frac{L}{2}$):

$$\psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = \psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right), \quad \psi'_{III}\left(\frac{L}{2}\right) - \psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = -2k_0\psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \tag{175}$$

$$Ae^{-\frac{kL}{2}} = B\cosh\frac{kL}{2}, \quad A(2\kappa - k)e^{-\frac{kL}{2}} = kB\sinh\frac{kL}{2} \tag{176}$$

$$1 + e^{-y} = \frac{y}{\kappa L}, \quad y = kL \tag{177}$$

Получилось трансцендентное уравнение. Решение $y = 0$ не походит, поскольку $E < 0$. Энергии связанных состояний для чётной функции ψ:

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 y^2}{2mL^2} \tag{178}$$

$$\boxed{E_1 = -\frac{\hbar^2 y^2}{2mL^2}, \quad 1 + e^{-y} = \frac{y}{\kappa L}} \tag{179}$$

(b) Будем искать нечётные $\psi(x)$.

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{kx}, & x < -\frac{L}{2} \\ \psi_{II}(x) = B\sinh kx, & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \psi_{III}(x) = -Ae^{-kx}, & x > \frac{L}{2} \end{cases} \tag{180}$$

Запишем граничные условия (из чётности достаточно их записать в одной точке $x = \frac{L}{2}$):

$$\psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = \psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right), \quad \psi'_{III}\left(\frac{L}{2}\right) - \psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = -2\kappa\psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \tag{181}$$

$$Ae^{-\frac{kL}{2}} = B\sinh\frac{kL}{2}, \quad A(2\kappa - k)e^{-\frac{kL}{2}} = kB\cosh\frac{kL}{2} \tag{182}$$

$$1 - e^{-y} = \frac{y}{\kappa L}, \quad y = kL \tag{183}$$

Получилось трансцендентное уравнение. Решение $y = 0$ не походит, поскольку $E < 0$. Второе решение будет только при $\kappa L \geq 1$ (при $\kappa L = 1$ функции в левой и правой части касаются при $y = 0$). Энергии связанных состояний для нечётной функции ψ:

$$E_2 = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 y^2}{2mL^2} \tag{184}$$

$$\boxed{E_2 = -\frac{\hbar^2 y^2}{2mL^2}, \quad 1 - e^{-y} = \frac{y}{\kappa L}} \tag{185}$$

Графики зависимостей E_1 и E_2 от κL представлены на рис. 1.

2. В туннельном режиме (при $\kappa L \gg 1$) трансцендентные уравнения (177) и (183) удобно решить методом последовательных приближений. Нулевое приближение:

$$y_1^{(0)} = y_2^{(0)} = \kappa L \tag{186}$$

Первое приближение:

$$y_1^{(1)} = \kappa L(1 + e^{-\kappa L}), \quad y_2^{(1)} = \kappa L(1 - e^{-\kappa L}) \tag{187}$$

$$E_1 = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1 + 2e^{-\kappa L}) + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}), \quad E_2 = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1 - 2e^{-\kappa L}) + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}) \tag{188}$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2\kappa^2 e^{-\kappa L}}{m} + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}) \tag{189}$$

$$\boxed{\Delta E = \frac{2\hbar^2\kappa_0^2 e^{-\kappa L}}{m} + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L})} \tag{190}$$

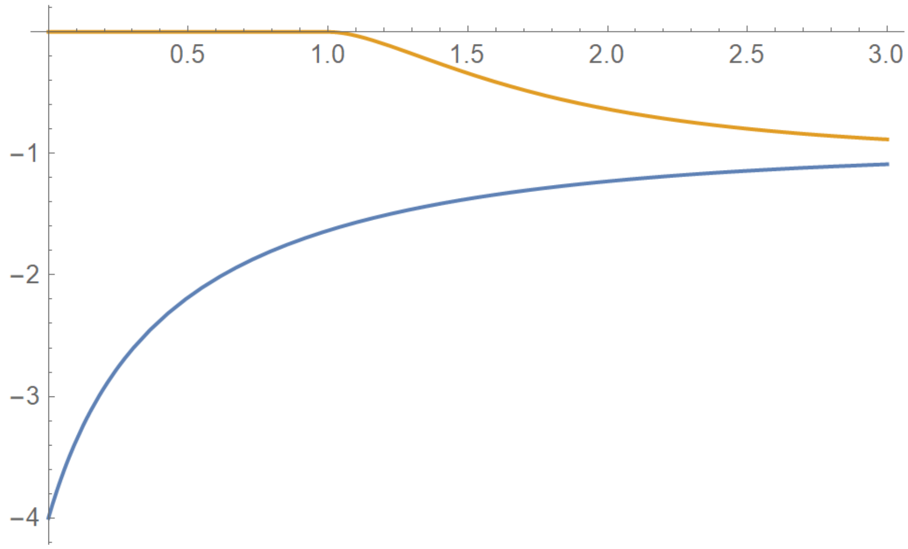

Рис. 1: Графики зависимостей $E_1(\kappa L)$ (синий график) и $E_2(\kappa L)$ (жёлтый график)

3. Основное состояние – состояние с минимально допустимой энергией. В туннельном режиме (при $\kappa L \gg 1$) минимальная энергия

$$E_1(L) = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1 + 2e^{-\kappa L}) + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}) \tag{191}$$

$$\boxed{F = -\frac{\partial E_1}{\partial L} = -\frac{\hbar^2\kappa^3 e^{-\kappa L}}{m} + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L})} \tag{192}$$

Поскольку $F < 0$, то ямы притягиваются.

Задача 3.1. Модель сильной связи (15 баллов).
В туннельном режиме данная задача может также служить иллюстрацией для модели сильной связи, которая описывает пару нижних уровней энергии. Все вычисления в этой задаче необходимо проводить в ведущем приближении по параметру $L \gg \kappa^{-1}$.

1. Спроецируйте гамильтониан на линейное подпространство, натянутое на собственные функции каждой из ям по отдельности: $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\} = \{\psi_0(x + L/2), \psi_0(x - L/2)\}$. Выпишите соответствующую ему матрицу 2×2 в этом базисе.

2. Обратите внимание, что базисные вектора не являются ортогональными. Вычислите матрицу Грама для этого базиса (матрица скалярных произведений $G_{ij} = \langle\psi_i|\psi_j\rangle$).

3. Характеристическое уравнение, определяющее собственные числа для неортонормированного базиса, имеет вид $\det(\hat{H} - E \cdot \hat{G}) = 0$. Найдите собственные уровни энергии в заданном приближении.

Подсказка: обратите внимание: гамильтониан задачи можно записать в виде $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}_1 + \hat{U}_2$, и состояния $|\psi_{1,2}\rangle$ являются собственными для $\hat{H}_{1,2} = \hat{T} + \hat{U}_{1,2}$ соответственно. Это обстоятельство может значительно упростить вычисления. Кроме того, предлагается заметить, что часть членов (какие?) имеет экспоненциальную зависимость $\propto \exp(-\kappa L)$, а часть – зависимость $\propto \exp(-2\kappa L)$, в связи с чем их в ведущем порядке можно положить нулём.

Решение.
Воспользуемся подсказкой: запишем гамильтониан задачи в виде

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}_1 + \hat{U}_2, \quad \hat{U}_1 = -\frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x + L/2), \quad \hat{U}_2 = -\frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x - L/2) \tag{193}$$

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x + L/2), \quad \hat{H}_2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x - L/2) \tag{194}$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}_i \left|\psi_i\right\rangle = E \left|\psi_i\right\rangle \tag{195}$$

Обозначим $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$.

- Рассмотрим $\hat{H}_1$.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x + L/2)\right)\psi = E\psi \tag{196}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{kx}, & x < -\frac{L}{2} \\ \psi_{II}(x) = Be^{-kx}, & x > -\frac{L}{2} \end{cases} \tag{197}$$

Запишем граничные условия:

$$\psi_I\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi_{II}\left(-\frac{L}{2}\right), \quad \psi'_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) - \psi'_I\left(-\frac{L}{2}\right) = -2\kappa\psi_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) \tag{198}$$

$$Ae^{-\frac{kL}{2}} = Be^{\frac{kL}{2}}, \quad -kBe^{\frac{kL}{2}} - kAe^{-\frac{kL}{2}} = -2\kappa Be^{\frac{kL}{2}} \tag{199}$$

$$B = Ae^{-kL}, \quad k = \kappa \tag{200}$$

$$\psi_1(x) = C_1 e^{-\kappa|x+L/2|} \tag{201}$$

Найдём C_1 из нормировки:

$$\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} C_1^2 e^{-\kappa|2x+L|}dx = 2C_1^2\int\limits_0^{\infty} e^{-2kx}dx = \frac{C_1^2}{k} = 1 \to C_1 = \sqrt{k} = \sqrt{\kappa} \tag{202}$$

$$\psi_1(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x+L/2|} \tag{203}$$

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \tag{204}$$

- Рассмотрим $\hat{H}_2$.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x - L/2)\right)\psi = E\psi \tag{205}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{kx}, & x < \frac{L}{2} \\ \psi_{II}(x) = Be^{-kx}, & x > \frac{L}{2} \end{cases} \tag{206}$$

Запишем граничные условия:

$$\psi_I\left(\frac{L}{2}\right)=\psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right),\quad \psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right)-\psi'_I\left(\frac{L}{2}\right)=-2\kappa\psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) \tag{207}$$

$$Ae^{\frac{kL}{2}}=Be^{-\frac{kL}{2}},\quad -kBe^{-\frac{kL}{2}}-kAe^{\frac{kL}{2}}=-2\kappa Be^{-\frac{kL}{2}} \tag{208}$$

$$B=Ae^{kL},\quad k=\kappa \tag{209}$$

$$\psi_2(x)=C_2e^{-\kappa|x-L/2|} \tag{210}$$

Найдём C_2 из нормировки:

$$\langle\psi_2|\psi_2\rangle=\int\limits_{-\infty}^{\infty}C_2^2e^{-\kappa|2x-L|}dx=2C_2^2\int\limits_0^{\infty}e^{-2kx}dx=\frac{C_2^2}{k}=1\to C_2=\sqrt{k}=\sqrt{\kappa} \tag{211}$$

$$\psi_2(x)=\sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x-L/2|} \tag{212}$$

$$E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \tag{213}$$

1. Проекция гамильтониана $\hat{H}$ на линейное подпространство $\{|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{H}|\psi_1\rangle=\langle\psi_1|\hat{H}_1-\frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x-L/2)|\psi_1\rangle=E-\frac{\hbar^2\kappa}{m}\langle\psi_1|\delta(x-L/2)|\psi_1\rangle=\\=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1+2e^{-2\kappa L})=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1+\mathcal{O}(e^{-2\kappa L}))\end{aligned} \tag{214}$$

$$\begin{aligned}\langle\psi_2|\hat{H}|\psi_2\rangle=\langle\psi_2|\hat{H}_2-\frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x+L/2)|\psi_2\rangle=E-\frac{\hbar^2\kappa}{m}\langle\psi_2|\delta(x+L/2)|\psi_2\rangle=\\=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1+2e^{-2\kappa L})=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1+\mathcal{O}(e^{-2\kappa L}))\end{aligned} \tag{215}$$

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{H}|\psi_2\rangle=\langle\psi_1|\hat{H}_2-\frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x+L/2)|\psi_2\rangle=E\langle\psi_1|\psi_2\rangle-\frac{\hbar^2\kappa}{m}\langle\psi_1|\delta(x-L/2)|\psi_2\rangle=\\=-\frac{\hbar^2\kappa^3}{2m}\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-\kappa(|x+L/2|+|x-L/2|)}dx-\frac{\hbar^2\kappa^2}{m}e^{-\kappa L}=-\frac{\hbar^2\kappa^3}{2m}\left(\int\limits_{-\infty}^{-L/2}e^{2\kappa x}dx+\int\limits_{-L/2}^{L/2}e^{-\kappa L}dx+\int\limits_{L/2}^{\infty}e^{-2\kappa x}dx\right)-\\-\frac{\hbar^2\kappa^2}{m}e^{-\kappa L}=-\frac{3\hbar^2\kappa^2}{2m}e^{-\kappa L}-\frac{\hbar^2\kappa^3L}{2m}e^{-kL}=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}e^{-\kappa L}(3+\kappa L)\end{aligned} \tag{216}$$

$$\langle\psi_2|\hat{H}|\psi_1\rangle=\langle\hat{H}^\dagger\psi_2|\psi_1\rangle=\langle\hat{H}\psi_2|\psi_1\rangle=\langle\psi_1|\hat{H}\psi_2\rangle^\dagger=\langle\psi_1|\hat{H}\psi_2\rangle=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}e^{-\kappa L}(3+\kappa L) \tag{217}$$

Соответствующая $\hat{H}$ матрица:

$$\boxed{\hat{H}=\begin{pmatrix}-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1+\mathcal{O}(e^{-2\kappa L})) & -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}e^{-\kappa L}(3+\kappa L)\\ -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}e^{-\kappa L}(3+\kappa L) & -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1+\mathcal{O}(e^{-2\kappa L}))\end{pmatrix}} \tag{218}$$

2. Вычислим скалярные произведения ψ_i, ψ_j:

$$G_{ii} = \langle \psi_i, \psi_i \rangle = 1 \tag{219}$$

$$G_{12} = G_{21} = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\psi_2(x)dx = e^{-\kappa L}(1+\kappa L) \tag{220}$$

Матрица Грама:

$$\boxed{G = \begin{pmatrix} 1 & e^{-\kappa L}(\kappa L+1) \\ e^{-\kappa L}(\kappa L+1) & 1 \end{pmatrix}} \tag{221}$$

3.

$$\hat{H} - E\hat{G} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} - E & -e^{-\kappa L}(\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(3+\kappa L) + E(\kappa L+1)) \\ -e^{-\kappa L}(\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(3+\kappa L) + E(\kappa L+1)) & -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} - E \end{pmatrix} \tag{222}$$

Характеристическое уравнение:

$$\det(\hat{H} - E\hat{G}) = 0 \tag{223}$$

$$\left(\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} + E\right)^2 - e^{-2\kappa L}\left(\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(3+\kappa L) + E(\kappa L+1)\right)^2 = 0 \tag{224}$$

$$\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} + E = \pm e^{-\kappa L}\left(\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(3+\kappa L) + E(\kappa L+1)\right) \tag{225}$$

$$E(1 \mp e^{-\kappa L}(\kappa L+1)) = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(\pm e^{-\kappa L}(3+\kappa L) - 1) \tag{226}$$

$$\boxed{E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}(1 \pm 2e^{-\kappa L}) + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L})} \tag{227}$$

Как видно, формулы (188) и (227) совпадают.

Задача 4. Глубокая мелкая яма (40 баллов).
Найдите энергию основного состояния в регуляризованном одномерном Кулоновском потенциале $U(x) = -\frac{e^2}{\sqrt{x^2+a^2}}$, считая что регуляризация происходит на масштабах меньше Боровского радиуса $a \ll a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$.
Решение.
Найдём фурье-образ потенциала:

$$\bar{U}(p) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} U(x)\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)dx = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^2\exp(-\frac{ipx}{\hbar})}{\sqrt{x^2+a^2}}dx \tag{228}$$

В данном случае нельзя выносить $\bar{U}(p)$ за интеграл, поскольку $\bar{U}(p)$ меняется быстро ($U(x)$ меняется медленно). Поэтому уравнение самосогласования

$$-\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{U}(p)(dp)}{|E| + \frac{p^2}{2m}} = 1 \tag{229}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^2\exp(-\frac{ipx}{\hbar})}{2\pi\hbar\sqrt{x^2+a^2}(|E|+\frac{p^2}{2m})}dx\right)dp=1 \tag{230}$$

Поменяем пределы интегрирования:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^2\exp(-\frac{ipx}{\hbar})}{2\pi\hbar\sqrt{x^2+a^2}(|E|+\frac{p^2}{2m})}dp\right)dx=1 \tag{231}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{m}{2|E|}}\frac{e^2\exp(-\frac{\sqrt{2m|E|}|x|}{\hbar})}{\hbar\sqrt{x^2+a^2}}dx=1 \tag{232}$$

Пусть $k=a\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}=\frac{a}{e}\sqrt{\frac{2|E|}{a_B}}$ и $u=\frac{|x|}{a}$, тогда

$$2\int_0^{\infty}\left(\frac{\exp(-ku)}{\sqrt{1+u^2}}\right)du=\frac{ka_B}{a} \tag{233}$$

В пределе малых k экспоненту можно разложить до 1 члена в ряде Тейлора и взять верхний предел $\frac{1}{k}$:

$$\int_0^{\infty}\left(\frac{\exp(-ku)}{\sqrt{1+u^2}}\right)du\approx\int_0^{1/k}\frac{du}{\sqrt{1+u^2}}=\ln|u+\sqrt{1+u^2}|_0^{1/k}=\ln\left(\frac{2}{k}\right) \tag{234}$$

$$2\ln\left(\frac{2}{k}\right)=\frac{ka_B}{a}\to k\exp\left(\frac{ka_B}{2a}\right)=2 \tag{235}$$

Обозначим $z=\frac{ka_B}{2a}$.

$$z\exp(z)=\frac{a_B}{a} \tag{236}$$

Получилось трансцендентное уравнение. Решим его методом последовательных приближений. Первое приближение (оно плохое, но от него ничего не зависит):

$$z^{(0)}=1 \tag{237}$$

$$z^{(1)}=\ln\left(\frac{a_B}{a}\right) \tag{238}$$

Следующее приближение будет иметь поправку $\mathcal{O}(\ln\ln(a_B/a))$. Таким образом,

$$z=\ln(a_B/a)+\mathcal{O}(\ln\ln(a_B/a))\to k=\frac{2a\ln(a_B/a)}{a_B} \tag{239}$$

Энергия основного состояния

$$\boxed{E=-2\frac{e^2}{a_B}\ln^2\frac{a_B}{a}} \tag{240}$$

4 Непрерывный спектр. Задача рассеяния

Упражнения (25 баллов)

Упражнение 1 (10 баллов).
Отнормируйте на дельта-функцию от энергии состояния непрерывного спектра, инфинитные в обе стороны для случая потенциала, имеющего различные асимптотики на бесконечностях $U(-\infty) = 0$, $U(+\infty) = U_0$. Для простоты, считайте $E > U_0 > 0$.
Решение.
Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi \to \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \tag{241}$$

При $x \to -\infty$:

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{242}$$

$$\psi(x) = a_L e^{ik_L x} + b_L e^{-ik_L x}, \quad k_L = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{243}$$

При $x \to \infty$:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi = 0 \tag{244}$$

$$\psi(x) = a_L e^{ik_R x} + b_L e^{-ik_R x}, \quad k_R = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} \tag{245}$$

Состояния стационарной задачи рассеяния:

$$\psi_k^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{ik_L x} + re^{-ik_L x}, & x \to -\infty \\ te^{ik_R x}, & x \to +\infty \end{cases}, \quad \psi_k^{(-)}(x) = \begin{cases} t'e^{ik_L x}, & x \to -\infty \\ e^{ik_R x} + r'e^{-ik_R x}, & x \to +\infty \end{cases} \tag{246}$$

Вероятности отражения R и прохождения T:

$$R = |r|^2, \quad T = \frac{k_R}{k_L}|t|^2, \quad R + T = 1 \tag{247}$$

$$\langle\psi_{k_L}^{(+)}|\psi_{k'_L}^{(+)}\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\psi_{k_L}^{(+)*}\psi_{k'_L}^{(+)} = \int\limits_{-\infty}^{\Lambda} dx\psi_{k_L}^{(+)*}\psi_{k'_L}^{(+)} + \int\limits_{\Lambda}^{\infty} dx\psi_{k_L}^{(+)*}\psi_{k'_L}^{(+)} + \int\limits_{-\Lambda}^{\Lambda} dx\psi_{k_L}^{(+)*}\psi_{k'_L}^{(+)} \tag{248}$$

При произвольном значении Λ, последний член конечен при $k = k'$ (а значит и при $E = E'$) и предстввляет собой регулярную функцию от k и k'. Поэтому дельта-функциональный вклад возникнуть может только с бесконечности, с первых двух членов. Проводя эти рассуждения для достаточно больших Λ, понимаем, что для нормировки можно пользоваться только асимптотическим представлением волновых функций.

$$\langle\psi_{k_L}^{(+)}|\psi_{k'_L}^{(+)}\rangle = \text{reg.} + \int\limits_{-\infty}^{\Lambda} dx(e^{-ik_L x} + r_k^* e^{ik_L x})(e^{ik'_L x} + r_{k'}e^{-ik'_L x}) + \int\limits_{\Lambda}^{\infty} dx t_k^* e^{-ik_R x} t_{k'} e^{-ik'_R x} \tag{249}$$

Уже в этом выражении заменяя пределы интегрирования на ноль, добавим регулярный вклад, и характер сингулярности не изменится. Поскольку амплитуды являются «медленными огибающими», то в них мы можем положить $k = k'$.

$$\langle \psi^{(+)}_{k_L} | \psi^{(+)}_{k'_L} \rangle = \text{reg.} + \int\limits_{-\infty}^{0} dx (e^{-i(k_L - k'_L)x} + |r_k|^2 e^{i(k_L - k'_L)x}) + \int\limits_{0}^{\infty} dx |t_k|^2 e^{-i(k_R - k'_R)x} \tag{250}$$

$$k_L^2 - k_L'^2 = \frac{2m(E - E')}{\hbar^2} = k_R^2 - k_R'^2 \tag{251}$$

$$k_R - k'_R = \frac{k_R^2 - k_R'^2}{k_R + k'_R} = \frac{k_L^2 - k_L'^2}{k_R + k'_R} \tag{252}$$

$$\int\limits_{0}^{\infty} dx |t_k|^2 e^{-i(k_R - k'_R)x} = \int\limits_{0}^{\infty} du \frac{k_R + k'_R}{k_L + k'_L} |t_k|^2 e^{-i(k_L - k'_L)u} = \int\limits_{0}^{\infty} du \frac{k_R}{k_L} |t_k|^2 e^{-i(k_L - k'_L)u} = \int\limits_{0}^{\infty} dx T e^{-i(k_L - k'_L)x}$$

$$\langle \psi^{(+)}_{k_L} | \psi^{(+)}_{k'_L} \rangle = \text{reg.} + \int\limits_{-\infty}^{0} dx e^{-i(k_L - k'_L)x} + \int\limits_{0}^{\infty} R e^{-i(k_L - k'_L)x} + \int\limits_{0}^{\infty} dx T e^{-i(k_L - k'_L)x} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(k_L - k'_L)x}$$

$$\langle \psi^{(+)}_{k_L} | \psi^{(+)}_{k'_L} \rangle = \text{reg.} + 2\pi\delta(k_L - k'_L) = \text{reg.} + \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m}} \delta(\sqrt{E} - \sqrt{E'}) = \text{reg.} + \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m}} \delta\left(\frac{E - E'}{\sqrt{E} + \sqrt{E'}}\right) \tag{253}$$

$$\boxed{\langle \psi^{(+)}_{E} | \psi^{(+)}_{E'} \rangle = \text{reg.} + 2\pi\hbar \sqrt{\frac{2E}{m}} \delta(E - E')} \tag{254}$$

Упражнение 2 (15 баллов).
Рассмотрите движение одномерной частицы в поле мелкой ямы, $U(x) = -\frac{\kappa}{m}\delta(x)$. Покажите непосредственным вычислением полноту базиса собственных состояний гамильтониана. Рассмотрите как случай $\kappa > 0$ (когда в яме имеется связанное состояние), так и $\kappa < 0$.
Указание: при проверке условия полноты, $\delta(x - x') = \sum\limits_n \psi_n^*(x)\psi_n(x')$, для простоты можете рассмотреть только случай $x, x' > 0$.
Решение.
Состояния стационарной задачи рассеяния:

$$\psi^{(+)}_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x \to -\infty \\ te^{ikx}, & x \to +\infty \end{cases}, \quad \psi^{(-)}_k(x) = \begin{cases} t'e^{ikx}, & x \to -\infty \\ e^{ikx} + r'e^{-ikx}, & x \to +\infty \end{cases} \tag{255}$$

Запишем граничные условия для $\psi^{(+)}_k(0)$:

$$1 + r = t, \quad ikt - (ik - ikr) = -2\kappa t \to t = \frac{ik}{\kappa + ik}, \quad r = \frac{\kappa}{\kappa + ik} \tag{256}$$

$$t' = t, \quad r' = -\frac{r^*}{t^*} t = \frac{\kappa}{ik} \frac{-ik}{\kappa + ik} = -\frac{\kappa}{\kappa + ik} = r \tag{257}$$

$$f(x,x') = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^\infty dk(e^{ik(x-x')} + |r|^2 e^{-ik(x-x')} + |t|^2 e^{-ik(x-x')} +$$

$$+re^{ik(x+x')} + r^* e^{-ik(x+x')}) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^\infty dk(e^{ik(x-x')} + e^{-ik(x-x')}) + \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^\infty dk\left(\frac{\kappa}{\kappa+ik}e^{ik(x+x')} + \frac{1}{2\pi}\frac{\kappa}{\kappa-ik}e^{-ik(x+x')}\right)$$

$$\int\limits_0^\infty dk(e^{ik(x-x')} + e^{-ik(x-x')}) = \int\limits_{-\infty}^\infty dk e^{ik(x-x')} = 2\pi\delta(x-x') \tag{258}$$

$$\int\limits_0^\infty dk\left(\frac{\kappa}{\kappa+ik}e^{ik(x+x')} + \frac{\kappa}{\kappa-ik}e^{-ik(x+x')}\right) = \int\limits_{-\infty}^\infty dk\frac{\kappa}{\kappa+ik}e^{ik(x+x')} = \begin{cases}2\pi\exp(-\kappa(x+x')), & \kappa>0\\ 0, & \kappa<0\end{cases}$$

Последний интеграл взят при помощи вычетов. Рассмотрим случаи:

1. $\kappa < 0$:
$$f(x,x') = \delta(x-x') \tag{259}$$

2. $\kappa > 0$: Добавим к $f(x,x')$ связанное состояние $\psi_0(x)$: $\psi_0^*(x)\psi_0(x') = \kappa e^{-\kappa(|x|+|x'|)}$. Тогда и в этом случае
$$f(x,x') = \delta(x-x') \tag{260}$$

Таким образом, соотношение полноты доказано в обоих случаях.

Задачи (75 баллов)

Задача 1. Эволюция волновой функции (25 баллов)

1. Частица находится в основном состоянии гармонического осциллятора $U(x) = \frac{m\omega^2x^2}{2}$. Потенциал выключают на время T, спустя которое его снова включают. Определите вероятность того, что частица окажется в *основном* состоянии.

2. Определите такую вероятность для потенциала $-\frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x)$, но для случаев малых и больших времён T.

Подсказка: для асимптотической оценки интеграла в пункте 2 для случая малых T вам может пригодиться приём – преобразование Хаббарда-Стратановича (гауссов интеграл, заменяющий квадратичное по A выражение в экспоненте на линейное):

$$e^{-iA^2} = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iz^2 - 2izA} \tag{261}$$

Решение.
Решим задачу для произвольного потенциала $U(x)$, а затем подставим конкретные потеницалы. Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi \to \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)\psi = 0 \tag{262}$$

Далее определяем основное состояние как решение этого уравнения. Перейдём в импульсное представление:

$$\Psi(p) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)dx \tag{263}$$

Рассмотрим эволюциию частицы при выключенном потенциале $U = 0$. Нестационарное уравнение Шрёдингера в импульсном представлении:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(p,t)}{\partial t} = \langle p| \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle = \frac{p^2}{2m}\Psi(p,t), \quad \Psi(p,0) = \Psi(p) \tag{264}$$

$$\Psi(p,T) = \Psi(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \tag{265}$$

Вероятность того, что частица окажется в основном состоянии:

$$P = \left|\int_{-\infty}^{\infty} (dp)\Psi^*(p)\Psi(p,T)\right|^2 = \left|\int_{-\infty}^{\infty} (dp)\Psi^2(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right)\right|^2 \tag{266}$$

1. Гармонический осциллятор

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{267}$$

Основное состояние:

$$\psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \tag{268}$$

Перейдём в импульсное представление:

$$\Psi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \sqrt{2}\left(\frac{\pi\hbar}{m\omega^3}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\omega^2\hbar}\right) \tag{269}$$

Эволюция частицы при выключенном потенциале $U = 0$:

$$\Psi(p,T) = \Psi(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \tag{270}$$

Вероятность того, что частица окажется в основном состоянии:

$$P(T) = \left|\int_{-\infty}^{\infty} (dp)\Psi^2(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right)\right|^2 = \\ = \left|\int_{-\infty}^{\infty} (dp) \left(\sqrt{2}\left(\frac{\pi\hbar}{m\omega^3}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\omega^2\hbar}\right)\right)^2 \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right)\right|^2 \tag{271}$$

$$\boxed{P(T) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\omega^2 T^2}{4}}}} \tag{272}$$

2.

$$U(x) = -\frac{\hbar^2\kappa}{m}\delta(x) \tag{273}$$

Собственные функции для гамильтониана с таким потенциалом были найдены в задаче 3.1:

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa} \exp(-\kappa|x|) \tag{274}$$

Перейдём в импульсное представление:

$$\Psi(p) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \frac{2\kappa^{\frac{3}{2}}\hbar^2}{p^2 + \kappa^2\hbar^2} \tag{275}$$

Вероятность того, что частица окажется в основном состоянии:

$$P(T) = \left|\int\limits_{-\infty}^{\infty} (dp)\Psi^2(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right)\right|^2 = \left|\int\limits_{-\infty}^{\infty} (dp)\left(\frac{2\kappa^{\frac{3}{2}}\hbar^2}{p^2 + \kappa^2\hbar^2}\right)^2 \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right)\right|^2 \tag{276}$$

Обозначим $A = p\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}$. Преобразование Хаббарда-Стратановича:

$$e^{-iA^2} = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iz^2 - 2izA} = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iz^2 - 2izp\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}} \tag{277}$$

$$P(T) = \left|\int\limits_{-\infty}^{\infty} (dp)\left(\frac{2\kappa^{\frac{3}{2}}\hbar^2}{p^2 + \kappa^2\hbar^2}\right)^2 \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iz^2 - 2izp\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}}\right|^2 \tag{278}$$

Проинтегрируем по p при помощи вычетов (полюсы в $p = \pm a$ 2 порядка):

$$P(T) = \frac{16\kappa^6\hbar^8}{4\pi^3\hbar^2} \frac{\pi^2}{4\hbar^6\kappa^6} \left|2\int\limits_{0}^{\infty} dz e^{-2\kappa\hbar\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}z} \left(1 + 2\kappa\hbar\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}z\right) e^{iz^2}\right|^2 \tag{279}$$

$$P(T) = \frac{4}{\pi}\left|\int\limits_{0}^{\infty} dz e^{-\kappa\sqrt{\frac{2\hbar T}{m}}z} \left(1 + \kappa\sqrt{\frac{2\hbar T}{m}}z\right) e^{iz^2}\right|^2 \tag{280}$$

$$P(T) = \frac{4}{\pi}\left|\frac{1}{8}\left(4ia + (1+i)(a^2+2i)e^{i\frac{a^2}{4}}\sqrt{2}\pi(-i - (1-i)\int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \cos^2 t + (1+i)\int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \sin^2 t\right)\right|^2$$

$$\int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \cos^2 t \sim x, \quad \int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \sin^2 t \sim \frac{x^3}{3} \tag{281}$$

Пусть $a = \sqrt{\frac{2\hbar T}{m}}\kappa \ll 1$, тогда

$$P(T) = \frac{4}{\pi}\left|\frac{1+i}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{\sqrt{\pi}(1-i)}{8\sqrt{2}}a^2 + \mathcal{O}(a^3)\right|^2 = \frac{4}{\pi}\left(\frac{\pi}{4} - \frac{\sqrt{\pi}}{6\sqrt{2}}a^3\right) = 1 - \frac{4\sqrt{\pi}}{6\sqrt{2}\pi}a^3 + \mathcal{O}(a^3) \tag{282}$$

При малых временах T:

$$\boxed{P(T) = 1 - \frac{4\kappa^3}{3\sqrt{\pi}}\left(\frac{\hbar T}{m}\right)^{\frac{3}{2}} + \mathcal{O}(T^3)} \tag{283}$$

При больших временах T:

$$\int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \cos^2 t \sim \sqrt{\frac{\pi}{8}} - \frac{\cos x^2}{2x}, \quad \int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \sin^2 t \sim \sqrt{\frac{\pi}{8}} + \frac{\sin x^2}{2x} \tag{284}$$

$$P(T) = \frac{4}{\pi}\left|\frac{2}{a} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{a^3}\right)\right| = \frac{16}{\pi a^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{a^3}\right) \tag{285}$$

$$\boxed{P(T) = \frac{8m}{\pi\hbar\kappa^2 T} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T^3}\right)} \tag{286}$$

Задача 2. Квазистационарные состояния (50 баллов)
В этой задаче мы будем исследовать уравнение Шрёдингера в потенциале следующего вида:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ \frac{\kappa}{m}\delta(x-a), & x > 0 \end{cases} \tag{287}$$

Рассеивающий потенциал (величину κ) мы будем предполагать сильным. Если заменить этот потенциал на бесконечную стенку, то в этой задаче имеется множество стационарных состояний вида $\psi_n(x) = \sin knx$, $k_n = \frac{\pi n}{a}$ и $E_n^{(0)} = \frac{k_n^2}{2m}$. Возможность туннелирования превращает эти состояния в *квазистационарные* – хоть и не стационарные, но долгоживущие, и на достаточно небольших промежутках времени их можно считать стационарными. Ниже будут изложены три различных точки зрения на такие состояния и показана их эквивалентность.
Указание: хоть дальше и идёт речь об энергетическом представлении – во всех промежуточных вычислениях удобнее пользоваться квантовым числом — импульсом $k = \sqrt{2mE}$.
Задача 2.1. Распад квазистационарного состояния (25 баллов)
В начальный момент времени частица была «приготовлена» в одном из квазистационарных состояний, $\psi(x, t=0) = \psi_0(x)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin k_n x$.

1. Определите непрерывный спектр исходной задачи, нормированный на дельта-функцию от разницы энергий.

2. Рассмотрите разложение исходной волновой функции по этому непрерывному спектру. Обратите внимание, что $|\psi(E)|^2$ вблизи $E_n^{(0)}$ имеет максимум; покажите, что в окрестности этого максимума вероятность устроена как лоренциан:

$$|\psi(E)|^2 \approx c\frac{\Gamma_n}{(E-E_n)^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}} \tag{288}$$

   и при этом E_n близка к $E_n^{(0)}$, а $\Gamma_n \ll E_n$. Найдите величины c, E_n, Γ_n.

3. Найдите амплитуду того, что через достаточно большое время t частица останется в в этом квазистационарном состоянии $c(t) = \int \psi_0^*(x)\psi(x,t)dx$. Покажите, что на достаточно больших временах соответствующая вероятность $P(t) = |c(t)|^2$ затухает экспоненциально $P(t) \propto \exp(-t/\tau)$. Определите соответствующее «время жизни» τ_n.

Найденное «время жизни» окажется достаточно большим. Это означает, что на временах $t \ll \tau_n$, состояние $|n\rangle$ практически стационарно – волновая функция не меняется, за исключением тривиальной динамической фазы e^{-iE_nt}.
Решение.

1.

2.

$$|\psi(E)|^2 = \frac{1}{8\sqrt{2mE}\pi k_n} \frac{\frac{k_n^3}{2m\kappa^2 a}}{(E - E_n^{(0)}(1 - \frac{1}{2\kappa a}))^2 + \frac{1}{4}(\frac{k_n^3}{2m\kappa^2 a})^2} \tag{289}$$

$$\boxed{c = \frac{1}{8\sqrt{2mE}\pi k_n}, \quad E_n = E_n^{(0)}\left(1 - \frac{1}{2\kappa a}\right), \quad \Gamma_n = \frac{k_n^3}{2m\kappa^2 a}} \tag{290}$$

Как видно, E_n близко к $E_n^{(0)}$ и $\Gamma_n \ll E_n$.

3.

$$\psi(E) = \sqrt{c}\frac{\sqrt{\Gamma_n}}{(E - E_n) + \frac{i\Gamma_n}{2}} \tag{291}$$

Задача 2.2. Задержка волнового пакета (20 баллов)
Другой способ «смотреть» на квазистационарные состояния – это исследовать задачу рассеяния.

1. Определите волновые функции исходной задачи, которые соответствуют задаче рассеяния, то есть имеющие асимптотическое поведение $\psi(x \to \infty) = e^{-ikx} + re^{ikx}$. Величина коэффициента отражения $R = |r|^2$ тривиальным образом равна единице, поскольку движение инфинитно только в одну сторону; но вот амплитуда отражения $r(E) \equiv e^{i\delta(E)}$ имеет нетривиальные свойства.

2. Покажите, что амплитуда r, как функция *комплексной* энергии ε имеет серию полюсов, близких к вещественной оси $\varepsilon_n = E_n - \frac{i\Gamma_n}{2}$. Покажите, что на вещественной оси в окрестности $E \approx E_n$ амплитуда устроена следующим образом:

$$r(E) \approx e^{i\phi}\frac{E - E_n - \frac{i\Gamma_n}{2}}{E - E_n + \frac{i\Gamma_n}{2}} \tag{292}$$

   (с такими же величинами E_n и Γ_n; такой вид связан с условием $|r|^2 = 1$). Как при этом устроена фаза рассеяния $\delta(E)$?

3. Рассмотрите нестационарную задачу рассеяния: пусть на такую систему налетает волновой пакет, локализованный по энергии вблизи одного из таких метастабильных состояний, $E \approx E_n$. Определите время задержки такого волнового пакета $\tau = \hbar\frac{\partial\delta}{\partial E}$; и покажите, что непосредственно при резонансе $E = E_n$, время задержки связано с временем жизни метастабильного состояния. Обратите внимание – существенно, что полюса находятся в нижней комплексной полуплоскости; в противном случае мы бы получили $\tau(E_n) < 0$, что очевидным образом противоречит причинности.

С этим эффектом связана иная физическая интерпретация квазистационарных состояний: при рассеянии на резонансе частица «попадает» в метастабильное состояние, где она «застревает» на достаточно продолжительное время, и лишь затем вылетает.
Решение.

1.

$$\psi(x \to \infty) = e^{-ikx} + re^{ikx} \tag{293}$$

2. Амплитуда отражения:

$$r = \frac{1 - \frac{i\kappa}{k}(1 - e^{-2ika})}{-1 - \frac{i\kappa}{k}(1 - e^{2ika})} = -e^{-2ika}\frac{ke^{ika} - i\kappa e^{ika} + i\kappa e^{-ika}}{ke^{-ika} + i\kappa e^{-ika} - i\kappa e^{ika}} =$$

$$= e^{-2i(k-k_n)a}\frac{ik_n(k-k_n)a + k_n + 2\kappa(k-k_n)a}{ik_n(k-k_n)a - k_n - 2\kappa(k-k_n)a} \tag{294}$$

$$k_n(k-k_n) = \frac{m(E - E_n^{(0)})}{\hbar^2} \tag{295}$$

$$r = e^{-2i(k-k_n)a}\frac{ia\frac{m(E-E_n^{(0)})}{\hbar^2} + k_n + 2\kappa a\frac{m(E-E_n^{(0)})}{k_n\hbar^2}}{ia\frac{m(E-E_n^{(0)})}{\hbar^2} - k_n - 2\kappa a\frac{m(E-E_n^{(0)})}{k_n\hbar^2}} \tag{296}$$

Полюсы:

$$i(E - E_n^{(0)}) - \frac{\hbar^2 k_n}{ma} - \frac{2\kappa}{k_n}(E - E_n^{(0)}) = 0 \tag{297}$$

$$(E - E_n^{(0)})\left(i - \frac{2\kappa}{k_n}\right) = \frac{\hbar^2 k_n}{ma} \tag{298}$$

$$E - E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\kappa ma}\frac{1}{\frac{ik_n}{2\kappa} - 1} \approx -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2\kappa ma}\left(1 + \frac{ik_n}{2\kappa}\right) = -\frac{\hbar^2 E_n^{(0)}}{\kappa a} - \frac{i\hbar^2 k_n^3}{4\kappa^2 ma} \tag{299}$$

$$E_n = E_n^{(0)}\left(1 - \frac{\hbar^2}{\kappa a}\right) - \frac{i\hbar^2 k_n^3}{4\kappa^2 ma} \tag{300}$$

$$r = \frac{E - E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}}{E - E_n + i\frac{\Gamma_n}{2}} = \frac{(E - E_n - i\frac{\Gamma_n}{2})^2}{(E-E_n)^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}} = \frac{(E-E_n)^2 - \frac{\Gamma_n^2}{4} - i\Gamma_n(E-E_n)}{(E-E_n)^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}} \tag{301}$$

$$\boxed{\delta(E) = -\arctan\frac{\Gamma_n(E-E_n)}{(E-E_n)^2 - \frac{\Gamma_n^2}{4}}} \tag{302}$$

3. Время задержки:

$$\tau(E) = \hbar\frac{\partial\delta}{\partial E} = \frac{\Gamma_n\hbar}{(E-E_n)^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}} \tag{303}$$

$$\boxed{\tau(E_n) = \frac{4\hbar}{\Gamma_n}} \tag{304}$$

5 Точно решаемые потенциалы. Часть 1

Упражнения (40 баллов)

Упражнение 1 (20 баллов)

Исследуйте прямоугольную двумерную яму $U(r) = -U_0\theta(a - |r|)$ в обратном пределе глубокой ямы $U_0 \gg \frac{\hbar^2}{Ma^2}$. Оцените N_m – количество связанных состояний в яме для фиксированного орбитального квантового числа $m \in \mathbb{Z}$, а также полное число связанных состояний $N = \sum\limits_m N_m$.

Определите промежуточную асимптотику уровней энергии $E_{n,m}$ (интересны высоколежащие уровни, но не близкие к «верху ямы»).

Решение.

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{305}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - U_0\theta(a - |r|) \tag{306}$$

Лапласиан в полярных координатах:

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{307}$$

Разделим переменные на радиальную и угловую части:

$$\psi(r,\varphi) = \psi(r)e^{im\varphi} \tag{308}$$

Уравнение на радиальную часть:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\psi''(r) + \frac{1}{r}\psi'(r) - \frac{m^2}{r^2}\psi(r)\right) - U_0\theta(a - |r|)\psi(r) = E\psi(r) \tag{309}$$

1. Вне ямы $r > a$:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\psi''(r) + \frac{1}{r}\psi'(r) - \frac{m^2}{r^2}\psi(r)\right) = E\psi(r) \tag{310}$$

   Пусть $\chi^2 = -\frac{2ME}{\hbar^2}$ и $z = \chi r$, тогда

$$\psi'(r) = \frac{d\psi}{dz}\frac{dz}{dr} = \chi\psi'(z), \quad \psi''(r) = \frac{d\psi'}{dz}\frac{dz}{dr} = \chi^2\psi''(z) \tag{311}$$

$$\psi''(z) + \frac{1}{z}\psi'(z) - \left(1 + \frac{m^2}{z^2}\right)\psi(z) = 0 \tag{312}$$

   Решение уравнения:

$$\psi(z) = A_1 I_m(z) + A_2 K_m(z) \tag{313}$$

   Асимптотика при больших $z \gg 1$:

$$I_m(z) \approx \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}}, \quad K_m(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}}e^{-z} \tag{314}$$

   Поскольку волновая функция должна затухать на бесконечности, $A_1 = 0$, $A_2 = A$:

$$\psi(z) = AK_m(z) \tag{315}$$

2. Внутри ямы $r < a$:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\psi''(r) + \frac{1}{r}\psi'(r) - \frac{m^2}{r^2}\psi(r)\right) - U_0\psi(r) = E\psi(r) \tag{316}$$

   Пусть $k^2 = \frac{2M(U_0+E)}{\hbar^2}$ и $z = kr$, тогда

$$\psi'(r) = \frac{d\psi}{dz}\frac{dz}{dr} = k\psi'(z), \quad \psi''(r) = \frac{d\psi'}{dz}\frac{dz}{dr} = k^2\psi''(z) \tag{317}$$

$$\psi''(z) + \frac{1}{z}\psi'(z) + \left(1 - \frac{m^2}{z^2}\right)\psi(z) = 0 \tag{318}$$

Решение уравнения:

$$\psi(z) = B_1 J_m(z) + B_2 Y_m(z) \tag{319}$$

Асимптотика при малых $z \ll 1$:

$$J_m(z) \approx \frac{1}{m!}\left(\frac{z}{2}\right)^m, \quad Y_m(z) \approx \begin{cases} -\frac{(m-1)!}{\pi}\left(\frac{2}{z}\right)^m, & m \neq 0 \\ -\frac{2}{\pi}(\ln\frac{2}{z} - \gamma), & m = 0 \end{cases} \tag{320}$$

Поскольку волновая функция должна быть регулярной в 0, $B_1 = B$, $B_2 = 0$:

$$\psi(z) = BJ_m(z) \tag{321}$$

Сшивка логарифмической производной:

$$\frac{d\ln\psi(a-0)}{dz} = \frac{d\ln\psi(a+0)}{dz} \to \frac{kaJ'_m(ka)}{J_m(ka)} = \frac{\chi a K'_m(\chi a)}{K_m(\chi a)} \tag{322}$$

Рассматривается задача о глубокой яме $U_0 \gg \frac{\hbar^2}{Ma^2}$. поэтому $z \gg 1$. Соответствующие асимптотики при $z \gg 1$:

$$J_m(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad K_m(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}}e^{-z} \tag{323}$$

$$J'_m(z) = -\sqrt{\frac{\pi}{2z^3}}\left(z\sin\left(z - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{1}{2}\cos\left(z - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\right), \quad K'_m(z) = -\sqrt{\frac{\pi}{2z^3}}e^{-z}\left(\frac{1}{2} + z\right)$$

Рассмотрим случай $\chi a \gg ka \gg 1$.

$$-ka\frac{1}{ka}\left(ka\tan\left(ka - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{1}{2}\right) = -\chi a\frac{1}{\chi a}\left(\frac{1}{2} + \chi a\right) \tag{324}$$

$$\tan\left(ka - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{\chi}{k} \gg 1 \tag{325}$$

$$ka - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{2} + \pi n \to ka = \frac{3\pi}{4} + \frac{\pi m}{2} + \pi n \tag{326}$$

$$k^2a^2 = \pi^2\left(\frac{3}{4} + \frac{m}{2} + n\right)^2 = \frac{2Ma^2(U_0 - |E_{n.m}|)}{\hbar^2} \tag{327}$$

$$\boxed{E_{n,m} = U_0 - \frac{\pi^2\hbar^2}{2Ma^2}\left(\frac{3}{4} + \frac{m}{2} + n\right)^2} \tag{328}$$

Число решений:

$$\boxed{N_m = \frac{\sqrt{2Ma^2U_0}}{\pi\hbar} - \frac{m}{2} - \frac{3}{4}} \tag{329}$$

$$N_{m_{\max}} = 0 \to m_{\max} = 2\frac{\sqrt{2Ma^2U_0}}{\pi\hbar} - \frac{3}{2} \tag{330}$$

$$N = \sum_{m=0}^{m_{\max}} N_m = \sum_{m=0}^{m_{\max}} \left(\frac{\sqrt{2Ma^2U_0}}{\pi\hbar} - \frac{m}{2} - \frac{3}{4} \right) \approx \frac{m_{\max}(m_{\max}+1)}{2} - \frac{m_{\max}(m_{\max}-1)}{2} = \frac{m_{\max}^2}{4} \tag{331}$$

$$\boxed{N = \frac{2Ma^2U_0}{\pi^2\hbar^2}} \tag{332}$$

Упражнение 2 (20 баллов)
Определите волновую функцию для движения в трёхмерном Кулоновском потенциале $U(\vec{r}) = -\alpha/r$ частицы с орбитальным квантовым числом L на строго нулевой энергии $E = 0$.
Указание: соответствующее уравнение сводится к уравнению Бесселя.
Решение.
Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi = 0 \tag{333}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2M} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta - \frac{\alpha}{r} \tag{334}$$

Лапласиан в сферических координатах:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2} \tag{335}$$

Разделим переменные на радиальную и угловую части:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r)Y(\theta,\varphi) \tag{336}$$

Уравнение на радиальную часть:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}(r^2\psi'(r))' + \left(\frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r}\right)\psi(r) = 0 \tag{337}$$

$$\psi''(r) + \frac{2}{r}\psi'(r) - \left(\frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{2m\alpha}{\hbar r}\right)\psi(r) = 0 \tag{338}$$

Сделаем замену $z = 2\sqrt{\frac{2m\alpha r}{\hbar}} \to r = \frac{z^2\hbar}{8m\alpha}$, $u(z) = \psi(r)$:

$$\psi'(r) = \frac{d\psi}{dr} = \frac{dz}{dr}\frac{du}{dz} = \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar r}}u'(z) = \frac{4m\alpha}{\hbar z}u'(z) \tag{339}$$

$$\psi''(r) = \frac{d^2\psi}{dr^2} = \frac{4m\alpha}{\hbar z}\frac{d}{dz}\left(\frac{4m\alpha}{\hbar z}u'(z)\right) = \frac{16m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^3}u'(z) + \frac{16m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^2}u''(z) \tag{340}$$

$$\frac{16m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^2}u''(z) + \frac{48m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^3}u'(z) + \frac{16m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^2}\left(1 - \frac{4L(L+1)}{z^2}\right)u(z) = 0 \tag{341}$$

$$z^2u''(z) + 3zu'(z) + (z^2 - 4L(L+1))u(z) = 0 \tag{342}$$

Сделаем замену $v(z) = zu(z) \to u(z) = \frac{v(z)}{z}$:

$$u'(z) = \frac{v'(z)}{z} - \frac{v(z)}{z^2}, \quad u''(z) = \frac{v''(z)}{z} - \frac{2v'(z)}{z^2} + \frac{2v(z)}{z^3} \tag{343}$$

$$zv''(z) - 2v'(z) + \frac{2v(z)}{z} + 3v'(z) - \frac{3v(z)}{z} + zv(z) - \frac{4L(L+1)}{z}v(z) = 0 \tag{344}$$

$$v''(z) + \frac{1}{z}v'(z) + \left(1 - \frac{(2L+1)^2}{z^2}\right)v(z) = 0 \tag{345}$$

Получилось уравнение Бесселя с $m = 2L+1$. Его решение:

$$v(z) = A_1 J_{2L+1}(z) + A_2 Y_{2L+1}(z) \tag{346}$$

Вернёмся к замене:

$$\boxed{\psi(r) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\alpha r}}\left(A_1 J_{2L+1}\left(2\sqrt{\frac{2m\alpha r}{\hbar}}\right) + A_2 Y_{2L+1}\left(2\sqrt{\frac{2m\alpha r}{\hbar}}\right)\right)} \tag{347}$$

Задачи (60 баллов)

Задача 1 (20 баллов)

Рассмотрите трёхмерную частицу массы m, движущуюся в трёхмерной шаровой полости радиуса a с бесконечными стенками:

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & |\vec{r}| < a \\ \infty, & |\vec{r}| > a \end{cases} \tag{348}$$

Каким уравнением определяются уровни энергии с фиксированным орбитальным моментом L? Решите уравнение точно для $L = 0$, а также приближённо для высоколежащих уровней энергии при $L \geq 1$.

Указание: свободное движение в трёхмерном пространстве также сводится к функциям Бесселя, но с полуцелым индексом $J_{n+1/2}(z)$ (которые, в действительности, специальными функциями не являются, а имеют явное представление через обычные тригонометрические функции).

Решение.

При $r > a$:

$$\psi(r) = 0 \tag{349}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера при $r < a$ для радиальной части:

$$\psi''(r) + \frac{2}{r}\psi'(r) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{L(L+1)}{r^2}\right)\psi(r) = 0 \tag{350}$$

Введём замену $\psi(r) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}}$.

$$\psi'(r) = \frac{u'(r)}{\sqrt{r}} - \frac{u(r)}{2r^{\frac{3}{2}}}, \quad \psi''(r) = \frac{u''(r)}{\sqrt{r}} - \frac{u'(r)}{r^{\frac{3}{2}}} + \frac{3u(r)}{4r^{\frac{5}{2}}} \tag{351}$$

$$\frac{u''(r)}{\sqrt{r}} - \frac{u'(r)}{r^{\frac{3}{2}}} + \frac{3u(r)}{4r^{\frac{5}{2}}} + \frac{2u'(r)}{r^{\frac{3}{2}}} - \frac{u(r)}{r^{\frac{5}{2}}} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{L(L+1)}{r^2}\right)\frac{u(r)}{\sqrt{r}} = 0 \tag{352}$$

$$u''(r) + \frac{u'(r)}{r} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{1}{4}\right) u(r) = 0 \tag{353}$$

$$u''(r) + \frac{u'(r)}{r} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{(L+\frac{1}{2})^2}{r^2}\right) u(r) = 0 \tag{354}$$

$$u(r) = B_1 J_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r\right) + B_2 Y_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right) \tag{355}$$

Вернёмся к замене:

$$\psi(r) = \frac{B_1}{\sqrt{r}} J_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r\right) + \frac{B_2}{\sqrt{r}} Y_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r\right) \tag{356}$$

Поскольку функция Неймана сингулярна в 0, то $B_2 = 0$. Сшивка при $r = a$:

$$J_{L+\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar}\right) = 0 \tag{357}$$

1. Случай $L = 0$.

$$\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a\sqrt{2mE}}} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar}\right) = 0 \to \frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} = \pi n \tag{358}$$

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}} \tag{359}$$

2. Случай $L \geq 1$. Для высоколежащих уровней $\frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} \gg 1$. Асимптотика функции Бесселя при $z \gg 1$:

$$J_m(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{360}$$

$$\frac{\sqrt{2\hbar}}{\sqrt{\pi a\sqrt{2mE}}} \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} - \frac{(L+\frac{1}{2})\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) = 0 \tag{361}$$

$$\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} - \frac{\pi L}{2}\right) = 0 \tag{362}$$

$$\frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} - \frac{\pi L}{2} = \pi n \tag{363}$$

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2(2n+L)^2}{8ma^2}} \tag{364}$$

Задача 2. Ступенька (40 баллов)

Определите коэффициенты прохождения и отражения от потенциала $U(x) = \frac{1}{2}U_0 \tanh\frac{x}{a}$. Указание: при помощи замены $\xi = -e^{-2x/a}$ задача приводится к гипергеометрической функции ${}_2F_1$.

Решение.
Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \left(\frac{1}{2}U_0 \tanh\frac{x}{a} - E\right)\psi(x) = 0 \tag{365}$$

Пусть $\xi = -e^{-\frac{2x}{a}}$, тогда $x = -\frac{a}{2}\ln(-\xi)$.

$$\mathrm{th}\,\frac{x}{a} = \frac{1+\xi}{1-\xi} \tag{366}$$

$$\psi'(x) = -\frac{2}{a}\xi\psi'(\xi), \quad \psi''(x) = \frac{4\xi}{a^2}\psi'(\xi) + \frac{4\xi^2}{a^2}\psi''(\xi) \tag{367}$$

Пусть $k^2 = \frac{ma^2}{4\hbar^2}U_0$, $\kappa^2 = \frac{ma^2}{2\hbar^2}E$.

$$\xi\frac{\partial\psi}{\partial\xi} + \xi^2\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} + k^2\frac{\xi+1}{\xi-1}\psi + \kappa^2\psi = 0 \tag{368}$$

$$\psi(\xi) = \Psi(\xi)\xi^{\sqrt{k^2-\chi^2}} \tag{369}$$

$$\xi(1-\xi)\Psi''(\xi) - (2\sqrt{k^2-\kappa^2}+1)(\xi-1)\Psi'(\xi) - 2k^2\Psi(\xi) = 0 \tag{370}$$

$$\begin{aligned}\Psi(\xi) = C_1\xi^{\sqrt{k^2-\kappa^2}}{}_2F_1(\sqrt{-k^2-\kappa^2}+\sqrt{k^2-\kappa^2}, -\sqrt{-k^2-\kappa^2}+\sqrt{k^2-\kappa^2}, 1+2\sqrt{k^2-\chi^2}, \xi) + \\ + C_2\xi^{-\sqrt{k^2-\kappa^2}}{}_2F_1(-\sqrt{k^2-\kappa^2}-\sqrt{-k^2-\kappa^2}, -\sqrt{k^2-\kappa^2}+\sqrt{-k^2-\kappa^2}, 1-2\sqrt{k^2-\chi^2}, \xi)\end{aligned} \tag{371}$$

Рассмотрим 2 базисное решение:

$$\psi(\xi) = \xi^{-i\sqrt{\kappa^2-k^2}}{}_2F_1(-\sqrt{k^2-\kappa^2}-\sqrt{-k^2-\kappa^2}, -\sqrt{k^2-\kappa^2}+\sqrt{-k^2-\kappa^2}, 1-2\sqrt{k^2-\chi^2}, \xi) \tag{372}$$

При $x \to \infty$

$${}_2F_1(..., e^{-\frac{2x}{a}}) \sim 1 \tag{373}$$

$$\psi(x) = (-1)^{i\sqrt{k^2+\kappa^2}}e^{-i\frac{2x}{a}\sqrt{k^2+\kappa^2}} = e^{\pi\sqrt{\kappa^2-k^2}}e^{i\frac{2x}{a}\sqrt{\kappa^2-k^2}} \tag{374}$$

При $x \to -\infty$

$$\begin{aligned}\frac{\sin(\pi(b-a))}{\pi}{}_2F_1(a,b,c,\xi) = \frac{(-\xi)^a}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}{}_2F_1(a, a-c+1, a-b+1, \frac{1}{\xi}) - \\ - \frac{(-\xi)^{-b}}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}{}_2F_1(b, b-c+1, b-a+1, \frac{1}{\xi})\end{aligned} \tag{375}$$

$${}_2F_1(a,b,c,\frac{1}{\xi}) \sim 1 \tag{376}$$

$$\begin{aligned}\Psi(\xi) = -\frac{\pi}{i\sinh(\pi\sqrt{k^2+\kappa^2})}e^{\pi\sqrt{\kappa^2-k^2}}\left(\frac{e^{-i\frac{2x}{a}\sqrt{k^2+\kappa^2}}}{(i\sqrt{\kappa^2-k^2}-i\sqrt{\kappa^2+k^2})\Gamma^2(i\sqrt{\kappa^2-k^2}-i\sqrt{\kappa^2+k^2})} - \right. \\ \left. - \frac{e^{i\frac{2x}{a}\sqrt{k^2+\kappa^2}}}{(i\sqrt{\kappa^2-k^2}+i\sqrt{\kappa^2+k^2})\Gamma^2(i\sqrt{\kappa^2-k^2}+i\sqrt{\kappa^2+k^2})}\right)\end{aligned} \tag{377}$$

$$r = \frac{\pi i}{\sinh \pi\sqrt{\kappa^2+k^2}}(i\sqrt{\kappa^2-k^2}+i\sqrt{\kappa^2+k^2})\Gamma^2(i\sqrt{\kappa^2-k^2}+i\sqrt{\kappa^2+k^2}) \tag{378}$$

$$t = \frac{\pi i}{\sinh \pi\sqrt{\kappa^2+k^2}}(i\sqrt{\kappa^2-k^2}-i\sqrt{\kappa^2+k^2})\Gamma^2(i\sqrt{\kappa^2-k^2}-i\sqrt{\kappa^2+k^2}) \tag{379}$$

Определим коэффициенты отражения и прохождения. Упростим r и t и получим:

$$\boxed{R = |r|^2 = \frac{\sinh^2(\pi(\sqrt{\kappa^2-k^2}-\sqrt{\kappa^2+k^2}))}{\sinh^2(\pi(\sqrt{\kappa^2-k^2}+\sqrt{\kappa^2+k^2}))}} \tag{380}$$

$$\boxed{T = \frac{\sqrt{\kappa^2+k^2}}{\sqrt{\kappa^2-k^2}}|t|^2 = \frac{\sinh(2\pi(\sqrt{\kappa^2-k^2}))\sinh(2\pi\sqrt{\kappa^2+k^2}))}{\sinh^2(\pi(\sqrt{\kappa^2-k^2}+\sqrt{\kappa^2+k^2}))}} \tag{381}$$

6 Точно решаемые потенциалы. Часть 2

Упражнения (35 баллов).

Упражнение 1. Функция Эйри (10 баллов)
Используя асимптотики функций Эйри для инфинитного движения (без бесконечной стенки), отнормируйте их на дельта-функцию от энергии, а также убедитесь в соотношении полноты. А именно, выпишите волновые функции, удовлетворяющие следующему условию:

$$\int dx\psi_E^*(x)\psi_{E'}(x) = \delta(E-E') \tag{382}$$

и убедитесь, что для них выполняется соотношение

$$\int dE\psi_E^*(x')\psi_E(x) = \delta(x-x') \tag{383}$$

Решение.
Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + Fx\psi(x) = E\psi(x) \tag{384}$$

Сдвинем начало координат:

$$z = \frac{x - E/F}{(\hbar^2/2mF)^{\frac{1}{3}}} \tag{385}$$

Такая подстановка приводит к уравнению Эйри:

$$\psi''(z) - z\psi(z) = 0 \tag{386}$$

Общее решение – произвольная линейная комбинация функций Эйри первого и второго рода:

$$\psi(z) = C_1\mathrm{Ai}(z) + C_2\mathrm{Bi}(z) \tag{387}$$

Асимптотики функции Эйри:

$$\mathrm{Ai}(z) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}\right), & z\to\infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}}\sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right), & z\to-\infty \end{cases} \tag{388}$$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}}\sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)=\frac{1}{2\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}}\left(e^{i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)}+e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}+\frac{3\pi}{4}\right)}\right) \tag{389}$$

$$\psi_E(x)=C\mathrm{Ai}(z) \tag{390}$$

$$\begin{aligned}
&\int dx\psi_E^*(x)\psi_{E'}(x)= \\
&=\frac{C^2}{4\pi(zz')^{\frac{1}{4}}}\int\limits_{-\infty}^{0}dx\left(e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)}+e^{i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}+\frac{3\pi}{4}\right)}\right)\left(e^{i\left(\frac{2}{3}(-z')^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)}+e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z')^{\frac{3}{2}}+\frac{3\pi}{4}\right)}\right)+ \\
&+\frac{C^2}{4\pi(zz')^{\frac{1}{4}}}\int\limits_{0}^{\infty}dx\left(e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)}+e^{i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}}+\frac{3\pi}{4}\right)}\right)\left(e^{i\left(\frac{2}{3}(-z')^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)}+e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z')^{\frac{3}{2}}+\frac{3\pi}{4}\right)}\right)+\text{reg.}= \\
&=\frac{C^2}{4\pi(zz')^{\frac{1}{4}}}\int\limits_{-\infty}^{0}dx\left(e^{\frac{2i}{3}\left((-z')^{\frac{3}{2}}-(-z)^{\frac{3}{2}}\right)}+e^{-\frac{2i}{3}\left((-z')^{\frac{3}{2}}-(-z)^{\frac{3}{2}}\right)}\right)+\text{reg.}
\end{aligned} \tag{391}$$

$$\Delta z=z-z'=\frac{\Delta E}{F}\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{392}$$

$$\begin{aligned}
&\int dx\psi_E^*(x)\psi_{E'}(x)=\frac{C^2}{4\pi z^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{\hbar^2}{2mF}\right)^{\frac{1}{3}}\int\limits_{-\infty}^{0}dz(e^{-\frac{2}{3}i(-z)^{\frac{3}{2}}\frac{3\Delta z}{2z}}+e^{\frac{2}{3}i(-z)^{\frac{3}{2}}\frac{3\Delta z}{2z}})= \\
&=\left(\frac{\hbar^2}{2mF}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{C^2}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d(\sqrt{z})e^{-i\Delta z\sqrt{z}}=C^2\left(\frac{\hbar^2\sqrt{F}}{2m}\right)^{\frac{2}{3}}\delta(E'-E)=\delta(E'-E)
\end{aligned} \tag{393}$$

$$C=\left(\frac{2m}{\hbar^2\sqrt{F}}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{394}$$

$$\boxed{\psi_E(x)=\left(\frac{2m}{\hbar^2\sqrt{F}}\right)^{\frac{1}{3}}\mathrm{Ai}\left(\frac{x-E/F}{(\hbar^2/2mF)^{\frac{1}{3}}}\right)} \tag{395}$$

$$\begin{aligned}
&\int dE\psi_E^*(x')\psi_E(x)=\frac{C^2}{4\pi}\int\limits_{-\infty}^{0}dE\left(e^{\frac{2i}{3}\left((-z')^{\frac{3}{2}}-(-z)^{\frac{3}{2}}\right)}+e^{-\frac{2i}{3}\left((-z')^{\frac{3}{2}}-(-z)^{\frac{3}{2}}\right)}\right)+\text{reg.}= \\
&=-\frac{FC^2}{4\pi}\left(\frac{\hbar^2}{2mF}\right)^{\frac{1}{3}}\int\limits_{-\infty}^{0}dz\frac{e^{iz^{\frac{1}{2}}\Delta z}+e^{-iz^{\frac{1}{2}}\Delta z}}{z^{\frac{1}{2}}}=FC^2\left(\frac{\hbar^2}{2mF}\right)^{\frac{2}{3}}\delta(x-x')=\delta(x-x')
\end{aligned} \tag{396}$$

$$\boxed{\int dE\psi_E^*(x')\psi_E(x)=\delta(x-x')} \tag{397}$$

Упражнение 2. Квантовый гармонический осциллятор (10 баллов)

1. Вычислите $\langle \hat{x}^4 \rangle$ по произвольному собственному состоянию гармонического осциллятора $|n\rangle$.

2. Частица находилась в основном состоянии гармонического осциллятора с частотой ω. Пусть в какой-то момент времени характерная частота осциллятора мгновенно меняется и становится равной ω'. Вычислите вероятность остаться в основном состоянии.

Решение.

1. Действие операторов повышения и понижения:

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n\rangle\,, \quad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n\rangle \tag{398}$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \tag{399}$$

$$\begin{gathered}\langle x^4 \rangle = \langle n|\,\hat{x}^4\,|n\rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\,\langle n|\,(\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2)^2\,|n\rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\,\langle n|\,\hat{a}^4 + \hat{a}^3\hat{a}^\dagger + \hat{a}^2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \\ + \hat{a}^2(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2\hat{a} + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^3 + \hat{a}^\dagger\hat{a}^3 + \hat{a}^\dagger\hat{a}^2\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}^2 + \\ + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}\hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^3\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^4\,|n\rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}((n+1)(n+2) + (n+1)^2 + n(n+1) + n(n+1) + n^2 + n(n-1))\end{gathered} \tag{400}$$

$$\boxed{\langle x^4 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2}(2n^2 + 2n + 1)} \tag{401}$$

2. Волновая функция основного состояния:

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \tag{402}$$

$$P = \left|\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi'(x)dx\right|^2 = \left|\sqrt[4]{\frac{m^2\omega\omega'}{\pi^2\hbar^2}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m(\omega+\omega')x^2}{2\hbar}\right)dx\right|^2 \tag{403}$$

$$\boxed{P = \frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega + \omega'}} \tag{404}$$

Упражнение 3. Когерентные состояния (15 баллов)
Когерентные состояния гармонического осциллятора определяются как собственные состояния для понижающего оператора $\hat{a}$ с собственным комплексным числом $\alpha \in \mathbb{C} : \hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle$.

1. Найдите координатное представление когерентного состояния $\psi_\alpha(x) \equiv \langle x|\alpha\rangle$. Для гамильтониана квантового гармонического осциллятора $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$, найдите также $\psi_\alpha(x,t) \equiv \langle x|\alpha(t)\rangle$.

2. Выразите когерентное состояние α явно через собственные состояния осциллятора, нормировав его условием $\langle 0|\alpha\rangle = 1$.

3. Представьте их в виде $|\alpha\rangle = \hat{C}(\alpha)\,|0\rangle$; найдите явный вид оператора $\hat{C}(\alpha)$.

4. Вычислите перекрытие когерентных состояний $\langle\alpha|\alpha'\rangle$.

5. Когерентные состояния образуют *переполненный базис*. Докажите следующую формулу для «разложения единицы»:

$$\hat{\mathbb{I}} = \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2}\,|\alpha\rangle\,\langle\alpha| \tag{405}$$

(мы определили $d\alpha d\alpha^* \equiv d(\mathrm{Re}\alpha)d(\mathrm{Im}\alpha)$).

Решение.

1. Оператор уничтожения:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} \tag{406}$$

$$\langle x|\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha\,\langle x|\alpha\rangle = \alpha\psi_\alpha(x) \tag{407}$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p}\right)\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x) \tag{408}$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x) \tag{409}$$

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial\psi_\alpha(x)}{\partial x} = \left(\alpha - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right)\psi_\alpha(x) \tag{410}$$

$$\boxed{\psi_\alpha(x) = e^{\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\alpha x - \frac{m\omega x^2}{2\hbar}}} \tag{411}$$

Действие оператора эволюции (воспользуемся п. 2 этой задачи):

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t)\,|\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}\,|n\rangle \tag{412}$$

$$E_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right) \tag{413}$$

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\omega nt}\,|n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle \tag{414}$$

$$\psi_\alpha(x,t) \equiv \langle x|\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}\,\langle x|n\rangle \tag{415}$$

$$\boxed{\psi_\alpha(x,t) = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{2^n}n!}\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)} \tag{416}$$

2. Разложим когеренстное состояние по базису:

$$|\alpha\rangle = \sum_n C_n(\alpha)\,|n\rangle\,, \quad C_n(\alpha) = \langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\alpha}\langle n|\hat{a}\alpha\rangle = \frac{1}{\alpha}\langle \hat{a}^\dagger n|\alpha\rangle \tag{417}$$

$$\hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{418}$$

Получаем рекуррентное соотношение:

$$\alpha C_n(\alpha) = \sqrt{n+1}C_{n+1}(\alpha) \to C_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}C_0(\alpha) \tag{419}$$

Условие нормировки:

$$C_0(\alpha) = \langle 0|\alpha\rangle = 1 \tag{420}$$

$$\boxed{|\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle} \tag{421}$$

3.

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle \tag{422}$$

$$|\alpha\rangle = \sum_n \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!}\,|0\rangle = e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle = C(\alpha)\,|0\rangle \tag{423}$$

$$\boxed{C(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger}} \tag{424}$$

4.

$$\langle\alpha|\alpha'\rangle = \langle 0|\hat{C}^\dagger(\alpha)\hat{C}(\alpha')|0\rangle = \langle 0|e^{\alpha^*\hat{a}}e^{\alpha'\hat{a}^\dagger}|0\rangle = \left\langle 0\left|\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\alpha^*\hat{a})^k}{k!}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha'\hat{a}^\dagger)^n}{n!}\right|0\right\rangle =$$
$$= \left\langle k\left|\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\hat{a}^k}{\sqrt{k!}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha'^n}{\sqrt{n!}}\right|n\right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\alpha^*)^k}{\sqrt{k!}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha')^n}{\sqrt{n!}}\delta_{kn} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha^*\alpha')^n}{n!} = e^{\alpha^*\alpha'} \tag{425}$$

$$\boxed{\langle\alpha|\alpha'\rangle = e^{\alpha^*\alpha'}} \tag{426}$$

5.

$$\langle m|\hat{\mathbb{I}}|n\rangle = \delta_{mn} \tag{427}$$

$$\left\langle m\left|\int\frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi}e^{-|\alpha|^2}\,|\alpha\rangle\,\langle\alpha|\right|n\right\rangle = \int\frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi}e^{-|\alpha|^2}\,\langle m|\alpha\rangle\,\langle\alpha|n\rangle =$$
$$= \int\frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi}e^{-|\alpha|^2}\frac{(\alpha^*)^m}{\sqrt{m!}}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \tag{428}$$

$$\alpha = re^{i\varphi}, \quad d(\mathrm{Re}\alpha)d(\mathrm{Im}\alpha) = rdrd\varphi \tag{429}$$

$$\int\limits_0^\infty \int\limits_0^{2\pi} \frac{drd\varphi}{\pi} re^{-r^2} \frac{r^{m+n}e^{i(n-m)\varphi}}{\sqrt{m!n!}} = \frac{1}{\sqrt{m!n!}} \int\limits_0^\infty drr^{m+n+1}e^{-r^2} \int\limits_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\pi} e^{i(n-m)\varphi} =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{m!n!}} \int\limits_0^\infty drr^{m+n+1}e^{-r^2}\delta_{nm} = \frac{1}{m!} \int\limits_0^\infty d(r^2) r^{2m} e^{-r^2}\delta_{mn} = \frac{\Gamma(m+1)}{m!}\delta_{mn} = \delta_{mn} \quad (430)$$

Таким образом,

$$\boxed{\hat{\mathbb{I}} = \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} |\alpha\rangle \langle\alpha|} \quad (431)$$

Задачи (65 баллов)

Задача 1. Теорема Вика (20 баллов)

Квантовый гармонический осциллятор находится при температуре T, т.е. описывается матрицей плотности $\hat{\rho} = \frac{1}{Z}e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}$. Вычислите среднее значение по этому состоянию от оператора $\langle e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger}\rangle$ и докажите следующее соотношение:

$$\langle e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger}\rangle = e^{\frac{1}{2}\langle(\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger)^2\rangle} \quad (432)$$

Указание: вам может пригодиться базис когерентных состояний, а также формула Бейкера-Кэмбелла-Хаусдорфа:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}, \quad \text{если } [\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] = [\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]] = 0 \quad (433)$$

Решение. Рассмотрим $\hat{O} = e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger}$.

$$\langle\hat{O}\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{Z}e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger}\right) \quad (434)$$

$$\langle\hat{O}\rangle = \mathrm{Tr}\left(\frac{1}{Z}e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger}\right) = \frac{1}{Z}\int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi}e^{-|\alpha|^2}\langle\alpha|e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger}e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}|\alpha\rangle \quad (435)$$

$$e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger} = e^{\alpha_1\hat{a}}e^{\alpha_2\hat{a}^\dagger}e^{-\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}[\hat{a}^\dagger,\hat{a}]} = e^{\alpha_1\hat{a}}e^{\alpha_2\hat{a}^\dagger}e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}} \quad (436)$$

$$\langle\hat{O}\rangle = \frac{1}{Z}\int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi}e^{-|\alpha|^2}e^{\alpha_2\alpha^*}e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}}\langle\alpha|e^{\alpha_1\hat{a}}e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}|\alpha\rangle \quad (437)$$

$$e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}|\alpha\rangle = e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}\sum_{n=0}^\infty \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = \sum_{n=0}^\infty \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-\beta\omega n}|n\rangle = e^{-\beta\omega}|n\rangle \quad (438)$$

$$\langle\hat{O}\rangle = \frac{e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}}}{Z}\int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi}e^{-|\alpha|^2}e^{\alpha_2\alpha^*}e^{\alpha_1\alpha e^{-\beta\omega}}\langle\alpha|e^{-\beta\omega}|\alpha\rangle =$$

$$= \frac{e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}}}{Z}\int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi}e^{-|\alpha|^2(1-e^{-\beta\omega})}e^{\alpha_2\alpha^*}e^{\alpha_1\alpha e^{-\beta\omega}} \quad (439)$$

$$\langle\hat{O}\rangle = \frac{e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}}}{Z}(1-e^{-\beta\omega})\int\limits_{-\infty}^\infty \frac{du}{\sqrt{\pi}}e^{-(u^2-\frac{\alpha_2+\alpha_1e^{-\beta\omega}}{\sqrt{1-e^{-\beta\omega}}}u)}\int\limits_{-\infty}^\infty \frac{du}{\sqrt{\pi}}e^{-(u^2+i\frac{\alpha_2-\alpha_1e^{-\beta\omega}}{\sqrt{1-e^{-\beta\omega}}}u)} \quad (440)$$

$$Z=\mathrm{Tr}(e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}})=\sum_{n=0}^{\infty}\langle n|e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}|n\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\langle n|e^{-\beta\omega n}|n\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}e^{-\beta\omega n}=\frac{1}{1-e^{-\beta\omega}} \tag{441}$$

$$\langle\hat{O}\rangle=e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}}e^{\frac{(\alpha_2+\alpha_1e^{-\beta\omega})^2}{4(1-e^{-\beta\omega})}}e^{-\frac{(\alpha_2-\alpha_1e^{-\beta\omega})^2}{4(1-e^{-\beta\omega})}}=e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\left(\frac{1+e^{-\beta\omega}}{1-e^{-\beta\omega}}\right)} \tag{442}$$

$$\boxed{\left\langle e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger}\right\rangle=e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\coth\frac{\beta\omega}{2}}} \tag{443}$$

Рассмотрим $\hat{O}=(\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger)^2$.

$$\langle\hat{O}\rangle=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O})=\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{Z}e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}(\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger)^2\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\left\langle n\left|\frac{1}{Z}e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}(\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger)^2\right|n\right\rangle=$$
$$=\frac{1}{Z}\sum_{n=0}^{\infty}\left\langle n\left|\frac{1}{Z}e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}(\alpha_1^2\hat{a}^2+\alpha_1\alpha_2\hat{a}\hat{a}^\dagger+\alpha_1\alpha_2\hat{a}^\dagger\hat{a}+\alpha_2^2\hat{a}^{\dagger2})\right|n\right\rangle=\frac{\alpha_1\alpha_2}{Z}\sum_{n=0}^{\infty}\langle n|e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}(2n+1)|n\rangle=$$
$$=\frac{\alpha_1\alpha_2}{Z}\sum_{n=0}^{\infty}e^{-\beta\omega n}(2n+1)=\frac{\alpha_1\alpha_2}{Z}\frac{1+e^{-\beta\omega}}{(1-e^{-\beta\omega})^2}=\alpha_1\alpha_2\frac{1+e^{-\beta\omega}}{1-e^{-\beta\omega}}=\alpha_1\alpha_2\coth\frac{\beta\omega}{2} \tag{444}$$

$$\boxed{e^{\frac{1}{2}\langle(\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger)^2\rangle}=e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}\coth\frac{\beta\omega}{2}}=\left\langle e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger}\right\rangle} \tag{445}$$

Таким образом, теорема Вика доказана.

Задача 2. QHO in a box (20 баллов)

Квантовый гармонический осциллятор помещён в большую «коробку» размера $2L$ ровно посередине, так что потенциальная энергия имеет следующий вид:

$$U(x)=\begin{cases}\frac{m\omega^2x^2}{2}, & |x|<L\\ \infty, & |x|>L\end{cases} \tag{446}$$

Определите *силу*, с которой осциллятор, находясь в одном из низколежащих уровней энергии $n\ll\frac{m\omega L^2}{\hbar}$, действует на эти стенки.

Решение.

Общее решение в области $|x|<L$:

$$\psi(y)=C_{11}F_1\left(-\frac{\epsilon}{2},\frac{1}{2},y^2\right)e^{-\frac{y^2}{2}}+C_2y_1F_1\left(-\frac{\epsilon-1}{2},\frac{3}{2},y^2\right)e^{-\frac{y^2}{2}}=C_1\psi_1(y)+C_2\psi_2(y) \tag{447}$$

$$x=\pm L\to y=\pm L\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{448}$$

$$\psi\left(\pm L\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)=0 \tag{449}$$

$${}_1F_1\left(-\frac{\epsilon}{2},\frac{1}{2},y^2\right)e^{-\frac{m\omega L^2}{\hbar}}=0 \tag{450}$$

Поскольку $\frac{m\omega L^2}{\hbar}\gg1$, то воспользуемся асимптотической формулой

$${}_1F_1(a,b,z)=\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}e^zz^{a-b}+\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}(-z)^{-a} \tag{451}$$

$$\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right)}e^z z^{-\frac{\epsilon+1}{2}} + \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon+1}{2}\right)}(-z)^{\frac{\epsilon}{2}} = 0 \tag{452}$$

$$e^z + \frac{\Gamma(-\frac{\epsilon}{2})}{\Gamma(\frac{\varepsilon+1}{2})}(-1)^{\frac{\epsilon}{2}} z^{\epsilon+\frac{1}{2}} = 0 \tag{453}$$

$$\Gamma\left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)\Gamma\left(1+\frac{\varepsilon}{2}\right) = \frac{\pi}{\sin\left(-\frac{\pi\varepsilon}{2}\right)} \tag{454}$$

$$\frac{\Gamma\left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon+1}{2}\right)} = -\frac{\pi}{\sin\frac{\pi\varepsilon}{2}\Gamma\left(1+\frac{\varepsilon}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1+\varepsilon}{2}\right)} = -\frac{2^\varepsilon\sqrt{\pi}}{\sin\frac{\pi\varepsilon}{2}\Gamma(1+\varepsilon)} = -\frac{2^\epsilon\sqrt{\pi}}{\sin\frac{\pi\varepsilon}{2}\varepsilon\Gamma(\varepsilon)} \tag{455}$$

$$\Gamma(\varepsilon) = \Gamma(n+\delta n) = (n-1+\delta n)...(1+\delta n)\Gamma(1+\delta n) \approx \Gamma(n) \tag{456}$$

$$\frac{\Gamma\left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon+1}{2}\right)} = -\frac{2^n\sqrt{\pi}}{\sin(\frac{\pi n}{2}+\frac{\pi\delta n}{2})n\Gamma(n)\Gamma(1+\delta n)} \approx \begin{cases} -\frac{(-1)^k 2^n\sqrt{\pi}}{n\Gamma(n)}, & n=2k+1 \\ -\frac{(-1)^k 2^{n+1}}{\sqrt{\pi}n\delta n\Gamma(n)}, & n=2k \end{cases} \tag{457}$$

$$e^z - \frac{2^{n+1}\sqrt{\pi}}{\pi\delta n n\Gamma(n)} z^{n+\frac{1}{2}} = 0 \quad (n=2k) \tag{458}$$

$$\delta n = \frac{e^{-z}2^{n+1}}{\sqrt{\pi}n\Gamma(n)} z^{n+\frac{1}{2}} \tag{459}$$

$$ {}_1F_1\left(-\frac{\varepsilon-1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega L^2}{\hbar}\right) e^{-\frac{m\omega L^2}{2\hbar}} = 0 \tag{460}$$

$$\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\varepsilon-1}{2}\right)}e^z z^{-\frac{\varepsilon}{2}-1} + \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\varepsilon+1}{2}\right)}(-z)^{\frac{\epsilon-1}{2}} = 0 \tag{461}$$

$$e^z + \frac{\Gamma\left(-\frac{\varepsilon-1}{2}\right)}{\Gamma\left(1+\frac{\epsilon}{2}\right)}(-1)^{\frac{\epsilon+1}{2}} z^{\varepsilon+\frac{1}{2}} = 0 \tag{462}$$

$$\Gamma\left(-\frac{\varepsilon-1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\epsilon+1}{2}\right) = \frac{\pi}{\sin\left(-\frac{\pi(\varepsilon-1)}{2}\right)} \tag{463}$$

$$\begin{aligned}\frac{\Gamma\left(-\frac{\varepsilon-1}{2}\right)}{\Gamma\left(1+\frac{\varepsilon}{2}\right)} &= -\frac{\pi}{\sin\left(\frac{\pi(\varepsilon-1)}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\varepsilon}{2}+1\right)\Gamma\left(\frac{1+\varepsilon}{2}\right)} = -\frac{\pi}{\sqrt{\pi}2^{-\varepsilon}\varepsilon\Gamma(\varepsilon)\sin\left(\frac{\pi(\varepsilon-1)}{2}\right)} = \\ &= -\frac{2^\varepsilon\sqrt{\pi}}{\sin\left(\frac{\pi}{2}(n-1)+\frac{\pi}{2}\delta n\right)n\Gamma(n)} \approx \begin{cases} \frac{(-1)^k 2^\varepsilon\sqrt{\pi}}{n\Gamma(n)}, & n=2k+1 \\ \frac{(-1)^k 2^{\varepsilon+1}}{\sqrt{\pi}n\delta n\Gamma(n)}, & n=2k \end{cases}\end{aligned} \tag{464}$$

$$e^z - \frac{2^{n+1}\sqrt{\pi}}{\pi\delta n n\Gamma(n)} z^{n+\frac{1}{2}} = 0 \quad (n=2k+1) \tag{465}$$

$$\delta n = \frac{e^{-z}2^{n+1}}{\sqrt{\pi}n\Gamma(n)} z^{n+\frac{1}{2}} \tag{466}$$

Таким образом, $\forall n \in \mathbb{Z} \hookrightarrow \delta n = e^{-\frac{m\omega L^2}{\hbar}} \left(\frac{m\omega L^2}{\hbar}\right)^{n+\frac{1}{2}} \frac{2^{n+1}}{\sqrt{\pi}\Gamma(n+1)}$.

$$E_n = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n + \frac{2^{n+1} e^{-\frac{m\omega L^2}{\hbar}} \left(\frac{m\omega L^2}{\hbar}\right)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}\Gamma(n+1)}\right) \tag{467}$$

$$\boxed{F_n = -\frac{\partial E_n}{\partial L} \approx \frac{2^{n+2} m\omega^2 L e^{-\frac{m\omega L^2}{\hbar}} \left(\frac{m\omega L^2}{\hbar}\right)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}\Gamma(n+1)}} \tag{468}$$

Задача 3. Hydrogen atom in 2D (25 баллов)

Определите уровни энергии и кратности их вырождения, а также стационарные волновые функции для двумерной частицы, движущейся в притягивающем потенциале $U(\vec{r}) = -\frac{e^2}{r}$. Указание: задача приводится к вырожденной гипергеометрической функции ${}_1F_1$.

Решение.

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi - \frac{e^2}{r}\psi = E\psi \tag{469}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right) - \frac{e^2}{r}\psi = E\psi \tag{470}$$

Разделим переменные:

$$\psi(r,\varphi) = R(r)e^{im\varphi} \tag{471}$$

Введём замену: $\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$.

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial R}{\partial r} - \left(\frac{2Me^2}{\hbar^2 r} + \kappa^2 + \frac{m^2}{r^2}\right)R = 0 \tag{472}$$

Пусть $x = \kappa r$, тогда

$$R'' + \frac{R'}{x} - \left(1 + \frac{2Me^2}{\hbar^2\kappa x} + \frac{m^2}{x^2}\right)R = 0 \tag{473}$$

Введём замену $R = x^m f$:

$$R' = mx^{m-1}f + x^m f', \quad R'' = m(m-1)x^{m-2}f + 2mx^{m-1}f' + x^m f'' \tag{474}$$

$$xf'' + (2m+1)f' - \left(x + \frac{2Me^2}{\hbar^2\kappa}\right)f = 0 \tag{475}$$

$$x \to \infty : f'' - f = 0 \to f \sim e^{-x} \tag{476}$$

Введём замену $f(x) = e^{-x}\chi(x)$.

$$f'(x) = -e^{-x}\chi + e^{-x}\chi', \quad f''(x) = e^{-x}\chi - 2e^{-x}\chi' + e^{-x}\chi'' \tag{477}$$

$$x\chi'' + (2m+1-2x)\chi' - \left(2m+1+\frac{2Me^2}{\hbar^2\kappa}\right)\chi = 0 \tag{478}$$

$$\chi(x) = C_1F_1\left(m + \frac{1}{2} - \frac{Me^2}{\hbar^2\kappa}, 2m+1, 2x\right) \tag{479}$$

Второе линейно независимое решение сингулярно в 0.

$$m + \frac{1}{2} - \frac{Me^2}{\hbar^2\kappa} = -n \tag{480}$$

$$\boxed{E_{n,m} = -\frac{\hbar^2}{2M}\chi^2 = -\frac{Me^2}{2\hbar^2\left(|m| + n + \frac{1}{2}\right)^2}} \tag{481}$$

Пусть $N = |m| + n$, тогда кратность вырождения:

$$\boxed{K = 2N - 1} \tag{482}$$

$$\boxed{\psi(r,\varphi) = Ce^{im\varphi}\left(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r\right)^{|m|} e^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r} {}_1F_1\left(-n, 2m+1, 2\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r\right)} \tag{483}$$

7 Стационарная теория возмущений

Задачи (100 баллов)

Задача 1. Поляризуемость частицы на кольце (25 баллов)

Частица с массой M и зарядом e движется на кольце радиуса R. К системе прикладывается слабое электрическое поле $\mathcal{E}$ параллельно плоскости кольца. Определите поляризуемости $\alpha_n = -\frac{\partial^2 E_n}{\partial \mathcal{E}^2}$ всех уровней энергии.
Проведите вычисления, используя два различных базиса:

1. Базис состояний с фиксированным угловым моментом m («волны де-Бройля»)

2. Базис состояний с фиксированной чётностью

Указание: обратите внимание, что поскольку в задаче с приложенным электрическим полем чётность по-прежнему сохраняется, то для вычисления второго пункта применять вырожденную теорию возмущений нет необходимости.
Решение.

1. Базис состояний с фиксированным угловым моментом:

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2\Delta = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{484}$$

Невозмущённая задача:

$$\hat{H}_0\psi = E_m^{(0)}\psi \tag{485}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi = E_m^{(0)}\psi \to \psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \tag{486}$$

Константа получена из условия нормировки:

$$\int\limits_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_{m'} d\varphi = \delta(m - m') \tag{487}$$

Таким образом, $\psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, m \in \mathbb{Z}$ – базис волновых функций де Бройля. Энергия основного состояния:

$$E_m^{(0)} = \frac{m^2}{2MR^2} \tag{488}$$

Как видно, кратность вырождения энергии равна 2 (состояниям m и $-m$ соответствует энергия E_m).
Возмущённый гамильтониан:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2MR^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - e\mathcal{E}R\cos\varphi \tag{489}$$

Матричные элементы возмущения:

$$V_{\alpha\beta} \equiv \langle n_\alpha^{(0)}|\hat{V}|n_\beta^{(0)}\rangle = -e\mathcal{E}R\int\limits_0^{2\pi} \cos\varphi e^{i(\beta-\alpha)\varphi} d\varphi = -\frac{1}{2}e\mathcal{E}R(\delta_{\beta-\alpha,1} + \delta_{\beta-\alpha,-1}) \tag{490}$$

Как видно, $V_{\alpha\alpha} = 0$, а также вырождение не снято, поэтому нужно рассматривать 2 порядок. Эффективный гамильтониан:

$$\hat{H}_{\alpha\beta}^{(\text{eff})} = \sum_{m\neq n} \frac{V_{\alpha m}V_{m\beta}}{\omega_{mn}}, \quad \omega_{mn} = E_m^{(0)} - E_n^{(0)} = \frac{m^2 - n^2}{2MR^2} \tag{491}$$

Сужение гамильтониана:

$$\hat{H}_{\alpha\beta}^{(\text{eff})} = e^2\mathcal{E}^2MR^4 \begin{pmatrix} \frac{1}{4n^2-1} & \frac{\delta_{n,1}}{2} \\ \frac{\delta_{n,1}}{2} & \frac{1}{4n^2-1} \end{pmatrix} \tag{492}$$

Секулярное уравнение $\det(\hat{H}_{\alpha\beta}^{(\text{eff})} - E_n^{(2)}) = 0$ даёт решения

$$E_1^{(2)} = \frac{e^2\mathcal{E}^2MR^4}{6}, \quad E_1^{(2)} = -\frac{5e^2\mathcal{E}^2MR^4}{6}, \quad E_n^{(2)} = -\frac{e^2\mathcal{E}^2MR^4}{4n^2-1} \tag{493}$$

$$\boxed{\alpha_1 \in \{-\frac{e^2MR^4}{3}, \frac{5e^2MR^4}{3}\}, \quad \alpha_n = \frac{2e^2MR^4}{4n^2-1}} \tag{494}$$

Рассмотрим случай $n = 0$, в котором вырождения нет.

$$V_{00} = 0 \tag{495}$$

Второй порядок теории возмущений:

$$E_0^{(2)} = \sum_{n\neq 0} \frac{|V_{0n}|^2}{\omega_{0n}} \tag{496}$$

$$E_0^{(2)} = -e^2\mathcal{E}^2MR^4 \tag{497}$$

$$\boxed{\alpha_0 = 2e^2MR^4} \tag{498}$$

2. Базис состояний с фиксированной чётностью.
   Рассмотрим базис из функций:

$$\psi_m^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(m\varphi), \quad \psi_m^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(m\varphi) \tag{499}$$

   Матричные элементы возмущения:

$$V_{\alpha+,\beta+} = \frac{e\mathcal{E}R}{\varphi} \int_0^{2\pi} \cos(\varphi\alpha)\cos(\varphi\beta)\cos\varphi d\varphi = \frac{e\mathcal{E}R}{2} \left(\delta_{\alpha-\beta,1} + \delta_{\beta-\alpha,1} + \delta_{n+m,1}\right) \tag{500}$$

$$V_{\alpha-,\beta-} = \frac{e\mathcal{E}R}{\pi} \int_0^{2\pi} \sin(\varphi\alpha)\sin(\varphi\cdot\beta)\cos\varphi d\phi = \frac{e\mathcal{E}R}{2} \left(\delta_{\alpha-\beta,1} + \delta_{\alpha-\beta,1} - \delta_{\alpha+\beta,1}\right) \tag{501}$$

$$V_{\alpha-,\beta+} = \frac{e\mathcal{E}R}{\pi} \int_0^{2\pi} \sin(\varphi\alpha)\cos(\varphi\beta)\cos\varphi d\phi = 0 = V_{\alpha+,\beta-} \tag{502}$$

   Сужение эффективного гамильтониана:

$$\hat{H}^{(\text{eff})}_{\alpha\beta} = \frac{e^2\mathcal{E}^2 MR^4}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\delta_{n,1}}{2} + \frac{1}{4n^2-1} & 0 \\ 0 & -\frac{\delta_{n,1}}{2} + \frac{1}{4n^2-1} \end{pmatrix} \tag{503}$$

   Решая секулярное уравнение, получаем тот же ответ.
   В случае $n = 0$:

$$V_{0\beta,+} = \frac{e\mathcal{E}R}{\sqrt{2}} \delta_{n,1}, V_{0\beta,-} \equiv 0 \tag{504}$$

   Поправка к энергии получается такой же.

Задача 2. Двуслойный графен (15 баллов)

В силу решёточной структуры графена, волновая функция электронов представляет собой двухкомпонентный псевдоспинор $\psi(x) = (\psi_A(x), \psi_B(x))^T$, где различные компоненты отвечают различным подрешёткам. Возбуждения вблизи так называемой K-долины зоны Бриллюэна описываются эффективным гамильтонианом размера 2×2, который записывается следующим образом:

$$\hat{H} = v_F \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} = v_F(\hat{\sigma}_x \hat{p}_x + \hat{\sigma}_y \hat{p}_y) = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} \tag{505}$$

Для двуслойного графена, соответственно, волновая функция уже образует четырёхкомпонентный спинор

$$\psi(x) = (\psi_A^{(1)}(x), \psi_B^{(1)}(x), \psi_A^{(2)}(x), \psi_B^{(2)}(x)) \tag{506}$$

Если бы между не было никакого взаимодействия, то гамильтониан системы имеет просто блочно-диагональный вид $\hat{H} = v_F \begin{pmatrix} \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} & 0 \\ 0 & \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} \end{pmatrix}$; однако, если два листа графена положить друг на друга определённым образом, то возникает возможность туннелирования электронов между слоями. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & v_F(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) & 0 & 0 \\ v_F(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & v_F(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ 0 & 0 & v_F(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 \end{pmatrix} \tag{507}$$

При нулевом импульсе p, матрица имеет двукратно вырожденное собственное число 0 и однократно вырожденные числа $\pm\Delta$. Если мы исследуем свойства возбуждений при маленькой энергии $|E| \ll \Delta$ и, соответственно, малом импульсе $p \ll \frac{\Delta}{v_F}$, то высокоэнергетические состояния $\pm\Delta$ несущественны. Используя теорию возмущений, выведите эффективный гамильтониан, описывающий низкоэнергетические возбуждения, и определите спектр соответствующих двух зон.

Решение.

Пусть $a = v_F(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)$.

$$w_{11} = w_{14} = 0, \quad w_{12} = \Delta, \quad w_{13} = -\Delta \tag{508}$$

1 порядок не убирает вырождение по энергии.

$$\hat{V} = v_F \begin{pmatrix} \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} & 0 \\ 0 & \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}} \end{pmatrix} \tag{509}$$

$$H_{11}^{(1)} = \frac{V_{12}V_{21}}{\omega_{12}} + \frac{V_{13}V_{31}}{\omega_{13}} = -\frac{aa^\dagger}{\Delta}, \quad H_{14}^{(1)} = \frac{V_{12}V_{24}}{\omega_{12}} + \frac{V_{13}V_{34}}{\omega_{13}} = 0 \tag{510}$$

$$H_{41}^{(1)} = \frac{V_{42}V_{21}}{\omega_{12}} + \frac{V_{13}V_{31}}{\omega_{13}} = 0, \quad H_{44}^{(1)} = \frac{V_{42}V_{24}}{\omega_{12}} + \frac{V_{43}V_{34}}{\omega_{13}} = \frac{aa^\dagger}{\Delta} \tag{511}$$

$$\boxed{\hat{H}^{\text{eff}} = \frac{v_F^2 p^2}{\Delta} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} \tag{512}$$

$$\det(\hat{H}^{\text{eff}} - E_0^{(2)}) = 0 \to \boxed{E_0^{(2)} = \pm\frac{p^2}{\Delta}v_F^2} \tag{513}$$

Задача 3. Поляризуемость атома водорода (25 баллов)

Атом водорода находится в основном состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_{100}(r) = \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}$, где $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ – Боровский радиус. Он помещается в постоянное электрическое поле, описываемое гамильтонианом $\hat{V} = -e\mathcal{E}\hat{z}$; требуется определить сдвиг уровня энергии и поляризуемость основного состояния.

Для расчёта сдвига энергии во втором порядке теории возмущений, вообще говоря, необходимо вычислять все матричные элементы $\langle 1,0,0|\hat{z}|n,l,m\rangle$, а кроме них – ещё и матричные элементы $\langle 1,0,0|\hat{z}|k,l,m\rangle$ (k определяет энергию $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$) для состояний непрерывного спектра, а затем вычислять соответствующую сумму и интеграл. Это сложная задача; но, к счастью, тут можно поступить иначе. Для этого первую поправку по теории возмущений к волновой функции предлагается найти *точно*, а не искать её в виде разложения.

1. Напишите точное уравнение для поправки первого порядка $\psi^{(1)}(r)$ по теории возмущений. Покажите, что в нём можно разделить переменные, сделав анзац $\psi^{(1)}(r,\theta) = f(r)e^{-r/a}\cos\theta$; напишите уравнение на функцию $f(r)$.
   Hint: обезразмерьте это уравнение!

2. Покажите, что это уравнение имеет простое полиномиальное решение $f(r) = A + Br + Cr^2$; найдите A, B, C.

3. Найдя волновую функцию, вычислите поправку $E_{100}^{(2)}$ и поляризуемость α.

Замечание: альтернативный способ решения задачи об атоме водорода в постоянном электрическом поле — это использование параболических координат. Эти координаты замечательны в частности тем, что в них разделяются переменные и в электрическом поле; а кроме этого, лишь небольшое количество матричных элементов оператора $\hat{z}$ отлично от нуля. Именно благодаря этому обстоятельству поправка первого порядка и имеет такой простой вид.
Решение.

1. Гамильтониан невозмущённой системы:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \tag{514}$$

Волновая функция и энергия основного состояния:

$$\psi^{(0)}(r) = \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}, \quad E^{(0)} = -\frac{e^2}{2a} \tag{515}$$

Возмущение:

$$\hat{V} = -e\mathcal{E}\hat{z} \tag{516}$$

$$\psi = \psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r,\theta) \tag{517}$$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})(\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r,\theta)) = (E^{(0)} + E^{(1)})(\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r,\theta)) \tag{518}$$

$$z = r\cos\theta \tag{519}$$

$$\hat{H}_0\psi^{(1)} + \hat{V}\psi^{(0)} = E^{(0)}\psi^{(1)} \tag{520}$$

$$-\frac{ae^2}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2}\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\psi^{(1)}(r,\theta) - \frac{e^2}{r}\psi^{(1)}(r,\theta) - \frac{e\mathcal{E}e^{-\frac{r}{a}}}{\sqrt{\pi a^3}}r\cos\theta = \\ = -\frac{e^2}{2a}\psi^{(1)}(r,\theta) \tag{521}$$

$$\psi^{(1)}(r,\theta) = f(r)e^{-r/a}\cos\theta \tag{522}$$

$$\frac{af''(r)}{2} + \frac{(a-r)f'(r)}{r} + \frac{r^2 - 2ar - 2a^2}{2ar^2}f(r) + \frac{f(r)}{r} + \frac{\mathcal{E}r}{e\sqrt{\pi a^3}} = \frac{f(r)}{2a} \tag{523}$$

$$\frac{af''(r)}{2} + \frac{(a-r)f'(r)}{r} - \frac{af(r)}{r^2} + \frac{\mathcal{E}r}{e\sqrt{\pi a^3}} = 0 \tag{524}$$

Пусть $x = \frac{r}{a}$, тогда

$$\boxed{f''(x) + \frac{2(1-x)f'(x)}{x} - \frac{2f(x)}{x^2} + 2\sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\mathcal{E}x}{e} = 0} \tag{525}$$

2. Данное уравнение имеет простое полиноминальное решение:

$$f(x) = A + Bx + Cx^2 \tag{526}$$

$$C + \frac{(1-x)(B+2Cx)}{x} - \frac{A + Bx + Cx^2}{x^2} + \sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\mathcal{E}x}{e} = 0 \tag{527}$$

$$2C - B - 2Cx - \frac{A}{x^2} + \sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\mathcal{E}x}{e} = 0 \tag{528}$$

Приравняем коэффициенты при каждой степени:

$$\begin{cases} A = 0, \\ 2C - B = 0. \\ C = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\mathcal{E}}{2e} \end{cases} \tag{529}$$

$$\boxed{A = 0, \quad B = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\mathcal{E}}{e}, \quad C = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\mathcal{E}}{2e}} \tag{530}$$

3.

$$f(x) = A + Bx + Cx^2 = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\mathcal{E}x}{e}\left(1 + \frac{x}{2}\right) \tag{531}$$

$$\psi^{(1)}(r,\theta) = f(r)e^{-r/a}\cos\theta \tag{532}$$

$$\boxed{\psi^{(1)}(r,\theta) = \frac{\mathcal{E}r}{e\sqrt{\pi a}}\left(1 + \frac{r}{2a}\right)e^{-r/a}\cos\theta} \tag{533}$$

2 порядок теории возмущений:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})(\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r,\theta) + \psi^{(2)}(r,\theta)) = (E^{(0)} + E^{(2)})(\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r,\theta) + \psi^{(2)}(r,\theta)) \tag{534}$$

$$\hat{H}_0\psi^{(2)}(r,\theta) + \hat{V}\psi^{(1)}(r,\theta) = E^{(0)}\psi^{(2)}(r) + E^{(2)}\psi^{(0)}(r) \tag{535}$$

$$E^{(2)} = \langle\psi^{(0)}(r)|\hat{V}|\psi^{(1)}(r,\theta)\rangle = \int\limits_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int\limits_{1}^{-1} d\cos\theta \int\limits_{0}^{\infty} drr^2 \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}(-e\mathcal{E}r\cos\theta)\frac{\mathcal{E}r}{e\sqrt{\pi a}} *$$
$$\left(1 + \frac{r}{2a}\right)e^{-r/a}\cos\theta = -\frac{9}{4}a^3\mathcal{E}^2 \tag{536}$$

$$\boxed{E^{(2)} = -\frac{9}{4}a^3\mathcal{E}^2} \tag{537}$$

$$\boxed{\chi = -\frac{\partial^2 E^{(2)}}{\partial\mathcal{E}^2} = \frac{9a^3}{2}} \tag{538}$$

Задача 4. Суперсимметричная квантовая механика (45 баллов)
Рассмотрите для простоты квантовый гармонический осциллятор для частицы массы $m = 1$ с частотой $\omega = 1$, гамильтониан которого имеет вид $\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \hat{x}^2 - 1)$, так что основное состояние имеет нулевую энергию $E_0 = 0$. Помимо этого, осциллятор содержит ангармонизм *очень* специального вида $V(x) = gx(1-x^2) + \frac{1}{2}g^2x^4$; безразмерный параметр $g \ll 1$. Требуется исследовать сдвиг энергии основного состояния с точки зрения теории возмущений.

1. **(10 баллов)** Найдите поправку $O(g^2)$ к энергии основного состояния осциллятора.

2. **(10 баллов)** Полученный ответ должен вас натолкнуть на мысль, что нужно считать старшие порядки ТВ (если нет, то перепроверьте). Удобнее всего это делать в координатном базисе, выписывая явно дифференциальные уравнения на поправки к волновым функциям. Выпишите такое уравнение на поправки $O(g)$ и $O(g^2)$, и решите их явно.

3. **(15 баллов)** Проделайте это в *произвольном* порядке теории возмущений, выпишите явно поправку произвольного порядка к волновой функции $\psi_0^{(n)}(x)$ и $E_0^{(n)}$. Просуммируйте весь ряд теории возмущений, и убедитесь, что вы, в действительности, нашли *точное решение* соответствующего уравнения Шрёдингера. Расстройтесь, потому что это решение никак не позволяет ответить на вопрос, каков же в действительности сдвиг энергии основного состояния δE_0.

4. **(5 баллов)** Очевидно, что поправка к энергии основного состояния всё-таки имеется – но она *непертурбативна*, для неё невозможно построить асимптотический ряд по степеням малого параметра g. Не смотря на это, теорией возмущений всё-таки можно пользоваться для приближения основного состояния, просто использовать для этого *полный ряд* теории возмущений незаконно. Используя критерии применимости теории возмущений, определите максимальный порядок n^*, до которого результату ещё можно верить.

5. **(5 баллов)** Погрешность асимптотического ряда для волновой функции – то есть отличие истинной волновой функции от вычисленной при помощи ряда теории возмущений – может быть оценена как член ряда теории возмущений с порядковым номером n^*. Оцените с экспоненциальной точностью квадрат нормы $\langle\delta\psi|\delta\psi\rangle$ этой погрешности; это даст также и оценку отличия энергии основного состояния от нуля.

Указание: хотя возмущение и содержит линейный член по x, с точки зрения вычислений оказывается удобно не сдвигать центр осциллятора.

Решение.

1. Обозначим возмущения $V_1 = gx(1-x^2)$, $V_2(x) = \frac{g^2x^4}{2}$. Основное состояние осциллятора: $\psi^{(0)}(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}}$.
   Рассмотрим 1 порядок теории возмущений:
   $$(\hat{H} + \hat{V}_1)(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle) = (E^{(0)} + E^{(1)})(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle) \tag{539}$$
   Поскольку $E^{(0)} = E_0 = 0$, то $\hat{H}\,|\psi^{(0)}\rangle = 0$ и
   $$\hat{V}_1\,|\psi^{(0)}\rangle + \hat{H}\,|\psi^{(1)}\rangle = E^{(1)}\,|\psi^{(0)}\rangle \tag{540}$$
   Домножив скалярно на $\langle\psi^{(0)}|$, получим
   $$\langle\psi^{(0)}|\,\hat{V}_1\,|\psi^{(0)}\rangle + \langle\psi^{(0)}|\,\hat{H}\,|\psi^{(1)}\rangle = \langle\psi^{(0)}|\,E^{(1)}\,|\psi^{(0)}\rangle \tag{541}$$

$$E^{(1)} = \langle\psi^{(0)}|\,\hat{V}_1\,|\psi^{(0)}\rangle \tag{542}$$

Из нечётности $\hat{V}_1$ получим

$$\boxed{E^{(1)} = 0} \tag{543}$$

Полученный ответ наталкивает на мысль перейти ко 2 пункту.

2. 1 порядок теории возмущений:

$$\hat{H}\psi^{(1)} + \hat{V}^{(1)}\psi^{(0)} = 0 \tag{544}$$

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - 1\right)\psi^{(1)}(x) + gx(1-x^2)\frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} = 0 \tag{545}$$

$$\psi^{(1)}(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}f(x) \tag{546}$$

$$\left(fe^{-\frac{x^2}{2}}\right)'' = \left(-xfe^{-\frac{x^2}{2}} + f'e^{-\frac{x^2}{2}}\right)' = e^{-\frac{x^2}{2}}((x^2-1)f(x) - 2xf'(x) + f''(x)) \tag{547}$$

$$2xf'(x) - f''(x) + \frac{2gx(1-x^2)}{\sqrt[4]{\pi}} = 0 \tag{548}$$

Ищем $f(x)$ в виде:

$$f(x) = Bx + Cx^2 + Dx^3 \tag{549}$$

$$2x(B + 2Cx + 3Dx^2) - 2C - 6Dx + \frac{2gx(1-x^2)}{\sqrt[4]{\pi}} = 0 \tag{550}$$

$$\begin{cases} C = 0, \\ 2B - 6D + \frac{2g}{\sqrt[4]{\pi}} = 0, \\ 6D - \frac{2g}{\sqrt[4]{\pi}} = 0. \end{cases} \tag{551}$$

$$B = C = 0, \quad D = \frac{g}{3\sqrt[4]{\pi}} \tag{552}$$

$$f(x) = \frac{gx^3}{3\sqrt[4]{\pi}} \tag{553}$$

$$\boxed{\psi^{(1)}(x) = \frac{gx^3e^{-\frac{x^2}{2}}}{3\sqrt[4]{\pi}}} \tag{554}$$

Рассмотрим 2 порядок теории возмущений:

$$(\hat{H} + \hat{V}_1 + \hat{V}_2)(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + |\psi^{(2)}\rangle) = (E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)})(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + |\psi^{(2)}\rangle) \tag{555}$$

$$\hat{H}\,|\psi^{(2)}\rangle + \hat{V}_1\,|\psi^{(1)}\rangle + \hat{V}_2\,|\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)}\,|\psi^{(2)}\rangle + E^{(1)}\,|\psi^{(1)}\rangle + E^{(2)}\,|\psi^{(0)}\rangle \tag{556}$$

Домножим скалярно на $\langle\psi^{(0)}|$ и воспользуемся тем, что $E^{(0)} = 0$:

$$\langle\psi^{(0)}|\,\hat{V}_1\,|\psi^{(1)}\rangle + \langle\psi^{(0)}|\,\hat{V}_2\,|\psi^{(0)}\rangle = E^{(2)} \tag{557}$$

$$E^{(2)} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{gx^3 e^{-\frac{x^2}{2}}}{3\sqrt[4]{\pi}} gx(1-x^2)dx + \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \frac{g^2x^4}{2} dx = -\frac{3g^2}{8} + \frac{3g^2}{8} = 0 \tag{558}$$

$$\boxed{E^{(2)} = 0} \tag{559}$$

$$\hat{H}^{(0)}\psi^{(2)} + \hat{V}^{(1)}\psi^{(1)} + \hat{V}^{(2)}\psi^{(0)} = 0 \tag{560}$$

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2\right)\psi^{(2)} + gx(1-x^2)\frac{gx^3}{3\sqrt[4]{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}} + \frac{g^2x^4 e^{-\frac{x^2}{2}}}{2\sqrt[4]{\pi}} = 0 \tag{561}$$

Решая ДУ аналогично предыдущему, получим

$$\boxed{\psi^{(2)} = \frac{g^2x^6}{18\sqrt[4]{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}} \tag{562}$$

3. Рассмотрим произвольный n-й порядок теории возмущений:

$$\hat{H}\left|\psi^{(n)}\right\rangle + \hat{V}_1\left|\psi^{(n-1)}\right\rangle + \hat{V}_2\left|\psi^{(n-2)}\right\rangle = E^{(0)}\left|\psi^{(n)}\right\rangle + E^{(1)}\left|\psi^{(n-1)}\right\rangle + ... + E^{(n)}\left|\psi^{(0)}\right\rangle \tag{563}$$

Домножим скалярно на $\left\langle\psi^{(0)}\right|$ и воспользуемся тем, что $E^{(0)} = 0$:

$$E^{(n)} = \left\langle\psi^{(0)}\right|\hat{V}_1\left|\psi^{(n-1)}\right\rangle + \left\langle\psi^{(0)}\right|\hat{V}_2\left|\psi^{(n-2)}\right\rangle \tag{564}$$

Докажем по индукции одновременно 2 утверждения: $E^{(n)} = 0$ и $\psi^{(n)} = \frac{g^n x^{3n}}{\sqrt[4]{\pi}3^n n!}e^{-\frac{x^2}{2}}$. Пусть это верно $\forall k \leq n-1$. Тогда

$$E^{(n)} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{g^n x^{3(n-1)}}{\sqrt[4]{\pi}3^{n-1}(n-1)!} e^{-\frac{x^2}{2}} gx(1-x^2)dx + \\ + \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{g^{n-2}x^{3(n-2)}}{\sqrt[4]{\pi}3^{n-2}(n-2)!} e^{-\frac{x^2}{2}} \frac{g^2x^4}{2} dx = -\frac{3^{2-n}(1+(-1)^{3n})g^n\Gamma(\frac{3n}{2}-\frac{1}{2})}{4\sqrt{\pi}(n-2)!} + \\ + \frac{3^{2-n}(1+(-1)^{3n})g^n\Gamma(\frac{3n}{2}-\frac{1}{2})}{4\sqrt{\pi}(n-2)!} = 0 \tag{565}$$

$$\boxed{E^{(n)} = 0} \tag{566}$$

Теперь проверим, что будет выполняться:

$$\hat{H}\psi^{(n)} + \hat{V}^{(1)}\psi^{(n-1)} + \hat{V}^{(2)}\psi^{(n-2)} = 0 \tag{567}$$

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2\right)\frac{g^n x^{3n}}{\sqrt[4]{\pi}3^n n!}e^{-\frac{x^2}{2}} + gx(1-x^2)\frac{g^{n-1}x^{3(n-1)}}{\sqrt[4]{\pi}3^{n-1}(n-1)!}e^{-\frac{x^2}{2}} + \\ + \frac{g^2x^4}{2}\frac{g^{n-2}x^{3(n-2)}}{\sqrt[4]{\pi}3^{n-2}(n-2)!}e^{-\frac{x^2}{2}} = 0 \tag{568}$$

Таким образом, поправка произвольного порядка к волновой функции:

$$\boxed{\psi^{(n)} = \frac{g^n x^{3n}}{\sqrt[4]{\pi} 3^n n!} e^{-\frac{x^2}{2}}} \tag{569}$$

Просуммируем ряд возмущений:

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^n x^{3n}}{\sqrt[4]{\pi} 3^n n!} e^{-\frac{x^2}{2}} = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{gx^3}{3} \right)^n = \frac{\exp\left(g\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} \right)}{\sqrt[4]{\pi}} \tag{570}$$

Проверим, что это точное решение уравнения Шрёдингера:

$$\left(\frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - 1 \right) + gx(1 - x^2) + \frac{g^2 x^4}{2} \right) \psi(x) = E\psi(x) \tag{571}$$

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - 1 \right) \psi(x) = -\frac{gx(2 - 2x^2 + gx^3)}{2\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(g\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} \right) \tag{572}$$

$$\left(\frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - 1 \right) + gx(1 - x^2) + \frac{g^2 x^4}{2} \right) \psi(x) = 0 \tag{573}$$

Таким образом, точное решение уравнения Шрёдингера:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{\exp\left(g\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} \right)}{\sqrt[4]{\pi}}} \tag{574}$$

Расстраиваемся, поскольку это решение никак не позволяет ответить на вопрос, какой сдвиг энергии $\delta E_0 = \sum\limits_{n=0}^{\infty} E^{(n)} = 0$.

4. Критерий применимости теории возмущений:

$$\langle \psi^{(n)} | \psi^{(n)} \rangle \gg \langle \psi^{(n+1)} | \psi^{(n+1)} \rangle \tag{575}$$

$$\langle \psi^{(n)} | \psi^{(n)} \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{g^{2n} x^{6n}}{\sqrt{\pi} 3^{2n} (n!)^2} e^{-x^2} dx = \frac{g^{2n} \Gamma(3n + \frac{1}{2})}{\sqrt{\pi} 3^{2n} \Gamma(n+1)^2} = \frac{g^{2n} (6n)!}{2^{6n} 3^{2n} (n!)^2 (3n)!} \tag{576}$$

При больших n воспользуемся формулой Стирлинга:

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e} \right)^n \tag{577}$$

$$\langle \psi^{(n)} | \psi^{(n)} \rangle \sim \frac{g^{2n} \sqrt{12\pi n} (6n)^{6n}}{2^{6n} 3^{2n} 2\pi n^{2n+1} \sqrt{6\pi n} (3n)^{3n}} = \frac{3^n g^{2n} n^{n-1}}{\sqrt{2}\pi} \tag{578}$$

$$\frac{\langle \psi^{(n+1)} | \psi^{(n+1)} \rangle}{\langle \psi^{(n)} | \psi^{(n)} \rangle} = \frac{3g^2 (n+1)^n}{n^{n-1}} \approx 3g^2 n \ll 1 \tag{579}$$

$$n^* \gg \frac{1}{3g^2} \tag{580}$$

Например, можно взять другую степень g:

$$\boxed{n^* = \frac{1}{3g}} \tag{581}$$

5. Подставим n^*:

$$\boxed{\langle\delta\psi|\delta\psi\rangle = \langle\psi^{(n^*)}|\psi^{(n^*)}\rangle = \frac{3^{n^*}g^{2n^*}(n^*)^{n^*-1}}{\sqrt{2}\pi}} \tag{582}$$

8 Нестационарная теория возмущений

Задача 1. Осцилляция Раби (20 баллов)

К атому водорода, находящемся в основном состоянии, прикладывается переменное электрическое поле $\hat{V} = -e\mathcal{E}\hat{z}cos(\omega t)$ с частотой $\omega = \frac{3}{4}\mathrm{Ry}+\varepsilon$, где «отстройка частоты» и характерная величина электрического поля $e\mathcal{E}a$, $\varepsilon \ll \mathrm{Ry}$ (тут $\mathrm{Ry} = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ – постоянная Ридберга, а $a = \frac{1}{me^2}$ – Боровский радиус); в то же время, соотношение поля $\mathcal{E}$ и отстройки частоты ε, вообще говоря, произвольно. Определите вероятность обнаружить частицу в основном и первом возбуждённом состояниях $n = 1$ и $n = 2$ через большое время T.

Решение.

Нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t))\,|\psi(t)\rangle \tag{583}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad \hat{V}(t) = -e\mathcal{E}\hat{z}cos(\omega t), \quad \hat{z} = r\cos\theta \tag{584}$$

Эволюция основного и возбуждённого состояний, если бы не было возмущения:

$$|\psi_1(t)\rangle = e^{-\frac{\mathrm{iRy}t}{\hbar}}|\psi_1\rangle, \quad |\psi_2(t)\rangle = e^{-\frac{\mathrm{iRy}t}{4\hbar}}|\psi_2\rangle \tag{585}$$

Нестационарная теория возмущений:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = V_{21}\psi_1(t), \quad V_{21} = \langle\psi_2(t)|\,\hat{V}(t)\,|\psi_1(t)\rangle \tag{586}$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = -e\mathcal{E}\cos(\omega t)e^{\frac{3i\mathrm{Ry}t}{4\hbar}}\langle\psi_2|\,r\cos\theta\,|\psi_1\rangle\,\psi_1(t) \tag{587}$$

$$\langle\psi_2|\,r\cos\theta\,|\psi_1\rangle = \iint d\Omega r^3\cos\theta R_{2,1}Y_{1,0}R_{1,0}Y_{0,0} = \frac{2^6\sqrt{2}a}{3^4} \tag{588}$$

Остальные усреднения с ψ_2 при $n = 2$: $l = 0, m = 0$, $l = 1, m = -1$, $l = 1, m = 1$ дают 0 ввиду нечётности по углу θ.

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = -e\mathcal{E}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})e^{\frac{3i\mathrm{Ry}t}{4\hbar}}\frac{2^5\sqrt{2}a}{3^4}\psi_1(t) = -e\mathcal{E}e^{-\frac{i\epsilon t}{\hbar}}\frac{2^5\sqrt{2}a}{3^4}\psi_1(t) \tag{589}$$

где в последнем слагаемом пренебрегли быстроосциллирующим слагаемым. По аналогии,

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = -e\mathcal{E}e^{\frac{i\epsilon t}{\hbar}}\frac{2^5\sqrt{2}a}{3^4}\psi_2(t) \tag{590}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial\psi_1}{\partial t} = i\frac{e\mathcal{E}a}{\hbar}e^{\frac{i\epsilon t}{\hbar}}\frac{2^5\sqrt{2}}{3^4}\psi_2(t), \\ \frac{\partial\psi_2}{\partial t} = i\frac{e\mathcal{E}a}{\hbar}e^{-\frac{i\epsilon t}{\hbar}}\frac{2^5\sqrt{2}}{3^4}\psi_1(t). \end{cases} \tag{591}$$

Решая полученную систему, получим

$$\psi_2(t) = -ie^{-i\frac{\epsilon}{2}t}\frac{C}{\sqrt{\epsilon^2+C^2}}\sin\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2+C^2}}{2\hbar}t\right) \tag{592}$$

где $C = \frac{2^6\sqrt{2}}{3^4}e\mathcal{E}a$.
Вероятность оказаться в возбуждённом состоянии:

$$\boxed{P_{n=2}(T) = \frac{C^2}{\epsilon^2+C^2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2+C^2}}{2\hbar}T\right)} \tag{593}$$

Вероятность остаться в основном состоянии:

$$\boxed{P_{n=1}(T) = 1-\frac{C^2}{\epsilon^2+C^2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2+C^2}}{2\hbar}T\right)} \tag{594}$$

Задача 2. Эффект Ландау-Зенера (15 баллов)
Рассмотрим произвольную двухуровневую систему, описываемую волновой функцией $|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix}\psi_1(t)\\ \psi_2(t)\end{pmatrix}$ и следующим гамильтонианом, зависящим от времени:

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix}\alpha t & \gamma\\ \gamma & -\alpha t\end{pmatrix} \tag{595}$$

В начальный момент времени $t\to-\infty$, система находилась в первом состоянии (так что $|\psi_1(t\to-\infty)|^2 = 1$). Определите вероятность перехода системы во второе состояние после такой эволюции $|\psi_2(t\to\infty)|^2$, считая «скорость движения уровней» большой $\alpha \gg \gamma^2$.
Решение.
Выделим в гамильтониане невозмущённую и возмущённую части:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{V}(t), \quad \hat{H}_0(t) = \begin{pmatrix}\alpha t & 0\\ 0 & -\alpha t\end{pmatrix}, \hat{V} = \begin{pmatrix}0 & \gamma\\ \gamma & 0\end{pmatrix} \tag{596}$$

Эволюция состояний, если бы не было возмущения ($\gamma = 0$):

$$i\hbar\frac{\partial|\psi_1(t)\rangle}{\partial t} = \alpha t\,|\psi_1\rangle\,, \quad i\hbar\frac{\partial|\psi_2(t)\rangle}{\partial t} = -\alpha t\,|\psi_2\rangle \tag{597}$$

$$|\psi_1(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\alpha t^2}{2\hbar}\right)|\psi_1\rangle\,, \quad |\psi_1(t)\rangle = \exp\left(i\frac{\alpha t^2}{2\hbar}\right)|\psi_1\rangle \tag{598}$$

Нестационарная теория возмущений:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2(t)}{\partial t} = V_{21}\psi_1(t), \quad V_{21} = \langle\psi_2(t)|\,\hat{V}\,|\psi_1(t)\rangle \tag{599}$$

$$V_{21} = \gamma\exp\left(-i\alpha t^2\right) \tag{600}$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2(t)}{\partial t} = \gamma\exp\left(-i\alpha t^2\right)\psi_1(t) \approx \gamma\exp\left(-i\alpha t^2\right) \tag{601}$$

$$\psi_2(t\to\infty) = -\frac{i\gamma}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-i\alpha t^2\right)dt = \frac{\sqrt{\pi}i\gamma}{\sqrt{\alpha}\hbar} \tag{602}$$

Вероятность перехода системы во второе состояние:

$$\boxed{P = \frac{\pi\gamma^2}{\alpha\hbar^2}} \tag{603}$$

Задача 3. Осциллятор (15 баллов)
Рассмотрите электрон, движущийся в потенциале гармонического осциллятора. К системе приложено меняющееся со временем электрическое поле, так что Гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} + e\mathcal{E}(t)\hat{x}, \quad \mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \tag{604}$$

При $t\to-\infty$, электрон находится в основном состоянии системы. Определите вероятность обнаружить его в произвольном n-том возбуждённом состоянии при $t\to+\infty$ в ведущем порядке теории возмущений (считая поле слабым $e^2\mathcal{E}^2 \ll m\omega^3$).
Решение.
Эволюция состояний, если бы не было возмущения:

$$|n(t)\rangle = e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} \tag{605}$$

Определим, какие матричные элементы возмущения вообще отличны от нуля. Используя лестничные операторы, видно, что отличны от нуля только переходы между соседними уровнями:

$$V_{nm}(t) = -e\mathcal{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}\langle n(t)|\, x\, |m(t)\rangle = -\frac{e\mathcal{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}}{\sqrt{2m\omega}}\begin{cases} e^{i\omega t}\sqrt{n}, & m = n-1 \\ e^{-i\omega t}\sqrt{n+1}, & m = n+1 \end{cases} \tag{606}$$

n-ый порядок теории возмущений:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_n(t)}{\partial t} = V_{nn-1}\psi_{n-1}(t) = -\frac{e\mathcal{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}e^{i\omega t}}{\sqrt{2m\omega}}\sqrt{n}\psi_{n-1}(t) \tag{607}$$

$$\psi_n(t\to\infty) = \left(\frac{ie\mathcal{E}_0}{\hbar\sqrt{2m\omega}}\right)^n\sqrt{n!}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\tau_1 e^{-\frac{\tau_1^2}{\tau^2}+i\omega\tau_1}\int\limits_{-\infty}^{\tau_1}d\tau_2 e^{-\frac{\tau_2^2}{\tau^2}+i\omega\tau_2}\ldots\int\limits_{-\infty}^{\tau_{n-1}}d\tau_n e^{-\frac{\tau_n^2}{\tau^2}+i\omega\tau_n} \tag{608}$$

Эти интегралы можно превратить в интеграл по всему $\mathbb{R}^n$, разделив на 2^{n-1}:

$$\psi_n(t\to\infty) = 2^{1-n}\left(\frac{ie\mathcal{E}_0}{\hbar\sqrt{2m\omega}}\right)^n\sqrt{n!}\int\limits_{\mathbb{R}^n}dt^n e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}e^{i\omega\sum\limits_{i=1}^{n}t_i} = \frac{2}{\sqrt{n!}}\left(\frac{ie\mathcal{E}_0\sqrt{\pi}\tau e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{4}}}{2\hbar\sqrt{2m\omega}}\right)^n \tag{609}$$

Вероятность оказаться в n-том состоянии:

$$\boxed{P_n = \frac{4}{n!}\left(\frac{e^2\mathcal{E}_0^2\pi\tau^2 e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{2}}}{8m\hbar^2\omega}\right)^n} \tag{610}$$

9 Адиабатическое приближение в нестационарных задачах. Фаза Берри

Упражнения (10 баллов)
Упражнение 1. Ионизация (5 баллов)
Имеется двухъямный потенциал $U(x) = -\frac{\kappa}{m}\left[\delta(x+\frac{L(t)}{2}) + \delta(x-\frac{L(t)}{2})\right]$. В начальный момент времени ямы разнесены друг от друга бесконечно далеко, $L \to \infty$, и электрон находится в одной из ям. Расстояние между ямами затем меленно уменьшается до нуля, так что в какой-то момент времени две ямы сливаются в одну: $U(x) = -\frac{2\kappa}{m}\delta(x)$. Определите, с какой вероятностью электрон останется в яме в результате такого процесса.
Решение.
Воспользуемся решением 3 задачи 3 недели. При $L \to \infty$ реализуется туннельный режим. Волновая функция электрона в начальный момент времени:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\text{чёт}} + \psi_{\text{нечет}}) \tag{611}$$

где $\psi_{\text{чёт}}$ – чётная волновая функция, $\psi_{\text{нечет}}$ – нечётная. Нечётное состояние существует только при $\kappa L \geq 1$. Поэтому при $L \to 0$ выживет только чётное связанное состояние, нужно узнать вероятность нахождения электрона в нём. По адиабатической теореме в процессе, состояние частицы в произвольный момент времени электрон будет оставаться в состоянии той чётности, в котором он оказался в начальный момент.

$$\psi_{\text{чёт}}(t) \propto \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{чёт}}(0) \tag{612}$$

Вероятность остаться в яме:

$$\boxed{P = \frac{1}{2}} \tag{613}$$

Упражнение 2. Дышите глубже (5 баллов)
Частица массы m движется в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины $a(t)$, которая меняется во времени согласно следующему закону:

$$a(t) = a(1 - \alpha \sin^2 \omega t), \quad \alpha < 1 \tag{614}$$

При каких условиях в такой задаче следует ожидать применимость адиабатического приближения?
Решение.
Уровни энергии в бесконечно глубокой яме:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2} \tag{615}$$

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2(2n+1)}{2ma^2} \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{616}$$

Критерий адиабатичности:

$$\omega \ll \Delta E \tag{617}$$

Таким образом, условия применимости адиабатичности:

$$\boxed{\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \gg \omega} \tag{618}$$

Задачи (90 баллов)

Задача 1. Переворот спина (20 баллов)

Спин-$1/2$ находится в магнитном поле $\vec{B}$, которое медленно вращается в плоскости yz:

$$\hat{H} = -\mu\vec{B}\cdot\hat{\vec{\sigma}}, \quad \vec{B}(t) = B\left(0, \frac{1}{\cosh\omega t}, -\tanh\omega t\right) \tag{619}$$

и $\omega \ll \mu B$. В начальный момент времени $t \to -\infty$ спин и магнитное поле направлены по оси z. Найдите в первом неисчезающем порядке вероятность того, что спин останется направленным по оси z после завершения вращения при $t \to \infty$.

Решение.

$$\hat{H} = -\mu\vec{B}\cdot\hat{\vec{\sigma}} = -\mu\begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z\end{pmatrix} = \mu B\begin{pmatrix}\tanh\omega t & \frac{i}{\cosh\omega t} \\ -\frac{i}{\cosh\omega t} & -\tanh\omega t\end{pmatrix} \tag{620}$$

Собственные значения и векторы этой матрицы:

$$E_- = -\mu B, \quad E_+ = \mu B \tag{621}$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+e^{-2\omega t}}}\begin{pmatrix} -ie^{-\omega t} \\ 1\end{pmatrix}, \quad |\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+e^{2\omega t}}}\begin{pmatrix} ie^{\omega t} \\ 1\end{pmatrix} \tag{622}$$

В начальный момент $c_- = 1$, $c_+ = 0$. Нестационарная адиабатика:

$$c_+(T\to\infty) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(i\int\limits_0^t \omega_{+-}(\tau)d\tau\right)\frac{\langle\psi_+|\,\partial_t\hat{H}\,|\psi_-\rangle}{\omega_{+-}(t)}dt, \quad \omega_{+-} = E_+ - E_- = 2\mu B \tag{623}$$

$$\partial_t\hat{H} = \frac{\mu B\omega}{\cosh^2\omega t}\begin{pmatrix} 1 & -i\sinh\omega t \\ i\sinh\omega t & -1\end{pmatrix} \tag{624}$$

$$\langle\psi_+|\,\partial_t\hat{H}\,|\psi_-\rangle = -\frac{\mu B\omega}{\cosh\omega t} \tag{625}$$

$$c_-(T\to\infty) = -\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp(i2\mu Bt)}{2\cosh\omega t}\omega dt = -\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(i\frac{2\mu Bx}{\omega}\right)}{2\cosh x}dx \tag{626}$$

Вычислим интеграл при помощи вычетов. Нули знаменателя: $z_k = \pi i\left(\frac{1}{2}+k\right), k\in\mathbb{Z}$. Берём только полюс $z_0 = \frac{i\pi}{2}$.

$$c_-(T\to\infty) = -2\pi i \operatorname*{res}_{z=\frac{i\pi}{2}}\frac{\exp\left(i\frac{2\mu Bz}{\omega}\right)}{2\cosh z} = -\pi\exp\left(-\frac{\pi\mu B}{\omega}\right) \tag{627}$$

Вероятность того, что спин будет направлен по оси z:

$$\boxed{P = \pi^2\exp\left(-\frac{2\pi\mu B}{\omega}\right)} \tag{628}$$

Задача 2. Эффект Ааронова-Бома (35 баллов)

Электрон может двигаться по кольцу радиуса R, и находится в связанном состоянии потенциальной ямы $U(\varphi) = -U_0\delta(\varphi-\varphi_0)$. Через кольцо пропускают магнитный поток Φ, так что гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p}_\varphi - \frac{e}{c}A_\varphi)^2}{2m} - U_0\delta(\varphi-\varphi_0), \quad \hat{p}_\varphi = -\frac{i}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad A_\varphi = \frac{\Phi}{2\pi R} \tag{629}$$

Яму адиабатически медленно обводят вокруг кольца по часовой стрелке — величина φ_0 меняется от $\varphi_0(0) = 0$ до $\varphi_0(T) = 2\pi$. Определите зависимость фазы, которую получит волновая функция электрона в результате такой эволюции, от энергии в режиме, когда размер связанного состояния много меньше радиуса кольца.

Решение.

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}\psi(\varphi) = E\psi(\varphi) \tag{630}$$

Распишем гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{(\frac{i}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e\Phi}{2\pi Rc})^2}{2m} - U_0\delta(\varphi - \varphi_0) \tag{631}$$

При $\varphi \neq \varphi_0$:

$$\left(\frac{i}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e\Phi}{2\pi Rc}\right)^2 \psi(\varphi) = 2mE\psi(\varphi) \tag{632}$$

Ищем решение $\psi(\varphi)$ в виде экспоненты:

$$\left(\frac{i}{R}\lambda + \frac{e\Phi}{2\pi Rc}\right)^2 = 2mE \tag{633}$$

$$\lambda_{1,2} = i\left(\frac{e\Phi}{2\pi c} \pm \sqrt{2mE}R\right) \tag{634}$$

Поскольку состояние связанное $E < 0$, то

$$\lambda_{1,2} = \left(\frac{ie\Phi}{2\pi c} \mp \sqrt{2m|E|}R\right) \tag{635}$$

Пусть $A = \frac{e\Phi}{2\pi c}$, $B = \sqrt{2m|E|}R$, тогда

$$\psi(\varphi) = C_1 e^{(iA-B)\varphi} + C_2 e^{(iA+B)\varphi} \tag{636}$$

Положим $\varphi_0 = 0$, а после сшивки сдвинем φ обратно. Условия сшивки:

$$\begin{cases} \psi(0+0) = \psi(2\pi - 0), \\ \psi'(0) - \psi'(2\pi - 0) = -2mU_0R^2; \end{cases} \tag{637}$$

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = C_1 e^{(iA-B)2\pi} + C_2 e^{(iA+B)2\pi}, \\ (iA - B)C_1 + (iA + B)C_2 - (iA - B)C_1 e^{(iA-B)2\pi} - (iA + B)C_2 e^{(iA+B)2\pi} = -2mU_0R^2(C_1 + C_2); \end{cases}$$

Выразим C_2 через C_1:

$$C_2 = -C_1 e^{-2\pi B}\frac{\sin(\pi(A + iB))}{\sin(\pi(A - iB))} \tag{638}$$

Характерный размер волновой функции $\ll R$, поэтому $e^{-B\varphi} \ll 1$ и $B \gg 1$. Условие нормировки:

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \tag{639}$$

Пользуясь тем, что $B \gg 1$, получим

$$C_2 = \sqrt{B}e^{-2\pi B}, \quad C_1 = \sqrt{B}e^{2\pi i A} \tag{640}$$

$$\psi(\varphi) = \sqrt{B}e^{2\pi i A}e^{(iA-B)\varphi} + \sqrt{B}e^{-2\pi B}e^{(iA+B)\varphi} \tag{641}$$

Сдвигая на угол φ_0, получим

$$\psi(\varphi) = \sqrt{B}e^{2\pi i A}e^{(iA-B)(\varphi-\varphi_0)} + \sqrt{B}e^{-2\pi B}e^{(iA+B)(\varphi-\varphi_0)} \tag{642}$$

Фаза Берри:

$$\gamma = \int\limits_0^{2\pi} d\varphi_0 \left\langle\psi(\varphi_0)\right| i\partial_{\varphi_0} \left|\psi(\varphi_0)\right\rangle \tag{643}$$

$$\partial_{\varphi_0}\psi(\varphi_0) = -\sqrt{B}e^{2\pi i A}(iA-B)e^{(iA-B)(\varphi-\varphi_0)} - \sqrt{B}(iA+B)e^{-2\pi B}e^{(iA+B)(\varphi-\varphi_0)} \tag{644}$$

$$\begin{gathered}\left\langle\psi(\varphi_0)\right| i\partial_{\varphi_0} \left|\psi(\varphi_0)\right\rangle = -\int\limits_0^{2\pi} d\varphi(\sqrt{B}e^{-2\pi i A}e^{(-iA-B)(\varphi-\varphi_0)} + \sqrt{B}e^{-2\pi B}e^{(-iA+B)(\varphi-\varphi_0)})i \\ (\sqrt{B}e^{2\pi i A}(iA-B)e^{(iA-B)(\varphi-\varphi_0)} + \sqrt{B}(iA+B)e^{-2\pi B}e^{(iA+B)(\varphi-\varphi_0)}) = A\end{gathered} \tag{645}$$

$$\gamma = \int\limits_0^{2\pi} d\varphi_0 A = 2\pi A \tag{646}$$

$$\boxed{\gamma = \frac{e\Phi}{c}} \tag{647}$$

Задача 3. Вот это поворот! (35 баллов)

Рассмотрим квадратный двумерный ящик размера $L \times L$ с бесконечными стенками. Произвольное стационарное состояние можно характеризовать двумя квантовыми числами $|n_x, n_y\rangle$, которые нумеруют количество узлов x и y компонент волновой функции; в частности, состояния $|1,0\rangle$ и $|0,1\rangle$ имеют одинаковую энергию. Пусть в начальный момент времени волновая функция представляла собой их произвольную линейную комбинацию:

$$|\psi(0)\rangle = \psi_1 |1,0\rangle + \psi_2 |0,1\rangle \tag{648}$$

Затем ящик адиабатически медленно поворачивается в плоскости на угол 2π по часовой стрелке, так что после поворота его новое положение совпадает с исходным. Определите волновую функцию $|\psi(T)\rangle$ после такого поворота.

Решение.

Волновая функция двумерного ящика:

$$\psi_{n,m} = \frac{2}{L}\sin\left(k_n\left(x+\frac{L}{2}\right)\right)\sin\left(k_m\left(\frac{L}{2}+y\right)\right) \tag{649}$$

$$|1,0\rangle = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\cos\left(\frac{\pi}{L}y\right), \quad |0,1\rangle = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right)\cos\left(\frac{\pi}{L}x\right) \tag{650}$$

Связь между неподвижной и повёрнутой координатами:

$$\begin{cases} x_\theta = x\cos\theta - y\sin\theta, \\ y_\theta = x\sin\theta + y\cos\theta. \end{cases} \tag{651}$$

$$|1,0\rangle = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x_\theta\right)\cos\left(\frac{\pi}{L}y_\theta\right) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}(x\cos\theta - y\sin\theta)\right)\cos\left(\frac{\pi}{L}(x\sin\theta + y\cos\theta)\right)$$

$$|0,1\rangle = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}y_\theta\right)\cos\left(\frac{\pi}{L}x_\theta\right) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}(x\sin\theta + y\cos\theta)\right)\cos\left(\frac{\pi}{L}(x\cos\theta - y\sin\theta)\right)$$

Уравнение для динамической фазы:

$$i\partial_\theta c_n(\theta) = -i\sum_m \exp\left(i\int\omega_{nm}(\tau)d\tau\right)\langle n(\theta)|\,\partial_\theta\,|m(\theta)\rangle\, c_m(\theta), \quad \omega_{nm} = E_n - E_m = 0 \tag{652}$$

$$\partial_\theta c_n(\theta) = -\sum_m \langle n(\theta)|\,\partial_\theta\,|m(\theta)\rangle\, c_m(\theta) \tag{653}$$

$$\partial_\theta c_1(\theta) = -\langle 1,0|\,\partial_\theta\,|1,0\rangle\, c_1(\theta) - \langle 1,0|\,\partial_\theta\,|0,1\rangle\, c_2(\theta) \tag{654}$$

$$\partial_\theta c_2(\theta) = -\langle 0,1|\,\partial_\theta\,|1,0\rangle\, c_1(\theta) - \langle 0,1|\,\partial_\theta\,|0,1\rangle\, c_2(\theta) \tag{655}$$

$$\langle 1,0|\,\partial_\theta\,|1,0\rangle = \langle 0,1|\,\partial_\theta\,|0,1\rangle = 0, \quad \langle 1,0|\,\partial_\theta\,|0,1\rangle = -\langle 0,1|\,\partial_\theta\,|1,0\rangle = \frac{256}{27\pi^2} \tag{656}$$

$$\begin{cases} \partial_\theta c_1(\theta) = -\frac{256}{27\pi^2}c_2(\theta), \quad c_1(0) = \psi_1 \\ \partial_\theta c_2(\theta) = \frac{256}{27\pi^2}c_1(\theta), \quad c_2(0) = \psi_2 \end{cases} \tag{657}$$

$$\begin{cases} c_1(\theta) = \psi_1\cos\left(\frac{256\theta}{27\pi^2}\right) - \psi_2\sin\left(\frac{256\theta}{27\pi^2}\right) \\ c_2(\theta) = \psi_1\sin\left(\frac{256\theta}{27\pi^2}\right) + \psi_2\cos\left(\frac{256\theta}{27\pi^2}\right) \end{cases} \tag{658}$$

$$|\psi(T)\rangle = c_1(2\pi)\,|1,0\rangle + c_2(2\pi)\,|0,1\rangle \tag{659}$$

$$\boxed{|\psi(T)\rangle = \left(\psi_1\cos\left(\frac{512\theta}{27\pi}\right) - \psi_2\sin\left(\frac{512\theta}{27\pi}\right)\right)|1,0\rangle + \left(\psi_1\sin\left(\frac{512\theta}{27\pi}\right) + \psi_2\cos\left(\frac{512\theta}{27\pi}\right)\right)|0,1\rangle}$$

10 Стационарное адиабатическое приближение. Быстрые и медленные подсистемы

Задача 1. Жизнь в промежутке (25 баллов)
Частица массы m находится между двумя бесконечными цилиндрами $|R_1 - R_2| \ll R_{1,2}$, которые касаются друг друга внутренним образом. Найдите низколежащие энергетические уровни такой системы.
Решение.
Адиабатическое разделение переменных:

$$\hat{H}(r,\varphi) = \hat{H}_s(\varphi) + \hat{H}_f(r,\varphi) \tag{660}$$

$$\hat{H}_s(\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2mR_2^2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^2, \quad \hat{H}_f(r,\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 \tag{661}$$

Зафиксируем положение медленной подсистемы и решим задачу для быстрой. В первом приближении пренебрегаем производной по φ:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 \psi(r,\varphi) = \varepsilon^{(f)}(\varphi)\psi(r,\varphi) \tag{662}$$

Обозначим $k(\varphi) = \frac{2m\varepsilon^{(f)}(\varphi)}{\hbar^2}$. Тогда решение с учетом граничного условия при $r = R_2$:

$$\psi(r,\varphi) = A(\varphi)\sin(k(\varphi)(r - R_2)) \tag{663}$$

Пусть $h(\varphi)$ – длина отрезка луча в полости между цилиндрами, идушего под углом φ (φ отсчитываем от плоскости симметрии системы), а $\Delta = R_1 - R_2$. Используя $|R_1 - R_2| \ll R_{1,2}$ и теорему косинусов, получим:

$$h(\varphi) = (R_1 - R_2)(1 + \cos\varphi) \tag{664}$$

Граничное условия на внешнем цилиндре:

$$\psi(R_2 + h(\varphi), \varphi) = 0 \to k_N(\varphi) = \frac{\pi N}{(1+\cos\varphi)\Delta} \tag{665}$$

Соответствующие нормированные волновые функции:

$$\psi_N^{(f)} = \sqrt{\frac{2}{\Delta(1+\cos\varphi)}}\sin\left(\frac{\pi N(r - R_2)}{(1+\cos\varphi)\Delta}\right) \tag{666}$$

Уровни энергии быстрой подсистемы:

$$\varepsilon_N(\varphi) = \frac{\hbar^2\pi^2N^2}{2m\Delta^2(1+\cos\varphi)^2} \tag{667}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mR_2^2}\frac{d^2\psi_N(\varphi)}{d\varphi^2} + \frac{\hbar^2\pi^2N^2}{2m\Delta^2(1+\cos\varphi)^2}\psi_N(\varphi) = E_N^{(s)}\psi_N(\varphi) \tag{668}$$

Сведём задачу к гармоническому осциллятору. Разложим по малому углу φ:

$$-\frac{\hbar^2}{2mR_2^2}\frac{d^2\psi_N(\varphi)}{d\varphi^2} + \frac{\hbar^2\pi^2N^2}{2m\Delta^2(1+\cos\varphi)^2}\psi_N(\varphi) = E_N^{(s)}\psi_N(\varphi) \tag{669}$$

Уровни энергии:

$$\boxed{E_{N,n} = \frac{\hbar^2\pi^2N^2}{8m(R_1 - R_2)^2} + \frac{\hbar^2\pi N}{2\sqrt{2}mR_1(R_1 - R_2)}\left(n + \frac{1}{2}\right)} \tag{670}$$

Задача 3. Три частицы (20 баллов)

В одномерный ящик ширины L помещены три частицы, две из которых имеют массу m, а третья находится между ними и имеет массу $M \gg m$. Частицы взаимодействуют точечным образом так, что они оказываются непроницаемы друг для друга. Определите низколежащие уровни энергии такой системы.

Решение.
Гамильтониан системы:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^2 - \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)^2 - \frac{1}{2M}\left(\frac{\partial}{\partial X}\right)^2 + U(x_1, x_2, X) \tag{671}$$

где $x_{1,2}$ – координаты частиц m, X – координата частицы M. $U(x_1, x_2, X) = U_1(x_1, X) + U_2(x_2, X)$ – потенциальная энергия взаимодействия частиц, обеспечивающая непроницаемость. Частица M – медленная подсистема, а частицы m в совокупности – быстрая.
Адиабатическое приближение:

$$\hat{H}_f = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^2 - \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)^2 + U_1(x_1, X) + U_2(x_2, X), \quad \hat{H}_s = -\frac{1}{2M}\left(\frac{\partial}{\partial X}\right)^2 \tag{672}$$

Волновые функции шариков m, соответствующие $\hat{H}_f$:

$$\psi_{1,N_1}(x_1, X) = \sqrt{\frac{2}{X}}\sin\left(\frac{\pi N_1}{X}x_1\right), \quad \psi_{2,N_2}(x_2, X) = \sqrt{\frac{2}{L-X}}\sin\left(\frac{\pi N_2}{L-X}(L-x_2)\right) \tag{673}$$

$$\psi_{N_1,N_2}(x_1, x_2, y) = \frac{2}{\sqrt{y(L-y)}}\sin\left(\frac{\pi N_1}{y}x_1\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi N_2}{L-y}(L-x_2)\right) \tag{674}$$

Энергия – сумма энергий каждого движения:

$$\varepsilon^{(f)}_{N_1,N_2} = \frac{\pi^2}{2m}\left(\frac{N_1^2}{X^2} + \frac{N_2^2}{(L-X)^2}\right) \tag{675}$$

Эффективная потенциальная энергия для медленной подсистемы:

$$\hat{H}_s^{(\text{eff})}(X) = \frac{\hat{p}_X^2}{2M} + \frac{\pi^2}{2m}\left(\frac{N_1^2}{X^2} + \frac{N_2^2}{(L-X)^2}\right) \tag{676}$$

Минимум энергии находится в точке: $X_0 = \frac{L}{1+(N_2/N_1)^{2/3}}$.

$$U''_{\text{eff}}(X_0) = \frac{3\pi^2}{mL^4}\left(N_1^2\left(1+\left(\frac{N_2}{N_1}\right)^{2/3}\right)^4 + N_2^2\left(1+\left(\frac{N_1}{N_2}\right)^{2/3}\right)^4\right) \tag{677}$$

$$E_{N_1,N_2,n} = \frac{\pi^2}{2mL^2}\left(N_1^2\left(1+\left(\frac{N_2}{N_1}\right)^{2/3}\right)^2 + N_2^2\left(1+\left(\frac{N_1}{N_2}\right)^{2/3}\right)^2\right) + \\ + \sqrt{\frac{3\pi^2}{MmL^4}\left(N_1^2\left(1+\left(\frac{N_2}{N_1}\right)^{2/3}\right)^4 + N_2^2\left(1+\left(\frac{N_1}{N_2}\right)^{2/3}\right)^4\right)}\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{678}$$

Задача 4. Фаза Берри (25 баллов)
Частица со спином $1/2$ массы m движется по кольцу радиуса R. В центр кольца помещён магнитный монополь, который создаёт на кольце большое магнитное поле B. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2mR^2}\partial_\varphi^2 - \mu_B B(\cos\varphi\hat{\sigma}_x + \sin\varphi\hat{\sigma}_y) \tag{679}$$

Определите уровни энергии такой системы в пределе $\mu_B B \gg \frac{1}{mR^2}$.
Решение.
Гамильтониан:
$$\hat{H} = -\frac{1}{2mR^2}\left(\frac{d}{d\varphi}\right)^2 - \mu_0 B \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \tag{680}$$
Медленная подсистема – движение по углу, быстрая – спин. Адиабатика:
$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_f, \quad \hat{H}_s = -\frac{1}{2mR^2}\left(\frac{d}{d\varphi}\right)^2, \quad \hat{H}_f = -\mu_0 B \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \tag{681}$$
Зафиксируем положение медленной подсистемы и решим стационарное уравнение Шрёдингера для быстрой:
$$\hat{H}_f \left|\psi^{(f)}\right\rangle = \varepsilon^{(f)} \left|\psi^{(f)}\right\rangle \tag{682}$$
Собственные числа и векторы $\hat{H}_f$:
$$\varepsilon_-^{(f)} = -\mu_0 B_0, \quad \varepsilon_+^{(f)} = +\mu_0 B_0 \tag{683}$$
$$\left|\psi_-^{(f)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \left|\psi_+^{(f)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{684}$$
Разложим состояние по базису $\{\left|\psi_-^{(f)}\right\rangle, \left|\psi_+^{(f)}\right\rangle\}$:
$$\left|\psi(\varphi)\right\rangle = f_+(\varphi)\left|\psi_+^{(f)}\right\rangle + f_-(\varphi)\left|\psi_-^{(f)}\right\rangle \tag{685}$$
$$\begin{aligned}\frac{d^2\left|\psi(\varphi)\right\rangle}{d\varphi^2} &= f_+''(\varphi)\left|\psi_+^{(f)}(\varphi)\right\rangle + 2f_+'(\varphi)\left|\psi_+^{(f)}(\varphi)\right\rangle' + f_+(\varphi)\left|\psi_+^{(f)}(\varphi)\right\rangle'' + \\ &+ f_-''(\varphi)\left|\psi_-^{(f)}(\varphi)\right\rangle + 2f_-'(\varphi)\left|\psi_-^{(f)}(\varphi)\right\rangle' + f_-(\varphi)\left|\psi_-^{(f)}(\varphi)\right\rangle''\end{aligned} \tag{686}$$
Подставим в гамильтониан и получим систему уравнений на $f_\pm(\varphi)$:
$$\begin{cases} f_+''(\varphi) + if_+'(\varphi) - \frac{1}{2}f_+(\varphi) - if_-'(\varphi)e^{-2i\varphi} - \frac{f_-(\varphi)}{2}e^{-2i\varphi} + 2mR^2\mu_0 B f_+(\varphi) = -2mR^2 E f_+(\varphi) \\ f_-''(\varphi) - if_-'(\varphi) - \frac{1}{2}f_-(\varphi) + if_-'(\varphi)e^{2i\varphi} - \frac{f_+(\varphi)}{2}e^{2i\varphi} - 2mR^2\mu_0 B f_-(\varphi) = -2mR^2 E f_-(\varphi) \end{cases}$$
Ищем решение в виде:
$$f_\pm(\varphi) = \alpha_\pm e^{i\omega_\pm\varphi} \tag{687}$$
Граничные условия:
$$\begin{cases} \left|\psi(0)\right\rangle = \left|\psi(2\pi)\right\rangle \\ \left|\psi(0)\right\rangle' = \left|\psi(2\pi)\right\rangle' \end{cases} \tag{688}$$
$$\begin{cases} f_\pm(0) = f_\pm(2\pi) \\ f_\pm'(0) = f_\pm'(2\pi) \end{cases} \to \omega_\pm = n_\pm \in \mathbb{Z} \tag{689}$$
$$\begin{cases} \alpha_+\left(n_+^2 - n_+ - \frac{1}{2} + 2mR^2\mu_0 B + 2mR^2 E\right) + \alpha_-\left(n_- - \frac{1}{2}\right) = 0 \\ \alpha_-\left(n_-^2 + n_- - \frac{1}{2} - 2mR^2\mu_0 B + 2mR^2 E\right) - \alpha_+\left(n_+ + \frac{1}{2}\right) = 0 \end{cases} \tag{690}$$

$$\left((n+2)^2 - n - \frac{5}{2} + 2mR^2\mu_0 B + 2mR^2 E\right)\left(n^2 + n - \frac{1}{2} - 2mR^2\mu_0 B + 2mR^2 E\right) = \\ = -\left(n - \frac{1}{2}\right)\left(n + \frac{5}{2}\right) \quad (691)$$

Приближение: $2mR^2\mu_0 B \gg 1$, $n \ll \sqrt{2mR^2\mu_0 B}$:

$$\boxed{E_n = \pm\mu_0 B \mp \frac{\left(n-\frac{1}{2}\right)\left(n+\frac{5}{2}\right)}{4m^2R^4\mu_0 B}} \quad (692)$$

11 Квазиклассическое приближение

Упражнения (45 баллов)
Упражнение 1. Другие задачи сшивки (15 баллов)
Найдите квазиклассические уровни энергии для следующих потенциалов, и сравните полученные ответы с уже известными.

- **(5 баллов)** треугольная яма $U(x) = \begin{cases} +\infty, x < 0, \\ Fx, x > 0. \end{cases}$
- **(10 баллов)** трёхмерный кулоновский потенциал $U(r) = -\frac{e^2}{r}$ для сферически симметричных состояний. *Указание:* определите граничное условие в нуле, а в правой точке остановки используйте стандартное.

Указание: обратите внимание, что в этих задачах в одной из точек остановки линейное приближение для потенциала неприменимо, поэтому условие сшивки необходимо модифицировать. Для второй задачи вам может помочь упражнение 5.2.
Решение.

- Треугольный потенциал.
  Волновая функция в квазиклассике:
  $$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\int_b^x p(y)dy - \frac{\pi}{4}\right) \quad (693)$$
  где b – правая точка остановки. Из непрерывности волновой функции:
  $$\psi(0) = 0 \quad (694)$$
  Получаем условие квантования Бора-Зоммерфельда:
  $$\int_a^b p(y)dy + \frac{\pi}{4} = \pi n - \frac{\pi}{2}, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - Fx)} \quad (695)$$
  $$\boxed{E_n = \left(\frac{3\pi F}{2\sqrt{2m}}\left(n - \frac{3}{4}\right)\right)^{2/3}} \quad (696)$$
- Кулоновский потенциал.
  Поскольку рассматриваются сферически-симметричные состояния, то $l = m = 0$.

В упражнении 5.2. мы нашли решение для кулоновского потенциала для $E=0$:

$$\psi(r,\theta,\phi) = J_{2l+1}\left(2\sqrt{\frac{2M\alpha}{\hbar^2}r}\right)\left(\sqrt{\frac{2M\alpha}{\hbar^2}r}\right)^{-1}\mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\phi) \tag{697}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(r) - \frac{e^2}{r}u(r) = Eu(r), \quad \psi_{l,m}(r,\theta,\varphi) = R_E(r)\mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\varphi), \quad R(r) = \frac{u(r)}{r} \tag{698}$$

Применим квазиклассическое приближение к этому уравнению. Волновая функция ограничена, а значит $u(r)\to 0$ при $r\to 0$. Т.е. все решения при малых r эквивалентны ассимтотически решению на нулевой энергии, поскольку совпадают стационарные уравнения Шрёдингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m}u''(r) - \frac{e^2}{r}u(r) = 0 \tag{699}$$

Поскольку в правой точке нужно использовать стандартное граничное условие, то

$$u(r) = \frac{1}{\sqrt{p(r)}}\cos\left(\int_b^r p(r)dr - \frac{\pi}{4}\right), \quad p(r) = \sqrt{2m\left(E + \frac{e^2}{r}\right)} \tag{700}$$

где b - правая точка остановки. Сшиваем решение для нулевой энергии с квазиклассическим решением, где они оба применимы. Ассимптотика функции Бесселя:

$$J_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{2}\right), \quad z\to\infty \tag{701}$$

$$u(r) \sim r^{1/4}\cos\left(2\sqrt{\frac{2M\alpha}{\hbar^2}r} - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2}\right) \tag{702}$$

$$u(r) = \frac{1}{\sqrt{p(r)}}\cos\left(\int_0^r p(r)dr + \phi\right) \tag{703}$$

$$\int_0^r p(r)dr = \sqrt{2m}\int_0^r \sqrt{E + \frac{e^2}{r}}dr \approx 2\sqrt{2me^2}\sqrt{r} \tag{704}$$

$$\phi = -\frac{3\pi}{4} \tag{705}$$

Условие квантования:

$$\int\limits_0^b p(r)dr = \pi\hbar n \tag{706}$$

$$\int\limits_0^b p(r)dr = \sqrt{2me^2}\int_0^b\sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{b}}dr = \sqrt{2me^2}\int_0^\infty \frac{dq}{(b+q^2)^2}\cdot(-2b^2) = -\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{2me^2}{b}} \tag{707}$$

$$\sqrt{2me^2b_n}\frac{\pi}{2} = \pi\hbar n \tag{708}$$

$$\boxed{E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}} \tag{709}$$

Получился точный ответ для уровней энергии!

Упражнение 2 (15 баллов)
Рассмотрите $N(E)$ – количество состояний с энергией, меньше заданной E в поле произвольного адекватного трехмерного сферически-симметричного потенциала $U(r)$ в рамках квазиклассического приближения. Покажите, что следующие два способа вычисления приводят к одному и тому же результату а) одномерное правило квантования Бора-Зоммерфельда для радиальной переменной (отдельно для каждой сферической гармоники) с последующим суммированием по гармоникам и б) использование интеграла по трехмерному фазовому объему: $N(E) = \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\theta(E - E_p)$, где $E_p = \frac{p^2}{2m}$.
Решение.

а) Уравнение Шредингера для радиальной переменной:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}u''(r) + U'(r)u(r) = Eu(r), \quad u(r) = rR_E(r), \quad U'(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{2Mr^2} \tag{710}$$

Одномерное правило квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\int_{r^l_{\min}}^{r^l_{\max}} \sqrt{2M(E_{n,l,m} - U'(r))}dr = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{711}$$

Обозначим через $N_{E,l}$ – максимальное n, для которого $E_{n,l,m} \leq E$.

$$\int_{r^l_{\min}}^{r^l_{\max}} \sqrt{2M(E - U'(r))}dr = \pi\hbar\left(N_{E,l} + \frac{1}{2}\right) \tag{712}$$

$$N(E) = \sum_m \sum_{l=0}^{l_{\max}} N_{E,l} = \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1)N_{E,l} \tag{713}$$

Заменим сумму по l на интеграл:

$$N(E) = \int\limits_0^{l_{\max}} dl(2l+1)\frac{\sqrt{2M}}{\pi\hbar}\int\limits_{r^l_{\min}}^{r^l_{\max}} \sqrt{E - U(r) - \frac{l(l+1)}{2Mr^2}}dr \tag{714}$$

Переставим пределы и проинтегрируем по r:

$$N(E) = -\frac{\sqrt{2M}}{\pi\hbar}\frac{4M}{3}\int\limits_{r_{\min}}^{r_{\max}} drr^2\left(E - U(r) - \frac{l(l+1)}{2Mr^2}\right)^{3/2}\Bigg|_{l=0}^{l=l_{\max}} \tag{715}$$

Верхним пределом можно пренебречь:

$$\boxed{N(E) = \frac{2(2M)^{3/2}}{3\pi\hbar}\int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r^2(E - U(r))^{3/2}dr} \tag{716}$$

б) Интеграл по трёхмерному фазовому объёму:

$$N(E) = \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\theta(E - E_p) = \int d^3r \int\limits_0^{p_{\max}} \frac{dp4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3} \tag{717}$$

$$p_{\max} = \sqrt{2m(E - U(\vec{r}))} \tag{718}$$

$$N(E) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{3(2\pi\hbar)^3} \int d^3r (E - U(r))^{3/2} \tag{719}$$

$$\boxed{N(E) = \frac{2(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar} \int\limits_{r_{\min}}^{r_{\max}} drr^2 (E - U(r))^{3/2}} \tag{720}$$

Упражнение 3 (10 баллов)
Найдите вероятность квазиклассического туннелирования под барьером $U(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(x/a)}$ для частиц энергии $0 < E < U_0$. Сравните ответ с точным, найденным в 5 семинаре.
Решение.
Общий вид волновой функции в квазиклассическом приближении:

$$\psi(x) = c_+\psi_+(x) + c_-\psi_-(x), \quad \psi_\pm(x) = \frac{e^{\pm i \int\limits_{x_0}^{x} p(x)dx}}{\sqrt{p(x)}} \tag{721}$$

Задача рассеяния:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{i\int\limits_0^x p(z)dz} + \frac{r}{\sqrt{p(x)}} e^{-i\int\limits_0^x p(z)dz}, & x < 0 \\ \frac{t}{\sqrt{p(x)}} e^{i\int\limits_0^x p(z)dz}, & x > 0 \end{cases} \tag{722}$$

Это решение переписывается в следующем виде:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_+(x) + r\psi_-(x), & x < 0 \\ t\psi_+(x), & x > 0 \end{cases} \tag{723}$$

Связь на коэффициенты:

$$\begin{pmatrix} c^+_{\text{left}} \\ c^-_{\text{left}} \end{pmatrix} = \hat{A}\hat{S}\hat{A}^\dagger \begin{pmatrix} c^+_{\text{right}} \\ c^-_{\text{right}} \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-\frac{i\pi}{4}}}{2} & e^{\frac{i\pi}{4}} \\ \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{2} & e^{-\frac{i\pi}{4}} \end{pmatrix}, \quad \hat{S} = \begin{pmatrix} e^{-S} & 0 \\ 0 & e^{S} \end{pmatrix} \tag{724}$$

$$\hat{A}\hat{S}\hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}e^{-S} + \frac{1}{2}e^{S} & -\frac{i}{2}e^{-S} + ie^{S} \\ \frac{i}{4}e^{-S} - \frac{i}{2}e^{S} & \frac{1}{2}e^{-S} + e^{S} \end{pmatrix} \tag{725}$$

$$\begin{pmatrix} c^+_{\text{right}} \\ c^-_{\text{right}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ t \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} c^+_{\text{left}} \\ c^-_{\text{left}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}e^{-S} + ie^{S} \\ \frac{1}{2}e^{-S} + e^{S} \end{pmatrix} \tag{726}$$

$$t = \frac{i}{\frac{e^{-S}}{2} - e^{S}}, \quad r = i\frac{e^{-S} + 2e^{S}}{e^{-S} - 2e^{S}} \tag{727}$$

$$T = (\frac{e^{-S}}{2} - e^{S})^{-2} \tag{728}$$

Точки остановки:

$$\frac{U_0}{\cosh^2(x_{1,2}/a)} = E \to x_{1,2} = a \text{ arccosh}\left(\pm\sqrt{\frac{U_0}{E}}\right) \tag{729}$$

$$S=\int\limits_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x)-E)}dx=\sqrt{2m}\pi a(\sqrt{U_0}+\sqrt{E}) \tag{730}$$

$$\boxed{T=\left(\frac{e^{-\sqrt{2m}\pi a(\sqrt{U_0}+\sqrt{E})}}{2}-e^{\sqrt{2m}\pi a(\sqrt{U_0}+\sqrt{E})}\right)^{-2}} \tag{731}$$

Упражнение 4 (5 баллов)

- Отнормируйте волновые функции связанного состояния, которые следуют из правила квантования Бора-Зоммерфельда, на единицу.
- Отнормируйте квазиклассические бегущие волны (в отсутствие отражения) на $2\pi\delta(E-E_0)$

Решение.

- Волновые функции для частицы в потенциальной яме:

$$\psi(x)=\frac{C}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(y)dy-\frac{\pi}{4}\right) \tag{732}$$

Условие нормировки:

$$\int\limits_a^b|\psi(x)|^2dx=\int\limits_a^b\frac{C^2}{p(x)}\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_a^x p(y)dy-\frac{\pi}{4}\right)dx=1 \tag{733}$$

Импульс меняется медленно, а косинус между точками остановки успевает совершить достаточно много колебаний. Поэтому, заменим $\cos^2$ на среднее значение за период.

$$\frac{C^2}{2}\int_a^b\frac{dx}{p(x)}=1 \tag{734}$$

Стоящий здесь интеграл выражается через период колебаний классической частицы в этом же потенциале:

$$T=2\int\limits_a^b\frac{dx}{v(x)}=2m\int\limits_a^b\frac{dx}{p(x)}dx\to C=\sqrt{\frac{4m}{T}} \tag{735}$$

$$\boxed{\psi(x)=\sqrt{\frac{4m}{Tp(x)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(y)dy-\frac{\pi}{4}\right)} \tag{736}$$

- Квазиклассические бегущие волны:

$$\psi_\pm(x)=\frac{C}{\sqrt{p(x)}}\exp\left(\pm\frac{i}{\hbar}\int_0^x p(y)dy\right) \tag{737}$$

$$\langle\psi_+^E|\psi_+^{E'}\rangle=C^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^x(p^{E+\delta E}(y)-p^E(y))dy}}{p^E(x)}dx \tag{738}$$

$$p^{E+\delta E}(y) - p^E(y) \approx \frac{\partial p^E(y)}{\partial E}\delta E = \frac{m}{p(y)}\delta E \tag{739}$$

Пусть $\xi = \frac{m}{\hbar}\int\limits_0^x \frac{dy}{p(y)}$, тогда

$$\langle \psi_+^E | \psi_+^{E'} \rangle = C^2 \frac{m}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi\delta E} d\xi = C^2 \frac{m}{\hbar} 2\pi\delta(E' - E) \tag{740}$$

Для перекрекстных скалярных произведений:

$$\langle \psi_+^E | \psi_-^{E'} \rangle = C^2 \frac{m}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi(E+E')} d\xi = C^2 \frac{m}{\hbar} 2\pi\delta(E' + E) \approx 0 \tag{741}$$

Таким образом, нормированные на дельта-функцию квазиклассические бегущие волны:

$$\boxed{\psi_\pm(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi m p(x)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_0^x p(y) dy\right)} \tag{742}$$

Задача 2. Одномерный кристалл и модель сильной связи (35 баллов)
Определите зоны и их законы дисперсии для периодической задачи, изображённой на рисунке, считая применимым квазиклассическое приближение. Проинтерпретируйте результат в терминах модели сильной связи и следующего гамильтониана (для каждой зоны). Определите E_n и t_n.

$$\hat{H}_n = \begin{pmatrix} \ddots & -t_n & 0 & 0 & \dots \\ -t_n & E_n & -t_n & 0 & 0 \\ 0 & -t_n & E_n & -t_n & 0 \\ 0 & 0 & -t_n & E_n & -t_n \\ \vdots & 0 & 0 & -t_n & \ddots \end{pmatrix} \tag{743}$$

Решение.
Рассмотрим кристалл из очень большого, но все же конечного количества атомов $N \gg 1$.

$$\hat{Q} = \hat{A}^\dagger \begin{pmatrix} e^{-iS} & 0 \\ 0 & e^{iS} \end{pmatrix} \hat{A} \begin{pmatrix} e^{-S_T} & 0 \\ 0 & e^{S_T} \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-i\pi/4}}{2} & e^{i\pi/4} \\ \frac{e^{i\pi/4}}{2} & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix} \tag{744}$$

На границах кристалла потенциал имеет бесконечные стенки, то есть, что частица не может вылететь из кристалла. Тогда, если в кристалле N атомов, то столбцы коэффициентов разложения по квазиклассическим функциям слева и справа имеет вид:

$$\vec{c}_{\text{left}} = \hat{Q}^{N-1} \hat{S} \hat{A} \vec{c}_{\text{right}} \tag{745}$$

Мы рассматриваем состояния частицы, находящейся в кристалле, поэтому выбираем

$$\vec{c}_{\text{left}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \vec{c}_{\text{right}} = \begin{pmatrix} 0 \\ t \end{pmatrix} \tag{746}$$

Характеристический многочлен оператора $\hat{Q}$:

$$\chi_{\hat{Q}}(z) = z^2 - \cos S \left(2e^{S_T} + \frac{1}{2}e^{-S_T}\right) z + 1 \tag{747}$$

Произведение собственных чисел $\hat{Q}$ равно 1. Вектор $\vec{c}_{\text{right}}$ раскладывается по обоим собственным векторам, и поэтому если $|\lambda_1| \neq |\lambda_2|$, то существует собственное значение по модулю, большее 1. Но тогда при возведении в очень большую степень норма образа вектора $\vec{c}_{\text{right}}$ будет тожет расти неограниченно. Таким образом,

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1 \to \lambda_1 = \lambda = e^{i\varphi}, \lambda_2 = e^{-i\varphi} \tag{748}$$

$$\hat{Q}^{N-1} = \Lambda \begin{pmatrix} e^{i\varphi(N-1)} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi(N-1)} \end{pmatrix} \Lambda^{-1} \tag{749}$$

где Λ – матрица перехода к собственным векторам $\hat{Q}$:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \sin S & \sin S \\ e^{S_T} e^{i\varphi} - \frac{1}{2}\cos S & e^{S_T} e^{-i\varphi} - \frac{1}{2}\cos S \end{pmatrix} \tag{750}$$

$$e^{2i(N-1)\varphi} = 1 \to \varphi_k = \frac{\pi k}{N-1}, \qquad k = 0, ..., 2N-3 \tag{751}$$

По теореме Виета:

$$\cos\varphi_k = \cos S e^{S_T}\left(1 + \frac{1}{4}e^{-2S_T}\right) \to \cos S_{n,k} = e^{-S_T}\cos\varphi_k$$

При помощи метода последовательных приближений получаем:

$$\boxed{E_{n,k}^{(1)} = E_n^{(0)} + (-1)^{n-1}\frac{\hbar\omega}{\pi}\cos\left(\frac{\pi k}{N-1}\right)e^{-\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|dx}, \quad k = 0, ..., N-1} \tag{752}$$

Рассмотрим модель сильной связи. Система функций:

$$\psi_{n,j}(x) = \begin{cases} \frac{C_{n,j}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} p(x)dx}, & x > x_2 \\ \frac{C_{n,j}}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx - \frac{\pi}{4}\right), & x_1 < x < x_2. \\ \frac{C_{n,j}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x)dx} & x > x_1 \end{cases} \tag{753}$$

где x_1 – левая точка остановки, x_2 – правая.
Нормировочные константы связанных состояний:

$$C_{n,j} = \sqrt{\frac{4\pi}{T_n}} \tag{754}$$

где T_n – классический период колебаний частицы с данной энергией в рассматриваемом потенциале. Тогда

$$\boxed{t_n = \langle\psi_{n,j+1}|\psi_{n,j}\rangle = \frac{4\pi}{T_n}\int_{-z_0}^{z_0}\frac{dz}{|p(z)|}e^{-\int_{-z_0}^{z_0} p(z)dz}, \quad U(z_0) = E_n^{(0)}} \tag{755}$$

12 Туннельные эффекты. Надбарьерное отражение

Задача 1. Интерференция в комплексной плоскости (40 баллов)
Найдите с экспоненциальной точностью в рамках квазиклассического приближения вероятность надбарьерного отражения частицы большой энергии E в потенциале $U(x) = -U_0 \frac{x^4}{a^4}$.

1. **(10 баллов)** Идентифицируйте квазиклассические точки остановки; нарисуйте (схематично) линии Стокса и анти-Стокса, соответствующие этой задаче.

2. **(20 баллов)** Выберите любую из интересующих нас линий анти-Стокса, вдоль которых необходимо исследовать решение. Определите условия сшивки амплитуд квазиклассических решений в окрестности необходимых точек остановки. Определите связь амплитуды прохождения и отражения в соответствующей задаче рассеяния.

3. **(10 баллов)** Вычислите необходимые квазиклассические интегралы, найдите ответ.

Решение.

1. Произвольное решение раскладывается по паре линейно независимых:

$$\psi(z) = C_+\psi_+(z) + C_-\psi_-(z) \tag{756}$$

$$\psi_\pm(z) = \frac{1}{\sqrt{p(z)}} e^{\pm iS(z)}, \quad S(z) = \int p(z)dz \tag{757}$$

Идентифицируем точки остановки:

$$p(z_k) = \sqrt{2m\left(E + U_0\frac{z_k^4}{a^4}\right)} = 0 \tag{758}$$

$$\boxed{z_k = a\sqrt[4]{\frac{E}{U_0}}\exp\left(\frac{i\pi}{4} + \frac{i\pi k}{2}\right), \quad k \in \{0, 1, 2, 3\}} \tag{759}$$

$$S(z) = \int\limits_{z_k}^{z} \sqrt{2m\left(E + U_0\frac{z^4}{a^4}\right)}dz \tag{760}$$

Линии Стокса и анти-Стокса задаются соответственно уравнениями:

$$\begin{cases} \mathrm{Re}S(z) = 0, \\ \mathrm{Im}S(z) = 0. \end{cases} \tag{761}$$

Линии изображены на рис. 2.

2. Задача рассеяния:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{i\int\limits_0^x p(z)dz} + \frac{r}{\sqrt{p(x)}} e^{-i\int\limits_0^x p(z)dz}, & x < 0 \\ \frac{t}{\sqrt{p(x)}} e^{i\int\limits_0^x p(z)dz}, & x > 0 \end{cases} \tag{762}$$

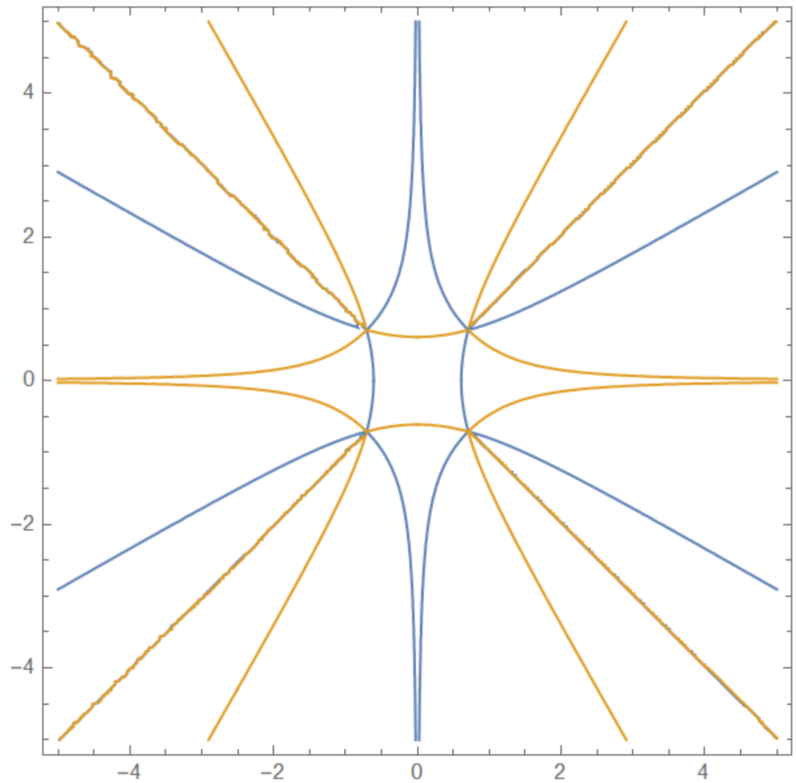

Рис. 2: Линии Стокса (синие) и анти-Стокса (жёлтые)

Это решение переписывается в следующем виде:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{i\int\limits_0^x p(z)dz}\psi_+(x) + re^{-i\int\limits_0^x p(z)dz}\psi_-(x), & \text{Re } x < 0 \\ te^{i\int\limits_0^x p(z)dz}\psi_+(x), & \text{Re } x > 0 \end{cases} \tag{763}$$

Для нахождения t выберем контур из линий анти-Стокса, приближающихся к действительной оси на бесконечности. При обходе точек остановки дважды пересекается линия Стокса.

Решение между линиями Стокса:

$$\psi(z) = \frac{C'_+}{\sqrt{p(z)}}e^{i\int\limits_{z_0}^{z} p(z')dz'} \tag{764}$$

Связь между t и C'_+:

$$C'_+ = te^{i\int\limits_0^{z_0} p(z')dz'} \tag{765}$$

Решение после перехода через 2 линию Стокса:

$$\psi(z) = \frac{C''_+}{\sqrt{p(z)}}e^{i\int\limits_{z_1}^{z} p(z')dz'} \tag{766}$$

Связь между t и C''_+:

$$C''_+ = C'_+e^{i\int\limits_{z_0}^{z_1} p(z')dz'} = te^{i\int\limits_0^{z_0} p(z')dz'}e^{i\int\limits_{z_0}^{z_1} p(z')dz'} \tag{767}$$

Условие сшивки:

$$C''_+ e^{i\int\limits_{z_1}^{0} p(z')dz'} = 1 \tag{768}$$

$$te^{i\int\limits_{0}^{z_0} p(z')dz'} e^{i\int\limits_{z_0}^{z_1} p(z')dz'} e^{i\int\limits_{z_1}^{0} p(z')dz'} = 1 \tag{769}$$

$$\boxed{t = e^{-i\left(\int\limits_0^{z_0} p(z')dz' + \int\limits_{z_0}^{z_1} p(z')dz' + \int\limits_{z_1}^{0} p(z')dz'\right)}} \tag{770}$$

Для нахождения r выберем разрез вдоль линии анти-Стокса. Снизу обходим разрез около точки $z_1 = e^{i\frac{\pi}{4}}$ ($\arg_{z=z_1} z_1 = \frac{13}{12}\pi$) и получим

$$\begin{aligned} C_-^{\text{верх}} e^{-\frac{i}{4}\frac{13}{12}\pi} e^{-i|\xi|^{3/2}|z_0|^{3/2}\frac{\sqrt{2mU_0}}{3a^2}} + C_+^{\text{верх}} e^{-\frac{i}{4}\frac{13}{12}\pi} e^{i|\xi|^{3/2}|z_0|^{3/2}\frac{\sqrt{2mU_0}}{3a^2}} = \\ = C_-^{\text{низ}} e^{\frac{i}{4}\frac{11}{12}\pi} e^{i|\xi|^{3/2}|z_0|^{3/2}\frac{\sqrt{2mU_0}}{3a^2}} + C_+^{\text{низ}} e^{\frac{i}{4}\frac{11}{12}\pi} e^{-i|\xi|^{3/2}|z_0|^{3/2}\frac{\sqrt{2mU_0}}{3a^2}} \end{aligned} \tag{771}$$

Нижний берег разреза:

$$\psi = t\psi_+ \to C_-^{\text{верх}} = it, \quad C_+^{\text{верх}} = 0 \tag{772}$$

По верхнему берегу разреза вдоль линии анти-Стокса переходим к $z_1 = e^{i\frac{3\pi}{4}}$, и обходим сверху. C_+ остается 0, при пересечении первой линии Стокса из постоянства C_+ следует также сохранение C_-. Вторая линия анти-Стокса с ψ_--доминированием. Пользуемся условие сшивки на действительной оси и получаем

$$\boxed{r = ite^{-i\sqrt{2mU_0}\left(\int\limits_{z_1}^{0} + \int\limits_{z_0+0}^{z_1+0} + \int\limits_0^{z_0}\right)\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}dz}} \tag{773}$$

3. Коэффициент прохождения:

$$\boxed{t = 1} \tag{774}$$

$$\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}_{\text{верх}} = e^{\frac{i}{2}\cdot 2\pi}\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}_{\text{низ}} \tag{775}$$

$$\left(\int_{z_1-0}^{z_0-0} + \int_{z_0+0}^{z_1+0}\right)\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}dz = 2\int_{z_1-0}^{z_0-0}\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}dz \tag{776}$$

Из голоморфности функций:

$$\int_{z_1-0}^{z_0-0}\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}dz = \int_{z_1}^{0}\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}dz + \int_0^{z_0}\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}dz \tag{777}$$

$$\begin{aligned} \left(\int_{z_1-0}^{z_0-0} + \int_{z_0+0}^{z_1+0}\right)\sqrt{\alpha + \frac{z^4}{a^4}}dz = -2i\cos\frac{\pi}{4}a\alpha^{3/4}\int_0^1\sqrt{1-t^4}dt = \\ = -2i\cos\frac{\pi}{4}a\alpha^{3/4}\frac{\Gamma(1/4)^2}{6\sqrt{2\pi}} \end{aligned} \tag{778}$$

$$\boxed{r = ie^{-2a\sqrt{mE\sqrt{\frac{E}{U_0}}}\frac{\Gamma(1/4)^2}{6\sqrt{2\pi}}}} \tag{779}$$