

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.	3
2	Матрица плотности	8
3	Связанные состояния. Мелкая яма	15
4	Непрерывный спектр. Задача рассеяния	27
5	Точно решаемые потенциалы. Часть 1	34
6	Точно решаемые потенциалы. Часть 2.	41
7	Стационарная теория возмущений	50
8	Нестационарная теория возмущений	60
9	Адиабатическое приближение в нестационарных задачах. Фаза Берри	63
10	Стационарное адиабатическое приближение. Быстрые и медленные подсистемы	67
11	Квазиклассическое приближение	71

# 1 Основы квантовой механики.

## Упражнения (20 баллов)

### Упражнение 1. Унитарные матрицы (5 баллов).

Покажите, что унитарные матрицы, как и эрмитовы, диагонализуются. *Указание:* покажите, что эрмитова и анти-эрмитова часть унитарного оператора диагонализуются совместно.

**Решение.**

Разложим унитарный оператор на эрмитову и анти-эрмитову части:

$$\hat{U} = \frac{\hat{U} + \hat{U}^\dagger}{2} + i \frac{\hat{U} - \hat{U}^\dagger}{2i} \quad (1)$$

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

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

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  $\lambda$  ( $\hat{A}\vec{a} = \lambda\vec{a}$ ). Вектор  $\hat{B}\vec{a}$  тоже будет принадлежать собственному значению  $\lambda$  матрицы  $A$ :

$$\hat{A}\hat{B}\vec{a} = \hat{B}\hat{A}\vec{a} = \lambda\hat{B}\vec{a} \quad (3)$$

Следовательно, вектор  $\hat{B}\vec{a}$  пропорционален  $\vec{a}$ , т.е.  $\vec{a}$  является собственным вектором матрицы  $\hat{B}$ .

В случае кратного собственного значения  $\lambda$  имеем несколько собственных векторов  $x_i$ , принадлежащих этому собственному значению. Пусть  $Bx_i = b_{ij}x^j$ , где  $b_{ij}$  – некоторые числа. Матрицу  $b_{ij}$  можно диагонализировать, выбрав в качестве принадлежащих  $\lambda$  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 диагональными.  $\square$

Таким образом, эрмитова и анти-эрмитовы части диагонализуются 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:

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

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

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{\mathbb{I}} \rightarrow \hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger \rightarrow |\psi\rangle = \hat{U}^\dagger |\psi'\rangle \quad (5)$$

1.

$$i\hbar \frac{\partial(\hat{U}^\dagger |\psi'\rangle)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}^\dagger |\psi'\rangle \rightarrow i\hbar \frac{\partial |\psi'\rangle}{\partial t} = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger |\psi'\rangle \quad (6)$$

Таким образом,

$$\boxed{\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger} \quad (7)$$

2.

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

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

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

### 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  $2 \times 2$ .
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 экспоненцируются:  $\exp(in_{\vec{n}} \hat{\sigma}^\alpha) = \cos a + in_{\vec{n}} \hat{\sigma}^\alpha \sin a$  (тут  $\vec{n}$  – произвольный единичный вектор). *Указание:* разложите экспоненту в ряд; из-за простого правила произведения матриц Паули, произвольные степени этих линейных комбинаций вычисляются достаточно просто.

### Решение.

Матрицы Паули:

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

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

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

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

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

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

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  $2 \times 2$ .

2. Проверим соотношения на матрицы Паули:

$$\sigma^1 \sigma^1 = \sigma^2 \sigma^2 = \sigma^3 \sigma^3 = \mathbb{I} \quad (15)$$

$$\sigma^1 \sigma^2 = -\sigma^2 \sigma^1 = -i\sigma^3, \quad \sigma^1 \sigma^3 = -\sigma^3 \sigma^1 = -i\sigma^2, \quad \sigma^2 \sigma^3 = -\sigma^3 \sigma^2 = -i\sigma^1 \quad (16)$$

Таким образом,

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

3.

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

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

$$n_\alpha \hat{\sigma}^\alpha n_\beta \hat{\sigma}^\beta = \hat{\mathbb{I}} + i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} n_\alpha n_\beta \hat{\sigma}^\gamma = \hat{\mathbb{I}} \quad (19)$$

Из этого следует:

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

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

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

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

## Задачи (80 баллов)

### Задача 1.\* Осцилляция Раби (50 баллов).

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

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

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  $\hat{U}(t) = e^{i\delta z \omega_0 t}$ . Чему равна соответствующая частота

$\omega_0$ ?

**Решение.**

Воспользуемся п. 3 из упражнения 3:

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

Воспользуемся п. 2 из упражнения 2:

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

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

Избавимся от зависимости от времени, подобрав соответствующее  $\omega_0$ :

$$\boxed{\omega_0 = \frac{\omega}{2}} \quad (28)$$

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

При этом переходе собственные векторы гамильтониана меняются на фазу:

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

Собственные числа дают спектр возможных значений энергии:

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

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

Соответствующие нормированные собственные состояния системы:

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

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

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

Разложим начальное условие по стационарным состояниям:

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

Дальнейшая эволюция:

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

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

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

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

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

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

Случай резонанса:

$$\delta \equiv \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \hbar\omega = 0 \quad (42)$$

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

## Задача 2. Два спина (30 баллов).

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

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

**Решение.**

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

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

Собственные числа дают спектр возможных значений энергии:

$$E_1 = 3J, \quad E_{2,3,4} = -J \quad (47)$$

Соответствующие нормированные собственные состояния системы:

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

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

## 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  $\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$  (то есть  $\hat{S}_x = (\hbar/2)\hat{\sigma}_x$  и т. д.).

#### Решение.

Решим упражнение для чистого состояния:

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

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

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

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

Среднее значение спина:

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

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

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

Дисперсия:

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



Решим упражнение для смешанного состояния:

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

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

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

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

Среднее значение спина:

$$\boxed{\langle \vec{S} \rangle = 0} \quad (62)$$

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

$$\langle \vec{S} \rangle^2 = 0 \quad (64)$$

Дисперсия:

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

### 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:

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

Для «ЭПР»:

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

Для «Носок»:

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

Как видно, следы не совпадают. Искомая наблюдаемая:

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

## 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:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{n}) \quad (70)$$

где  $\vec{n}$  – какой-то вектор. При каком условии на  $\vec{n}$ , это – корректная матрица плотности?

2. При каком условии на  $\vec{n}$ , эта матрица плотности описывает чистое состояние?
3. Вычислите средние значения  $\langle \hat{\sigma}_{x,y,z} \rangle$  по состоянию, описываемому такой матрицей плотности.

### Задача 2. Термодинамика двухуровневой системы (10 баллов).

Двухуровневая система описывается гамильтонианом  $\hat{H} = -\vec{h} \cdot \hat{\vec{\sigma}}$ , где  $\vec{h} = (h_x, h_y, h_z)$ , и находится при температуре  $T$ . Вычислите средние значения  $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ . *Указание:* воспользуйтесь результатом упражнений из первого семинара.

**Решение.**

Гиббсовский (канонический) ансамбль:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}, \quad Z = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}) = \text{Tr}(e^{\beta \vec{h} \cdot \hat{\vec{\sigma}}}) \quad (71)$$

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

$$e^{\beta \vec{h} \cdot \hat{\vec{\sigma}}} = \mathbb{I} \cosh \beta h + \frac{\sinh \beta h}{h} \vec{h} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \quad (72)$$

$$Z = \text{Tr} \left( \mathbb{I} \cosh \beta h + \frac{\sinh \beta h}{h} \vec{h} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \right) = 2 \cosh \beta h \quad (73)$$

$$\hat{\rho} = \frac{\mathbb{I} \cosh \beta h + \frac{\sinh \beta h}{h} \vec{h} \cdot \hat{\vec{\sigma}}}{2 \cosh \beta h} = \frac{1}{2} \mathbb{I} + \frac{1}{2h} \vec{h} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \tanh \beta h = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{h_z}{h} \tanh \beta h & \frac{h_x - i h_y}{h} \tanh \beta h \\ \frac{h_x + i h_y}{h} \tanh \beta h & 1 - \frac{h_z}{h} \tanh \beta h \end{pmatrix} \quad (74)$$

$$\langle \hat{\sigma}_\alpha \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \sigma_\alpha) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left( \hat{\sigma}_\alpha + \frac{h_\alpha \tanh \beta h}{h} \mathbb{I} \right) = \frac{h_\alpha}{h} \tanh \beta h \quad (75)$$

$$\boxed{\langle \hat{\sigma}_x \rangle = \frac{h_x}{h} \tanh \beta h, \quad \langle \hat{\sigma}_y \rangle = \frac{h_y}{h} \tanh \beta h, \quad \langle \hat{\sigma}_z \rangle = \frac{h_z}{h} \tanh \beta h} \quad (76)$$

### Задача 3.\* Квантовый парадокс Зенона (30 баллов).

Рассмотрите двухуровневую систему, описываемую следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta \\ -\Delta & E_0 \end{pmatrix} \quad (77)$$

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:

$$|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle \quad (78)$$

Матрица плотности в начальный момент:

$$\hat{\rho}(0) = |\psi(0)\rangle \langle\psi(0)| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (79)$$

Оператор эволюции:

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{it}{\hbar}(\Delta\hat{\sigma}_x - E_0\hat{\mathbb{I}})\right) = \exp\left(\frac{it}{\hbar}\Delta\hat{\sigma}_x\right) \exp\left(-\frac{it}{\hbar}E_0\right) \quad (80)$$

Воспользуемся упражнением 3 семинара 1:

$$\exp\left(\frac{it}{\hbar}\Delta\hat{\sigma}_x\right) = \hat{\mathbb{I}} \cos \frac{\Delta t}{\hbar} + i\hat{\sigma}_x \sin \frac{\Delta t}{\hbar} \quad (81)$$

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\Delta t}{\hbar} & i \sin \frac{\Delta t}{\hbar} \\ i \sin \frac{\Delta t}{\hbar} & \cos \frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{it}{\hbar}E_0\right) \quad (82)$$

Действие оператора эволюции:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle, \quad \langle\psi(t)| = \langle\psi(0)| \hat{U}^\dagger(t) \quad (83)$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle \langle\psi(0)| \hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(t) = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\Delta t}{\hbar} & i \sin \frac{\Delta t}{\hbar} \\ i \sin \frac{\Delta t}{\hbar} & \cos \frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\Delta t}{\hbar} & -i \sin \frac{\Delta t}{\hbar} \\ -i \sin \frac{\Delta t}{\hbar} & \cos \frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\Delta t}{\hbar} & -\frac{i}{2} \sin \frac{2\Delta t}{\hbar} \\ \frac{i}{2} \sin \frac{2\Delta t}{\hbar} & \sin^2 \frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (84)$$

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

$$\hat{\rho}(\tau) = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & 0 \\ 0 & \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \quad (85)$$

Вероятность направлений спина после 1 измерения:

$$P_\uparrow(\tau) = \rho_{11} = \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar}, \quad P_\downarrow(\tau) = \rho_{22} = \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \quad (86)$$

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

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

После дефазировки:

$$\hat{\rho}(n\tau) = \begin{pmatrix} P_{\uparrow}((n-1)\tau) \cos^2 \frac{\Delta t}{\hbar} + P_{\downarrow}((n-1)\tau) \sin^2 \frac{\Delta t}{\hbar} & 0 \\ 0 & P_{\uparrow}((n-1)\tau) \sin^2 \frac{\Delta t}{\hbar} + P_{\downarrow}((n-1)\tau) \cos^2 \frac{\Delta t}{\hbar} \end{pmatrix} \quad (87)$$

Вероятность направлений спина после  $n$  измерений:

$$P_{\uparrow}(n\tau) = P_{\downarrow}((n-1)\tau) \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} + P_{\uparrow}((n-1)\tau) \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \quad (88)$$

$$P_{\downarrow}(n\tau) = P_{\downarrow}((n-1)\tau) \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} + P_{\uparrow}((n-1)\tau) \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \quad (89)$$

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

$$\begin{pmatrix} P_{\uparrow}(n\tau) \\ P_{\downarrow}(n\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \\ \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{\uparrow}((n-1)\tau) \\ P_{\downarrow}((n-1)\tau) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} P_{\uparrow}(0) \\ P_{\downarrow}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (90)$$

Решение этого уравнения:

$$\begin{pmatrix} P_{\uparrow}(n\tau) \\ P_{\downarrow}(n\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \\ \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (91)$$

Диагонализуем матрицу:

$$\begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \\ \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (92)$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \\ \sin^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} & \cos^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix}^n &= \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} & 1 - \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \\ 1 - \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} & 1 + \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} P_{\uparrow}(n\tau) \\ P_{\downarrow}(n\tau) \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} & 1 - \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \\ 1 - \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} & 1 + \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \\ 1 - \cos^n \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (93)$$

Учитывая, что  $T = n\tau$ , получим

$$P_{\downarrow}(T) = \frac{1}{2} \left( 1 - \cos^{\frac{T}{\tau}} \frac{2\Delta\tau}{\hbar} \right) \quad (94)$$

По формуле Тейлора до 2 порядка:

$$\boxed{P_{\downarrow}(T) = \frac{\Delta^2}{\hbar^2} T\tau} \quad (95)$$

#### Задача 4.\* Дефазировка (30 баллов).

Спин-1/2 находится в магнитном поле, направленном вдоль оси  $z$ :

$$\hat{H} = -B\hat{\sigma}^z \quad (96)$$

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:

$$\hat{\rho}(0) = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (97)$$

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  $\left\langle \exp \left( i \int_{t_1}^{t_2} \delta B(t) dt \right) \right\rangle$ .

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  $\hat{\rho}(t)$ :

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}(t), \hat{H}(t)] = -\frac{iB(t)}{\hbar} [\hat{\rho}(t), \hat{\sigma}^z] \quad (98)$$

$$[\hat{\rho}(t), \hat{\sigma}^z] = \left[ \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & -\rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & -\rho_{22}(t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ -\rho_{21}(t) & -\rho_{22}(t) \end{pmatrix} \quad (99)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{iB(t)}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 2\rho_{12}(t) \\ -2\rho_{21}(t) & 0 \end{pmatrix} \quad (100)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{11}(t)}{\partial t} = \frac{\partial \hat{\rho}_{22}(t)}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \hat{\rho}_{12}(t)}{\partial t} = \frac{2iB}{\hbar} \hat{\rho}_{12}(t), \quad \frac{\partial \hat{\rho}_{21}(t)}{\partial t} = -\frac{2iB}{\hbar} \hat{\rho}_{21}(t) \quad (101)$$

$$\hat{\rho}(t) = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{11}(t_0) & \hat{\rho}_{12}(t_0) \exp \left( \frac{2i}{\hbar} \int_{t_0}^t B(t') dt' \right) \\ \hat{\rho}_{21}(t_0) \exp \left( -\frac{2i}{\hbar} \int_{t_0}^t B(t') dt' \right) & \hat{\rho}_{22}(t_0) \end{pmatrix} \quad (102)$$

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

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

1. Воспользуемся теоремой Вика:

$$\begin{aligned}
\left\langle \exp \left( \frac{2i}{\hbar} \int_{t_0}^t \delta B(t') dt' \right) \right\rangle &= \exp \left( -\frac{2}{\hbar^2} \left\langle \left( \int_{t_0}^t \delta B(t') dt' \right)^2 \right\rangle \right) = \\
&= \exp \left( -\frac{2}{\hbar^2} \left\langle \int_{t_0}^t \delta B(t') dt' \int_{t_0}^t \delta B(t'') dt'' \right\rangle \right) = \exp \left( -\frac{2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \langle \delta B(t') \delta B(t'') \rangle dt' dt'' \right) = \\
&= \exp \left( -\frac{2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \Gamma \delta(t' - t'') dt' dt'' \right) = \exp \left( -\frac{2\Gamma}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt'' \right) = \exp \left( -\frac{2\Gamma}{\hbar^2} (t - t_0) \right) \quad (103)
\end{aligned}$$

$$\boxed{\langle \hat{\rho}(t) \rangle = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{11}(t_0) & \hat{\rho}_{12}(t_0) \exp \left( \frac{2(iB_0\hbar - \Gamma)}{\hbar^2} (t - t_0) \right) \\ \hat{\rho}_{21}(t_0) \exp \left( -\frac{2(iB_0\hbar - \Gamma)}{\hbar^2} (t - t_0) \right) & \hat{\rho}_{22}(t_0) \end{pmatrix}} \quad (104)$$

2. Дискретизируем время:

$$\left\langle \exp \left( \frac{2i}{\hbar} \int_{t_0}^t \delta B(t') dt' \right) \right\rangle = \left\langle \exp \left( \frac{2i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \delta B_n \delta t \right) \right\rangle = \left\langle \prod_{n=1}^N \exp \left( \frac{2i\delta t}{\hbar} \delta B_n \right) \right\rangle \quad (105)$$

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

$$\exp \left( \frac{2i\delta t}{\hbar} \delta B_n \right) = 1 + \frac{2i\delta t}{\hbar} \delta B_n - \frac{2(\delta t)^2}{\hbar^2} (\delta B_n)^2 \quad (106)$$

Поскольку  $\delta B_n$  в каждой экспоненте независимы, то

$$\begin{aligned}
\left\langle \prod_{n=1}^N \exp \left( \frac{2i\delta t}{\hbar} \delta B_n \right) \right\rangle &= \prod_{n=1}^N \left\langle \exp \left( \frac{2i\delta t}{\hbar} \delta B_n \right) \right\rangle = \prod_{n=1}^N \left\langle 1 + \frac{2i\delta t}{\hbar} \delta B_n - \frac{2(\delta t)^2}{\hbar^2} (\delta B_n)^2 \right\rangle = \\
&= \prod_{n=1}^N \left( 1 - \frac{2\delta t}{\hbar^2} \Gamma \right) = \prod_{n=1}^N \left( 1 - \frac{2\Gamma(t - t_0)}{\hbar^2 N} \right)^N \quad (107)
\end{aligned}$$

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

$$\left\langle \prod_{n=1}^N \exp \left( \frac{2i\delta t}{\hbar} \delta B_n \right) \right\rangle = \exp \left( -\frac{2\Gamma}{\hbar^2} (t - t_0) \right) \quad (108)$$

Таким образом, получаем тот же ответ:

$$\boxed{\langle \hat{\rho}(t) \rangle = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{11}(t_0) & \hat{\rho}_{12}(t_0) \exp \left( \frac{2(iB_0\hbar - \Gamma)}{\hbar^2} (t - t_0) \right) \\ \hat{\rho}_{21}(t_0) \exp \left( -\frac{2(iB_0\hbar - \Gamma)}{\hbar^2} (t - t_0) \right) & \hat{\rho}_{22}(t_0) \end{pmatrix}} \quad (109)$$

### 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  $y$ :

$$\Psi(x, p_y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \psi(x, y, z) \quad (110)$$

Плотность вероятности:

$$\rho = |\Psi(x, p_y, z)|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \psi(x, y, z) \right|^2 \quad (111)$$

Искомая вероятность:

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{p_1}^{p_2} \int_{z_1}^{z_2} dx \frac{dp_y}{2\pi\hbar} dz \rho \quad (112)$$

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{p_1}^{p_2} \int_{z_1}^{z_2} dx \frac{dp_y}{2\pi\hbar} dz \left| \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \psi(x, y, z) \right|^2 \quad (113)$$

##### Упражнение 2. Прямоугольная яма (10 баллов).

В стандартном курсе квантовой механики вы наверняка сталкивались с задачей о частице в прямоугольной яме:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (114)$$

Продемонстрируйте, что в случае, когда эта яма — мелкая, точное решение совпадает с приближённой формулой для мелкой ямы.

**Решение.**

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - U(x))\psi(x) \quad (115)$$

Подставим  $U(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \begin{cases} E\psi(x), & x \in (-\infty, -\frac{a}{2}) \cup (\frac{a}{2}, \infty) \\ (E + U_0)\psi(x), & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \end{cases} \quad (116)$$

Условие связанного состояния:

$$-U_0 < E < 0 \quad (117)$$

Введём обозначения:

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2} \quad (118)$$

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  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$  следует, что в решении нужно оставить только затухающие экспоненты:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{\kappa x}, & x < -\frac{a}{2} \\ \psi_{II}(x) = B \cos kx, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ \psi_{III}(x) = Ae^{-\kappa x}, & x > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (119)$$

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

$$\psi_{II}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_{III}\left(\frac{a}{2}\right), \quad \psi'_{II}\left(\frac{a}{2}\right) = \psi'_{III}\left(\frac{a}{2}\right) \quad (120)$$

$$Ae^{\frac{-\kappa a}{2}} = B \cos \frac{ka}{2}, \quad -\kappa A e^{\frac{-\kappa a}{2}} = -\kappa B \sin \frac{ka}{2} \quad (121)$$

$$\tan \frac{ka}{2} = \frac{\kappa}{k} > 0 \quad (122)$$

Вернёмся к начальным величинам:

$$\tan \sqrt{\frac{m(E + U_0)}{2}} \frac{a}{\hbar} = \sqrt{-\frac{E}{E + U_0}} \quad (123)$$

В случае мелкой ямы:

$$U_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad |E| < U_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad (124)$$

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  $E \ll U_0$

$$\sqrt{\frac{mU_0}{2}} \frac{a}{\hbar} = \sqrt{-\frac{E}{U_0}} \quad (125)$$

$$\boxed{E = -\frac{ma^2 U_0^2}{2\hbar^2}} \quad (126)$$

Сравниваем с формулой мелкой ямы:

$$\boxed{|E| = \frac{m}{2\hbar^2} \left( \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx \right)^2 = \frac{ma^2 U_0^2}{2\hbar^2}} \quad (127)$$

Как видно, формулы совпадают.



## Задачи (85 баллов)

### Задача 1. Каноническое квантование (10 баллов).

Один из способов построения квантовой механики заключается в постулировании коммутационных соотношений, связанных с классической скобкой Пуассона:  $[\hat{A}, \hat{B}] \rightarrow i\hbar\{\hat{A}, \hat{B}\}$ ; для канонически сопряжённых операторов координаты импульса 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 вид оператора 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  $a \rightarrow 0$ , 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:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (128)$$

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}^n]\psi(x) &\equiv \hat{x}\hat{p}^n\psi(x) - \hat{p}^n\hat{x}\psi(x) = \hat{x}\hat{p}^{n-1}\hat{p}\psi(x) - \hat{p}^{n-1}\hat{p}\hat{x}\psi(x) = \hat{x}\hat{p}^{n-1}\hat{p}\psi(x) - \\ &- \hat{p}^{n-1}(\hat{x}\hat{p} - i\hbar)\psi(x) = [\hat{x}, \hat{p}^{n-1}]\hat{p}\psi(x) + i\hbar\hat{p}^{n-1}\psi(x) \end{aligned} \quad (129)$$

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar n\hat{p}^{n-1}} \quad (130)$$

2. Распишем оператор трансляции в ряд Тейлора:

$$\hat{T}_a = e^{i\hat{p}a/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i\hat{p}a}{\hbar} \right)^n \quad (131)$$

$$[\hat{x}, \hat{T}_a] = \left[ \hat{x}, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i\hat{p}a}{\hbar} \right)^n \right] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{ia}{\hbar} \right)^n [\hat{x}, \hat{p}^n] \quad (132)$$

Воспользуемся предыдущим пунктом:

$$[\hat{x}, \hat{T}_a] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{ia}{\hbar} \right)^n i\hbar n\hat{p}^{n-1} = -a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{ia\hat{p}}{\hbar} \right)^n \quad (133)$$

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{T}_a] = -a\hat{T}_a} \quad (134)$$

3. Воспользуемся предыдущим пунктом:

$$[\hat{x}, \hat{T}_a] |x\rangle = -a\hat{T}_a |x\rangle \quad (135)$$

$$\hat{x}\hat{T}_a |x\rangle - \hat{T}_a\hat{x} |x\rangle = -a\hat{T}_a |x\rangle \quad (136)$$

$$\hat{x}\hat{T}_a |x\rangle = \hat{T}_a\hat{x} |x\rangle - a\hat{T}_a |x\rangle = (x - a)\hat{T}_a |x\rangle \quad (137)$$

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

$$\hat{x} |x - a\rangle = (x - a) |x - a\rangle \quad (138)$$

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

$$\boxed{\hat{T}_a |x\rangle = |x - a\rangle} \quad (139)$$

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

$$\langle x | \hat{T}_a | \psi \rangle = \langle x | \mathbb{I} + i\hat{p}a/\hbar | \psi \rangle = \psi(x) + \frac{ia}{\hbar} \hat{p}\psi(x) \quad (140)$$

$$\langle x | \hat{T}_a | \psi \rangle = \langle \hat{T}_a^\dagger x | \psi \rangle = \langle x + a | \psi \rangle = \psi(x + a) = \psi(x) + a \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \quad (141)$$

Сравнивая предыдущие равенства, получаем

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}} \quad (142)$$

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

$$\text{tr}([\hat{x}, \hat{p}]_{n \times n}) = \text{tr}(i\hbar \mathbb{I}_{n \times n}) = i\hbar n \quad (143)$$

$$\text{tr}([\hat{x}, \hat{p}]_{n \times n}) = \text{tr}(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = 0 \quad (144)$$

$i\hbar n \neq 0$ , противоречие.

## Задача 2. Преобразование Галлилея (10 баллов).

Пусть частица находится в потенциале, который движется со скоростью  $v$ :

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x} - vt) \quad (145)$$

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

$$\hat{H}' \equiv \hat{U}(t)\hat{H}(t)\hat{U}^\dagger(t) - i\hbar\hat{U}(t)\partial_t\hat{U}^\dagger(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (146)$$

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  $\hat{T}_{vt}$ :

$$\hat{T}_{vt} = \exp\left(vt \frac{\partial}{\partial x}\right) = \exp\left(\frac{ivt}{\hbar} \hat{p}\right), \quad \hat{T}_{vt}^\dagger = \hat{T}_{vt}^{-1} = \exp\left(-\frac{ivt}{\hbar} \hat{p}\right) \quad (147)$$

$$\hat{T}_{vt}(t) \hat{H}(t) \hat{T}_{vt}^\dagger(t) = \hat{T}_{vt}(t) \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x} - vt) \right) \hat{T}_{vt}^\dagger(t) - i\hbar \hat{T}_{vt}(t) \partial_t \hat{T}_{vt}^\dagger(t) \quad (148)$$

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

$$\hat{T}_{vt}(t) \hat{H}(t) \hat{T}_{vt}^\dagger(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - i\hbar \exp\left(\frac{ivt}{\hbar} \hat{p}\right) \left(-\frac{iv\hat{p}}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{ivt}{\hbar} \hat{p}\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - v\hat{p} \quad (149)$$

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

$$\exp\left(a \frac{\partial}{\partial p}\right) = \exp\left(-\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right) \quad (150)$$

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

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right) \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - v\hat{p} \right) \exp\left(\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right) &= \frac{(\hat{p} + a)^2}{2m} - v(\hat{p} + a) + V(\hat{x}) = \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{a\hat{p}}{m} + \frac{a^2}{2m} - v\hat{p} - va + V(\hat{x}) \end{aligned} \quad (151)$$

Выберем  $a = mv$ :

$$\exp\left(-\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right) \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - v\hat{p} \right) \exp\left(\frac{ia\hat{x}}{\hbar}\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{mv^2}{2} + V(\hat{x}) \quad (152)$$

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

$$\begin{aligned} \exp(ibt) \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{mv^2}{2} + V(\hat{x}) \right) \exp(-ibt) - i\hbar \exp(ibt) (-ib) \exp(-ibt) &= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{mv^2}{2} + \\ &+ V(\hat{x}) - \hbar b \end{aligned} \quad (153)$$

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

$$\boxed{U(t) = \exp\left(-\frac{imv^2 t}{2\hbar}\right) \exp\left(-\frac{imv\hat{x}}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{ivt\hat{p}}{\hbar}\right)} \quad (154)$$

Подеиствуем оператором  $\hat{U}(t)$  на функцию  $\psi$ :

$$\langle x | \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \hat{U}^\dagger(t) x | \psi(t) \rangle = \langle x + vt | \psi(t) \rangle \exp\left(-\frac{imv(x + vt)}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{imv^2 t}{2\hbar}\right) \quad (155)$$

$$\boxed{\langle x | \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle = \psi(t, x + vt) \exp\left(-\frac{imv(x + vt)}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{imv^2 t}{2\hbar}\right)} \quad (156)$$

### Задача 3. Туннельное расщепление (10 баллов).

Рассмотрите две мелкие ямы, моделируемые следующим потенциалом:

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa}{m} (\delta(x + L/2) + \delta(x - L/2)) \quad (157)$$

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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = (E - U(x))\psi(x) = E\psi(x) \quad (158)$$

Условие связанного состояния:

$$E < 0 \quad (159)$$

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  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$  следует, что в решении нужно оставить только затухающие на бесконечности экспоненты.

(а) Будем искать чётные  $\psi(x)$ .

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{kx}, & x < -\frac{L}{2} \\ \psi_{II}(x) = B \cosh kx, & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \psi_{III}(x) = Ae^{-kx}, & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (160)$$

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

$$\psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = \psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right), \quad \psi'_{III}\left(\frac{L}{2}\right) - \psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = -2k_0 \psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \quad (161)$$

$$Ae^{-\frac{kL}{2}} = B \cosh \frac{kL}{2}, \quad A(2\kappa - k)e^{-\frac{kL}{2}} = kB \sinh \frac{kL}{2} \quad (162)$$

$$1 + e^{-y} = \frac{y}{\kappa L}, \quad y = kL \quad (163)$$

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

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 y^2}{2mL^2} \quad (164)$$

$$\boxed{E_1 = -\frac{\hbar^2 y^2}{2mL^2}, \quad 1 + e^{-y} = \frac{y}{\kappa L}} \quad (165)$$

(b) Будем искать нечётные  $\psi(x)$ .

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{kx}, & x < -\frac{L}{2} \\ \psi_{II}(x) = B \sinh kx, & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \psi_{III}(x) = -Ae^{-kx}, & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (166)$$

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

$$\psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = \psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right), \quad \psi'_{III}\left(\frac{L}{2}\right) - \psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = -2\kappa\psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \quad (167)$$

$$Ae^{-\frac{\kappa L}{2}} = B \sinh \frac{kL}{2}, \quad A(2\kappa - k)e^{-\frac{\kappa L}{2}} = kB \cosh \frac{kL}{2} \quad (168)$$

$$1 - e^{-y} = \frac{y}{\kappa L}, \quad y = kL \quad (169)$$

Получилось трансцендентное уравнение. Решение  $y = 0$  не подходит, 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  $\psi$ :

$$E_2 = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 y^2}{2mL^2} \quad (170)$$

$$\boxed{E_2 = -\frac{\hbar^2 y^2}{2mL^2}, \quad 1 - e^{-y} = \frac{y}{\kappa L}} \quad (171)$$

Графики зависимостей  $E_1$  и  $E_2$  от  $\kappa L$  представлены на рис. 1.

2. В туннельном режиме (при  $\kappa L \gg 1$ ) трансцендентные уравнения (163) и (169) удобно решить методом последовательных приближений. Нулевое приближение:

$$y_1^{(0)} = y_2^{(0)} = \kappa L \quad (172)$$

Первое приближение:

$$y_1^{(1)} = \kappa L(1 + e^{-\kappa L}), \quad y_2^{(1)} = \kappa L(1 - e^{-\kappa L}) \quad (173)$$

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}(1 + 2e^{-\kappa L}) + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}), \quad E_2 = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}(1 - 2e^{-\kappa L}) + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}) \quad (174)$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2 \kappa^2 e^{-\kappa L}}{m} + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}) \quad (175)$$

$$\boxed{\Delta E = \frac{2\hbar^2 \kappa_0^2 e^{-\kappa L}}{m} + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L})} \quad (176)$$

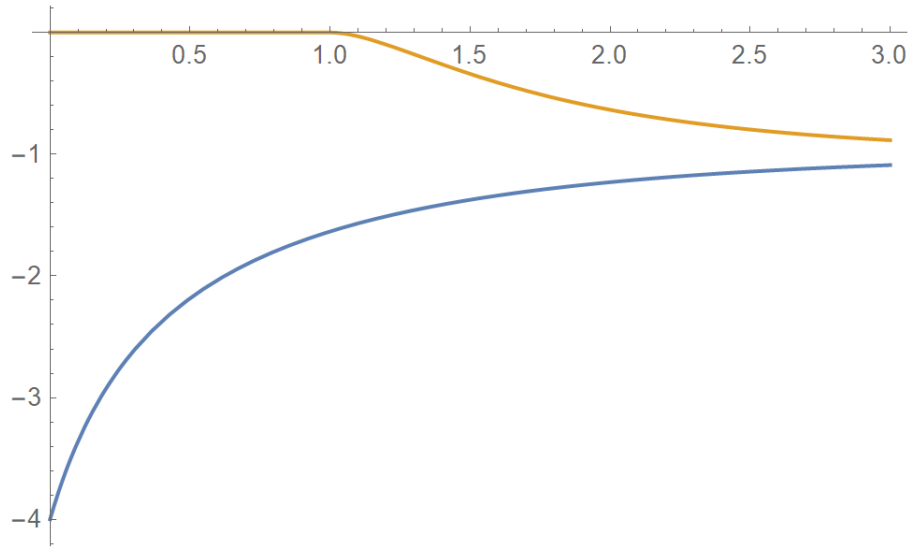


Рис. 1: Графики зависимостей  $E_1(\kappa L)$  (синий график) и  $E_2(\kappa L)$  (жёлтый график)

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

$$E_1(L) = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (1 + 2e^{-\kappa L}) + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}) \quad (177)$$

$$F = -\frac{\partial E_1}{\partial L} = -\frac{\hbar^2 \kappa^3 e^{-\kappa L}}{m} + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}) \quad (178)$$

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  $2 \times 2$  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

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}_1 + \hat{U}_2, \quad \hat{U}_1 = -\frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x + L/2), \quad \hat{U}_2 = -\frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x - L/2) \quad (179)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x + L/2), \quad \hat{H}_2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x - L/2) \quad (180)$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}_i |\psi_i\rangle = E |\psi_i\rangle \quad (181)$$

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

- Рассмотрим  $\hat{H}_1$ .

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x + L/2) \right) \psi = E \psi \quad (182)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A e^{kx}, & x < -\frac{L}{2} \\ \psi_{II}(x) = B e^{-kx}, & x > -\frac{L}{2} \end{cases} \quad (183)$$

Запишем граничные условия:

$$\psi_I \left( -\frac{L}{2} \right) = \psi_{II} \left( -\frac{L}{2} \right), \quad \psi'_{II} \left( -\frac{L}{2} \right) - \psi'_I \left( -\frac{L}{2} \right) = -2\kappa \psi_{II} \left( -\frac{L}{2} \right) \quad (184)$$

$$A e^{-\frac{kL}{2}} = B e^{\frac{kL}{2}}, \quad -k B e^{\frac{kL}{2}} - k A e^{-\frac{kL}{2}} = -2\kappa B e^{\frac{kL}{2}} \quad (185)$$

$$B = A e^{-kL}, \quad k = \kappa \quad (186)$$

$$\psi_1(x) = C_1 e^{-\kappa|x+L/2|} \quad (187)$$

Найдём  $C_1$  из нормировки:

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C_1^2 e^{-\kappa|2x+L|} dx = 2C_1^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = \frac{C_1^2}{k} = 1 \rightarrow C_1 = \sqrt{k} = \sqrt{\kappa} \quad (188)$$

$$\psi_1(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x+L/2|} \quad (189)$$

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \quad (190)$$

- Рассмотрим  $\hat{H}_2$ .

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x - L/2) \right) \psi = E \psi \quad (191)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A e^{kx}, & x < \frac{L}{2} \\ \psi_{II}(x) = B e^{-kx}, & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (192)$$

Запишем граничные условия:

$$\psi_I\left(\frac{L}{2}\right) = \psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right), \quad \psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) - \psi'_I\left(\frac{L}{2}\right) = -2\kappa\psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) \quad (193)$$

$$Ae^{\frac{kL}{2}} = Be^{-\frac{kL}{2}}, \quad -kB e^{-\frac{kL}{2}} - kAe^{\frac{kL}{2}} = -2\kappa B e^{-\frac{kL}{2}} \quad (194)$$

$$B = Ae^{kL}, \quad k = \kappa \quad (195)$$

$$\psi_2(x) = C_2 e^{-\kappa|x-L/2|} \quad (196)$$

Найдём  $C_2$  из нормировки:

$$\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C_2^2 e^{-\kappa|2x-L|} dx = 2C_2^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{C_2^2}{\kappa} = 1 \rightarrow C_2 = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\kappa} \quad (197)$$

$$\psi_2(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x-L/2|} \quad (198)$$

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \quad (199)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle &= \langle \psi_1 | \hat{H}_1 - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x - L/2) | \psi_1 \rangle = E - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \langle \psi_1 | \delta(x - L/2) | \psi_1 \rangle = \\ &= -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (1 + 2e^{-2\kappa L}) = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (1 + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L})) \end{aligned} \quad (200)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | \hat{H} | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_2 | \hat{H}_2 - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x + L/2) | \psi_2 \rangle = E - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \langle \psi_2 | \delta(x + L/2) | \psi_2 \rangle = \\ &= -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (1 + 2e^{-2\kappa L}) = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (1 + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L})) \end{aligned} \quad (201)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_1 | \hat{H}_2 - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x + L/2) | \psi_2 \rangle = E \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle - \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \langle \psi_1 | \delta(x - L/2) | \psi_2 \rangle = \\ &= -\frac{\hbar^2 \kappa^3}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\kappa(|x+L/2|+|x-L/2|)} dx - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} e^{-\kappa L} = -\frac{\hbar^2 \kappa^3}{2m} \left( \int_{-\infty}^{-L/2} e^{2\kappa x} dx + \int_{-L/2}^{L/2} e^{-\kappa L} dx + \int_{L/2}^{\infty} e^{-2\kappa x} dx \right) - \\ &\quad - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} e^{-\kappa L} = -\frac{3\hbar^2 \kappa^2}{2m} e^{-\kappa L} - \frac{\hbar^2 \kappa^3 L}{2m} e^{-\kappa L} = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} e^{-\kappa L} (3 + \kappa L) \end{aligned} \quad (202)$$

$$\langle \psi_2 | \hat{H} | \psi_1 \rangle = \langle \hat{H}^\dagger \psi_2 | \psi_1 \rangle = \langle \hat{H} \psi_2 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{H} \psi_2 \rangle^\dagger = \langle \psi_1 | \hat{H} \psi_2 \rangle = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} e^{-\kappa L} (3 + \kappa L) \quad (203)$$

Соответствующая  $\hat{H}$  матрица:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (1 + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L})) & -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} e^{-\kappa L} (3 + \kappa L) \\ -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} e^{-\kappa L} (3 + \kappa L) & -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (1 + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L})) \end{pmatrix} \quad (204)$$



2. Вычислим скалярные произведения  $\psi_i, \psi_j$ :

$$G_{ii} = \langle \psi_i, \psi_i \rangle = 1 \quad (205)$$

$$G_{12} = G_{21} = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x) \psi_2(x) dx = e^{-\kappa L} (1 + \kappa L) \quad (206)$$

Матрица Грама:

$$G = \begin{pmatrix} 1 & e^{-\kappa L}(\kappa L + 1) \\ e^{-\kappa L}(\kappa L + 1) & 1 \end{pmatrix} \quad (207)$$

3.

$$\hat{H} - E\hat{G} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} - E & -e^{-\kappa L} \left( \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (3 + \kappa L) + E(\kappa L + 1) \right) \\ -e^{-\kappa L} \left( \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (3 + \kappa L) + E(\kappa L + 1) \right) & -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} - E \end{pmatrix} \quad (208)$$

Характеристическое уравнение:

$$\det(\hat{H} - E\hat{G}) = 0 \quad (209)$$

$$\left( \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + E \right)^2 - e^{-2\kappa L} \left( \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (3 + \kappa L) + E(\kappa L + 1) \right)^2 = 0 \quad (210)$$

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + E = \pm e^{-\kappa L} \left( \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (3 + \kappa L) + E(\kappa L + 1) \right) \quad (211)$$

$$E(1 \mp e^{-\kappa L}(\kappa L + 1)) = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (\pm e^{-\kappa L}(3 + \kappa L) - 1) \quad (212)$$

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} (1 \pm 2e^{-\kappa L}) + \mathcal{O}(e^{-2\kappa L}) \quad (213)$$

Как видно, формулы (174) и (213) 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:

$$\bar{U}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^2 \exp(-\frac{ipx}{\hbar})}{\sqrt{x^2 + a^2}} dx \quad (214)$$

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

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{U}(p)(dp)}{|E| + \frac{p^2}{2m}} = 1 \quad (215)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^2 \exp(-\frac{ipx}{\hbar})}{2\pi\hbar\sqrt{x^2 + a^2}(|E| + \frac{p^2}{2m})} dx \right) dp = 1 \quad (216)$$

Поменяем пределы интегрирования:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^2 \exp(-\frac{ipx}{\hbar})}{2\pi\hbar\sqrt{x^2 + a^2}(|E| + \frac{p^2}{2m})} dp \right) dx = 1 \quad (217)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2|E|}} \frac{e^2 \exp(-\frac{\sqrt{2m|E||x|}}{\hbar})}{\hbar\sqrt{x^2 + a^2}} dx = 1 \quad (218)$$

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

$$2 \int_0^{\infty} \left( \frac{\exp(-ku)}{\sqrt{1+u^2}} \right) du = \frac{ka_B}{a} \quad (219)$$

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

$$\int_0^{\infty} \left( \frac{\exp(-ku)}{\sqrt{1+u^2}} \right) du \approx \int_0^{1/k} \frac{du}{\sqrt{1+u^2}} = \ln |u + \sqrt{1+u^2}|_0^{1/k} = \ln \left( \frac{2}{k} \right) \quad (220)$$

$$2 \ln \left( \frac{2}{k} \right) = \frac{ka_B}{a} \rightarrow k \exp \left( \frac{ka_B}{2a} \right) = 2 \quad (221)$$

Обозначим  $z = \frac{ka_B}{2a}$ .

$$z \exp(z) = \frac{a_B}{a} \quad (222)$$

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

$$z^{(0)} = 1 \quad (223)$$

$$z^{(1)} = \ln \left( \frac{a_B}{a} \right) \quad (224)$$

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

$$z = \ln(a_B/a) + \mathcal{O}(\ln \ln(a_B/a)) \rightarrow k = \frac{2a \ln(a_B/a)}{a_B} \quad (225)$$

Энергия основного состояния

$$\boxed{E = -2 \frac{e^2}{a_B} \ln^2 \frac{a_B}{a}} \quad (226)$$

## 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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi \rightarrow \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \quad (227)$$

При  $x \rightarrow -\infty$ :

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \quad (228)$$

$$\psi(x) = a_L e^{ik_L x} + b_L e^{-ik_L x}, \quad k_L = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (229)$$

При  $x \rightarrow \infty$ :

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0 \quad (230)$$

$$\psi(x) = a_R e^{ik_R x} + b_R e^{-ik_R x}, \quad k_R = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} \quad (231)$$

Состояния стационарной задачи рассеяния:

$$\psi_k^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{ik_L x} + r e^{-ik_L x}, & x \rightarrow -\infty \\ t e^{ik_R x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad \psi_k^{(-)}(x) = \begin{cases} t' e^{ik_L x}, & x \rightarrow -\infty \\ e^{ik_R x} + r' e^{-ik_R x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (232)$$

Вероятности отражения  $R$  и прохождения  $T$ :

$$R = |r|^2, \quad T = \frac{k_R}{k_L} |t|^2, \quad R + T = 1 \quad (233)$$

$$\langle \psi_{k_L}^{(+)} | \psi_{k'_L}^{(+)} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{k_L}^{(+)*} \psi_{k'_L}^{(+)} = \int_{-\infty}^{\Lambda} dx \psi_{k_L}^{(+)*} \psi_{k'_L}^{(+)} + \int_{\Lambda}^{\infty} dx \psi_{k_L}^{(+)*} \psi_{k'_L}^{(+)} + \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dx \psi_{k_L}^{(+)*} \psi_{k'_L}^{(+)} \quad (234)$$

При произвольном значении  $\Lambda$ , последний член конечен при  $k = k'$  (а значит и при  $E = E'$ ) и представляет 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  $\Lambda$ , понимаем, что для нормировки можно пользоваться только асимптотическим представлением волновых функций.

$$\langle \psi_{k_L}^{(+)} | \psi_{k'_L}^{(+)} \rangle = \text{reg.} + \int_{-\infty}^{\Lambda} dx (e^{-ik_L x} + r_k^* e^{ik_L x}) (e^{ik'_L x} + r_{k'} e^{-ik'_L x}) + \int_{\Lambda}^{\infty} dx t_k^* e^{-ik_R x} t_{k'} e^{-ik'_R x} \quad (235)$$

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  $k = k'$ .

$$\langle \psi_{k_L}^{(+)} | \psi_{k'_L}^{(+)} \rangle = \text{reg.} + \int_{-\infty}^0 dx (e^{-i(k_L - k'_L)x} + |r_k|^2 e^{i(k_L - k'_L)x}) + \int_0^{\infty} dx |t_k|^2 e^{-i(k_R - k'_R)x} \quad (236)$$

$$k_L^2 - k'_L{}^2 = \frac{2m(E - E')}{\hbar^2} = k_R^2 - k'_R{}^2 \quad (237)$$

$$k_R - k'_R = \frac{k_R^2 - k'_R{}^2}{k_R + k'_R} = \frac{k_L^2 - k'_L{}^2}{k_R + k'_R} \quad (238)$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} dx |t_k|^2 e^{-i(k_R - k'_R)x} &= \int_0^{\infty} du \frac{k_R + k'_R}{k_L + k'_L} |t_k|^2 e^{-i(k_L - k'_L)u} = \int_0^{\infty} du \frac{k_R}{k_L} |t_k|^2 e^{-i(k_L - k'_L)u} = \int_0^{\infty} dx T e^{-i(k_L - k'_L)x} \\ \langle \psi_{k_L}^{(+)} | \psi_{k'_L}^{(+)} \rangle &= \text{reg.} + \int_{-\infty}^0 dx e^{-i(k_L - k'_L)x} + \int_0^{\infty} R e^{-i(k_L - k'_L)x} + \int_0^{\infty} dx T e^{-i(k_L - k'_L)x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(k_L - k'_L)x} \end{aligned}$$

$$\langle \psi_{k_L}^{(+)} | \psi_{k'_L}^{(+)} \rangle = \text{reg.} + 2\pi\delta(k_L - k'_L) = \text{reg.} + \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m}}\delta(\sqrt{E} - \sqrt{E'}) = \text{reg.} + \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m}}\delta\left(\frac{E - E'}{\sqrt{E} + \sqrt{E'}}\right) \quad (239)$$

$$\boxed{\langle \psi_E^{(+)} | \psi_{E'}^{(+)} \rangle = \text{reg.} + 2\pi\hbar\sqrt{\frac{2E}{m}}\delta(E - E')} \quad (240)$$

## 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,  $\delta(x - x') = \sum_n \psi_n^*(x)\psi_n(x')$ , для простоты можете рассмотреть только случай  $x, x' > 0$ .

### Решение.

Состояния стационарной задачи рассеяния:

$$\psi_k^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ t e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad \psi_k^{(-)}(x) = \begin{cases} t' e^{ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ e^{ikx} + r' e^{-ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (241)$$

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

$$1 + r = t, \quad ikt - (ik - ikr) = -2\kappa t \rightarrow t = \frac{ik}{\kappa + ik}, \quad r = \frac{\kappa}{\kappa + ik} \quad (242)$$

$$t' = t, \quad r' = -\frac{r^*}{t^*}t = \frac{\kappa}{ik} \frac{-ik}{\kappa + ik} = -\frac{\kappa}{\kappa + ik} = r \quad (243)$$

$$\begin{aligned}
f(x, x') &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk (e^{ik(x-x')} + |r|^2 e^{-ik(x-x')} + |t|^2 e^{-ik(x-x')} + \\
&+ r e^{ik(x+x')} + r^* e^{-ik(x+x')}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk (e^{ik(x-x')} + e^{-ik(x-x')}) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \left( \frac{\kappa}{\kappa + ik} e^{ik(x+x')} + \frac{1}{2\pi} \frac{\kappa}{\kappa - ik} e^{-ik(x+x')} \right) \\
&\int_0^\infty dk (e^{ik(x-x')} + e^{-ik(x-x')}) = \int_{-\infty}^\infty dk e^{ik(x-x')} = 2\pi \delta(x - x') \quad (244)
\end{aligned}$$

$$\int_0^\infty dk \left( \frac{\kappa}{\kappa + ik} e^{ik(x+x')} + \frac{\kappa}{\kappa - ik} e^{-ik(x+x')} \right) = \int_{-\infty}^\infty dk \frac{\kappa}{\kappa + ik} e^{ik(x+x')} = \begin{cases} 2\pi \exp(-\kappa(x+x')), & \kappa > 0 \\ 0, & \kappa < 0 \end{cases}$$

Последний интеграл взят при помощи вычетов. Рассмотрим случаи:

1.  $\kappa < 0$ :

$$f(x, x') = \delta(x - x') \quad (245)$$

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

$$f(x, x') = \delta(x - x') \quad (246)$$

Таким образом, соотношение полноты доказано в обоих случаях.

## Задачи (75 баллов)

### Задача 1. Эволюция волновой функции (25 баллов)

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

$$e^{-iA^2} = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^\infty dz e^{iz^2 - 2izA} \quad (247)$$

### Решение.

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + U(x) \psi = E \psi \rightarrow \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi = 0 \quad (248)$$

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

$$\Psi(p) = \int_{-\infty}^\infty \psi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx \quad (249)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(p, t)\rangle}{\partial t} = \langle p | \hat{H}(t) | \psi(x, t) \rangle = \frac{p^2}{2m} |\Psi(p, t)\rangle, \quad \Psi(p, 0) = \Psi(p) \quad (250)$$

$$\Psi(p, T) = \Psi(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \quad (251)$$

Вероятность того, что частица окажется в основном состоянии:

$$P = \left| \int_{-\infty}^{\infty} (dp) \Psi^*(p) \Psi(p, T) \right|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} (dp) \Psi^2(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \right|^2 \quad (252)$$

1. Гармонический осциллятор

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (253)$$

Основное состояние:

$$\psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (254)$$

Перейдём в импульсное представление:

$$\Psi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \sqrt{2} \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega^3}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\omega^2\hbar}\right) \quad (255)$$

Эволюция частицы при выключенном потенциале  $U = 0$ :

$$\Psi(p, T) = \Psi(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \quad (256)$$

Вероятность того, что частица окажется в основном состоянии:

$$\begin{aligned} P(T) &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} (dp) \Psi^2(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \right|^2 = \\ &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} (dp) \left( \sqrt{2} \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega^3}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\omega^2\hbar}\right) \right)^2 \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \right|^2 \end{aligned} \quad (257)$$

$$\boxed{P(T) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\omega^2 T^2}{4}}}} \quad (258)$$

2.

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa}{m} \delta(x) \quad (259)$$

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

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa} \exp(-\kappa|x|) \quad (260)$$

Перейдём в импульсное представление:

$$\Psi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \frac{2\kappa^{\frac{3}{2}}\hbar^2}{p^2 + \kappa^2\hbar^2} \quad (261)$$

Вероятность того, что частица окажется в основном состоянии:

$$P(T) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} (dp) \Psi^2(p) \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \right|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} (dp) \left( \frac{2\kappa^{\frac{3}{2}}\hbar^2}{p^2 + \kappa^2\hbar^2} \right)^2 \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}T\right) \right|^2 \quad (262)$$

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

$$e^{-iA^2} = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iz^2 - 2izA} = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iz^2 - 2izp\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}} \quad (263)$$

$$P(T) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} (dp) \left( \frac{2\kappa^{\frac{3}{2}}\hbar^2}{p^2 + \kappa^2\hbar^2} \right)^2 \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iz^2 - 2izp\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}} \right|^2 \quad (264)$$

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

$$P(T) = \frac{16\kappa^6\hbar^8}{4\pi^3\hbar^2} \frac{\pi^2}{4\hbar^6\kappa^6} \left| 2 \int_0^{\infty} dz e^{-2\kappa\hbar\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}z} \left( 1 + 2\kappa\hbar\sqrt{\frac{T}{2m\hbar}}z \right) e^{iz^2} \right|^2 \quad (265)$$

$$P(T) = \frac{4}{\pi} \left| \int_0^{\infty} dz e^{-\kappa\sqrt{\frac{2\hbar T}{m}}z} \left( 1 + \kappa\sqrt{\frac{2\hbar T}{m}}z \right) e^{iz^2} \right|^2 \quad (266)$$

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

$$\int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \cos^2 t \sim x, \quad \int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \sin^2 t \sim \frac{x^3}{3} \quad (267)$$

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

$$P(T) = \frac{4}{\pi} \left| \frac{1+i}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{\sqrt{\pi}(1-i)}{8\sqrt{2}}a^2 + \mathcal{O}(a^3) \right|^2 = \frac{4}{\pi} \left( \frac{\pi}{4} - \frac{\sqrt{\pi}}{6\sqrt{2}}a^3 \right) = 1 - \frac{4\sqrt{\pi}}{6\sqrt{2}\pi}a^3 + \mathcal{O}(a^3) \quad (268)$$

При малых временах  $T$ :

$$\boxed{P(T) = 1 - \frac{4\kappa^3}{3\sqrt{\pi}} \left( \frac{\hbar T}{m} \right)^{\frac{3}{2}} + \mathcal{O}(T^3)} \quad (269)$$

При больших временах  $T$ :

$$\int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \cos^2 t \sim \sqrt{\frac{\pi}{8}} - \frac{\cos x^2}{2x}, \quad \int_0^{a/\sqrt{2}\pi} dt \sin^2 t \sim \sqrt{\frac{\pi}{8}} + \frac{\sin x^2}{2x} \quad (270)$$

$$P(T) = \frac{4}{\pi} \left| \frac{2}{a} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{a^3}\right) \right| = \frac{16}{\pi a^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{a^3}\right) \quad (271)$$

$$\boxed{P(T) = \frac{8m}{\pi \hbar \kappa^2 T} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T^3}\right)} \quad (272)$$

## Задача 2. Квазистационарные состояния (50 баллов)

В этой задаче мы будем исследовать уравнение Шрёдингера в потенциале следующего вида:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ \frac{\kappa}{m} \delta(x - a), & x > 0 \end{cases} \quad (273)$$

Рассеивающий потенциал (величину  $\kappa$ ) мы будем предполагать сильным. Если заменить этот потенциал на бесконечную стенку, то в этой задаче имеется множество стационарных состояний вида  $\psi_n(x) = \sin k_n x$ ,  $k_n = \frac{\pi n}{a}$  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:

$$|\psi(E)|^2 \approx c \frac{\Gamma_n}{(E - E_n)^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}} \quad (274)$$

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

3. Найдите амплитуду того, что через достаточно большое время  $t$  частица останется 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»  $\tau_n$ .

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  $e^{-iE_n t}$ .

**Решение.**

- 1.



2.

$$|\psi(E)|^2 = \frac{1}{8\sqrt{2mE}\pi k_n} \frac{\frac{k_n^3}{2m\kappa^2 a}}{(E - E_n^{(0)}(1 - \frac{1}{2\kappa a}))^2 + \frac{1}{4}(\frac{k_n^3}{2m\kappa^2 a})^2} \quad (275)$$

$$c = \frac{1}{8\sqrt{2mE}\pi k_n}, \quad E_n = E_n^{(0)} \left(1 - \frac{1}{2\kappa a}\right), \quad \Gamma_n = \frac{k_n^3}{2m\kappa^2 a} \quad (276)$$

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

3.

$$\psi(E) = \sqrt{c} \frac{\sqrt{\Gamma_n}}{(E - E_n) + \frac{i\Gamma_n}{2}} \quad (277)$$

### 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  $\psi(x \rightarrow \infty) = e^{-ikx} + re^{ikx}$ . 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  $\varepsilon$  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:

$$r(E) \approx e^{i\phi} \frac{E - E_n - \frac{i\Gamma_n}{2}}{E - E_n + \frac{i\Gamma_n}{2}} \quad (278)$$

(с такими же величинами  $E_n$  и  $\Gamma_n$ ; 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.

$$\psi(x \rightarrow \infty) = e^{-ikx} + re^{ikx} \quad (279)$$

2. Амплитуда отражения:

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

$$= e^{-2i(k-k_n)a} \frac{ik_n(k-k_n)a + k_n + 2\kappa(k-k_n)a}{ik_n(k-k_n)a - k_n - 2\kappa(k-k_n)a} \quad (280)$$

$$k_n(k-k_n) = \frac{m(E - E_n^{(0)})}{\hbar^2} \quad (281)$$

$$r = e^{-2i(k-k_n)a} \frac{ia \frac{m(E-E_n^{(0)})}{\hbar^2} + k_n + 2\kappa a \frac{m(E-E_n^{(0)})}{k_n \hbar^2}}{ia \frac{m(E-E_n^{(0)})}{\hbar^2} - k_n - 2\kappa a \frac{m(E-E_n^{(0)})}{k_n \hbar^2}} \quad (282)$$

Полюсы:

$$i(E - E_n^{(0)}) - \frac{\hbar^2 k_n}{ma} - \frac{2\kappa}{k_n}(E - E_n^{(0)}) = 0 \quad (283)$$

$$(E - E_n^{(0)}) \left( i - \frac{2\kappa}{k_n} \right) = \frac{\hbar^2 k_n}{ma} \quad (284)$$

$$E - E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\kappa ma} \frac{1}{\frac{ik_n}{2\kappa} - 1} \approx -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2\kappa ma} \left( 1 + \frac{ik_n}{2\kappa} \right) = -\frac{\hbar^2 E_n^{(0)}}{\kappa a} - \frac{i\hbar^2 k_n^3}{4\kappa^2 ma} \quad (285)$$

$$E_n = E_n^{(0)} \left( 1 - \frac{\hbar^2}{\kappa a} \right) - \frac{i\hbar^2 k_n^3}{4\kappa^2 ma} \quad (286)$$

$$r = \frac{E - E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}}{E - E_n + i\frac{\Gamma_n}{2}} = \frac{(E - E_n - i\frac{\Gamma_n}{2})^2}{(E - E_n)^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}} = \frac{(E - E_n)^2 - \frac{\Gamma_n^2}{4} - i\Gamma_n(E - E_n)}{(E - E_n)^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}} \quad (287)$$

$$\delta(E) = -\arctan \frac{\Gamma_n(E - E_n)}{(E - E_n)^2 - \frac{\Gamma_n^2}{4}} \quad (288)$$

3. Время задержки:

$$\tau(E) = \hbar \frac{\partial \delta}{\partial E} = \frac{\Gamma_n \hbar}{(E - E_n)^2 + \frac{\Gamma_n^2}{4}} \quad (289)$$

$$\tau(E_n) = \frac{4\hbar}{\Gamma_n} \quad (290)$$

## 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  $N = \sum_m N_m$ .

Определите промежуточную асимптотику уровней энергии  $E_{n,m}$  (интересны высоколежащие

уровни, но не близкие к «верху ямы»).

**Решение.**

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (291)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - U_0\theta(a - |r|) \quad (292)$$

Лапласиан в полярных координатах:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (293)$$

Разделим переменные на радиальную и угловую части:

$$\psi(r, \varphi) = \psi(r)e^{im\varphi} \quad (294)$$

Уравнение на радиальную часть:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \psi''(r) + \frac{1}{r} \psi'(r) - \frac{m^2}{r^2} \psi(r) \right) - U_0 \theta(a - |r|) \psi(r) = E \psi(r) \quad (295)$$

1. Вне ямы  $r > a$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \psi''(r) + \frac{1}{r} \psi'(r) - \frac{m^2}{r^2} \psi(r) \right) = E \psi(r) \quad (296)$$

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

$$\psi'(r) = \frac{d\psi}{dz} \frac{dz}{dr} = \chi \psi'(z), \quad \psi''(r) = \frac{d\psi'}{dz} \frac{dz}{dr} = \chi^2 \psi''(z) \quad (297)$$

$$\psi''(z) + \frac{1}{z} \psi'(z) - \left( 1 + \frac{m^2}{z^2} \right) \psi(z) = 0 \quad (298)$$

Решение уравнения:

$$\psi(z) = A_1 I_m(z) + A_2 K_m(z) \quad (299)$$

Асимптотика при больших  $z \gg 1$ :

$$I_m(z) \approx \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}}, \quad K_m(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \quad (300)$$

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

$$\psi(z) = A K_m(z) \quad (301)$$

2. Внутри ямы  $r < a$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \psi''(r) + \frac{1}{r} \psi'(r) - \frac{m^2}{r^2} \psi(r) \right) - U_0 \psi(r) = E \psi(r) \quad (302)$$

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

$$\psi'(r) = \frac{d\psi}{dz} \frac{dz}{dr} = k \psi'(z), \quad \psi''(r) = \frac{d\psi'}{dz} \frac{dz}{dr} = k^2 \psi''(z) \quad (303)$$

$$\psi''(z) + \frac{1}{z}\psi'(z) + \left(1 - \frac{m^2}{z^2}\right)\psi(z) = 0 \quad (304)$$

Решение уравнения:

$$\psi(z) = B_1 J_m(z) + B_2 Y_m(z) \quad (305)$$

Асимптотика при малых  $z \ll 1$ :

$$J_m(z) \approx \frac{1}{m!} \left(\frac{z}{2}\right)^m, \quad Y_m(z) \approx \begin{cases} -\frac{(m-1)!}{\pi} \left(\frac{2}{z}\right)^m, & m \neq 0 \\ -\frac{2}{\pi} (\ln \frac{2}{z} - \gamma), & m = 0 \end{cases} \quad (306)$$

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

$$\psi(z) = B J_m(z) \quad (307)$$

Сшивки логарифмической производной:

$$\frac{d \ln \psi(a-0)}{dz} = \frac{d \ln \psi(a+0)}{dz} \rightarrow \frac{ka J'_m(ka)}{J_m(ka)} = \frac{\chi a K'_m(\chi a)}{K_m(\chi a)} \quad (308)$$

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

$$J_m(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad K_m(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \quad (309)$$

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

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

$$-ka \frac{1}{ka} \left( ka \tan\left(ka - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{1}{2} \right) = -\chi a \frac{1}{\chi a} \left( \frac{1}{2} + \chi a \right) \quad (310)$$

$$\tan\left(ka - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{\chi}{k} \gg 1 \quad (311)$$

$$ka - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{2} + \pi n \rightarrow ka = \frac{3\pi}{4} + \frac{m\pi}{2} + \pi n \quad (312)$$

$$k^2 a^2 = \pi^2 \left( \frac{3}{4} + \frac{m}{2} + n \right)^2 = \frac{2Ma^2(U_0 - |E_{n,m}|)}{\hbar^2} \quad (313)$$

$$\boxed{E_{n,m} = U_0 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2Ma^2} \left( \frac{3}{4} + \frac{m}{2} + n \right)^2} \quad (314)$$

Число решений:

$$\boxed{N_m = \frac{\sqrt{2Ma^2 U_0}}{\pi \hbar} - \frac{m}{2} - \frac{3}{4}} \quad (315)$$

$$N_{m_{\max}} = 0 \rightarrow m_{\max} = 2 \frac{\sqrt{2Ma^2 U_0}}{\pi \hbar} - \frac{3}{2} \quad (316)$$

$$N = \sum_{m=0}^{m_{\max}} N_m = \sum_{m=0}^{m_{\max}} \left( \frac{\sqrt{2Ma^2U_0}}{\pi\hbar} - \frac{m}{2} - \frac{3}{4} \right) \approx \frac{m_{\max}(m_{\max}+1)}{2} - \frac{m_{\max}(m_{\max}-1)}{2} = \frac{m_{\max}^2}{4} \quad (317)$$

$$N = \frac{2Ma^2U_0}{\pi^2\hbar^2} \quad (318)$$

### 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:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi = 0 \quad (319)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta - \frac{\alpha}{r} \quad (320)$$

Лапласиан в сферических координатах:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (321)$$

Разделим переменные на радиальную и угловую части:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r)Y(\theta, \varphi) \quad (322)$$

Уравнение на радиальную часть:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}(r^2\psi'(r))' + \left( \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r} \right) \psi(r) = 0 \quad (323)$$

$$\psi''(r) + \frac{2}{r}\psi'(r) - \left( \frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{2m\alpha}{\hbar r} \right) \psi(r) = 0 \quad (324)$$

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

$$\psi'(r) = \frac{d\psi}{dr} = \frac{dz}{dr} \frac{du}{dz} = \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar r}} u'(z) = \frac{4m\alpha}{\hbar z} u'(z) \quad (325)$$

$$\psi''(r) = \frac{d^2\psi}{dr^2} = \frac{4m\alpha}{\hbar z} \frac{d}{dz} \left( \frac{4m\alpha}{\hbar z} u'(z) \right) = \frac{16m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^3} u'(z) + \frac{16m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^2} u''(z) \quad (326)$$

$$\frac{16m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^2} u''(z) + \frac{48m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^3} u'(z) + \frac{16m^2\alpha^2}{\hbar^2 z^2} \left( 1 - \frac{4L(L+1)}{z^2} \right) u(z) = 0 \quad (327)$$

$$z^2 u''(z) + 3z u'(z) + (z^2 - 4L(L+1)) u(z) = 0 \quad (328)$$

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

$$u'(z) = \frac{v'(z)}{z} - \frac{v(z)}{z^2}, \quad u''(z) = \frac{v''(z)}{z} - \frac{2v'(z)}{z^2} + \frac{2v(z)}{z^3} \quad (329)$$

$$zv''(z) - 2v'(z) + \frac{2v(z)}{z} + 3v'(z) - \frac{3v(z)}{z} + zv(z) - \frac{4L(L+1)}{z}v(z) = 0 \quad (330)$$

$$v''(z) + \frac{1}{z}v'(z) + \left(1 - \frac{(2L+1)^2}{z^2}\right)v(z) = 0 \quad (331)$$

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

$$v(z) = A_1 J_{2L+1}(z) + A_2 Y_{2L+1}(z) \quad (332)$$

Вернёмся к замене:

$$\boxed{\psi(r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\alpha r}} \left( A_1 J_{2L+1} \left( 2\sqrt{\frac{2m\alpha r}{\hbar}} \right) + A_2 Y_{2L+1} \left( 2\sqrt{\frac{2m\alpha r}{\hbar}} \right) \right)} \quad (333)$$

## Задачи (60 баллов)

### Задача 1 (20 баллов)

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

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & |\vec{r}| < a \\ \infty, & |\vec{r}| > a \end{cases} \quad (334)$$

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  $r > a$ :

$$\psi(r) = 0 \quad (335)$$

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

$$\psi''(r) + \frac{2}{r}\psi'(r) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{L(L+1)}{r^2}\right)\psi(r) = 0 \quad (336)$$

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

$$\psi'(r) = \frac{u'(r)}{\sqrt{r}} - \frac{u(r)}{2r^{\frac{3}{2}}}, \quad \psi''(r) = \frac{u''(r)}{\sqrt{r}} - \frac{u'(r)}{r^{\frac{3}{2}}} + \frac{3u(r)}{4r^{\frac{5}{2}}} \quad (337)$$

$$\frac{u''(r)}{\sqrt{r}} - \frac{u'(r)}{r^{\frac{3}{2}}} + \frac{3u(r)}{4r^{\frac{5}{2}}} + \frac{2u'(r)}{r^{\frac{3}{2}}} - \frac{u(r)}{r^{\frac{5}{2}}} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{L(L+1)}{r^2}\right)\frac{u(r)}{\sqrt{r}} = 0 \quad (338)$$

$$u''(r) + \frac{u'(r)}{r} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{1}{4} \right) u(r) = 0 \quad (339)$$

$$u''(r) + \frac{u'(r)}{r} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{(L+\frac{1}{2})^2}{r^2} \right) u(r) = 0 \quad (340)$$

$$u(r) = B_1 J_{L+\frac{1}{2}} \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \right) + B_2 Y_{L+\frac{1}{2}} \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \right) \quad (341)$$

Вернёмся к замене:

$$\psi(r) = \frac{B_1}{\sqrt{r}} J_{L+\frac{1}{2}} \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \right) + \frac{B_2}{\sqrt{r}} Y_{L+\frac{1}{2}} \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r \right) \quad (342)$$

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

$$J_{L+\frac{1}{2}} \left( \frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} \right) = 0 \quad (343)$$

1. Случай  $L = 0$ .

$$\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a \sqrt{2mE}}} \sin \left( \frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} \right) = 0 \rightarrow \frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} = \pi n \quad (344)$$

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}} \quad (345)$$

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

$$J_m(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos \left( z - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \quad (346)$$

$$\frac{\sqrt{2\hbar}}{\sqrt{\pi a \sqrt{2mE}}} \cos \left( \frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} - \frac{(L+\frac{1}{2})\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) = 0 \quad (347)$$

$$\sin \left( \frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} - \frac{\pi L}{2} \right) = 0 \quad (348)$$

$$\frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar} - \frac{\pi L}{2} = \pi n \quad (349)$$

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (2n+L)^2}{8ma^2}} \quad (350)$$

## 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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \left(\frac{1}{2}U_0 \tanh \frac{x}{a} - E\right)\psi(x) = 0 \quad (351)$$

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

$$\text{th} \frac{x}{a} = \frac{1+\xi}{1-\xi} \quad (352)$$

$$\psi'(x) = -\frac{2}{a}\xi\psi'(\xi), \quad \psi''(x) = \frac{4\xi}{a^2}\psi'(\xi) + \frac{4\xi^2}{a^2}\psi''(\xi) \quad (353)$$

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

$$\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \xi^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + k^2 \frac{\xi + 1}{\xi - 1} \psi + \kappa^2 \psi = 0 \quad (354)$$

$$\psi(\xi) = \Psi(\xi)\xi^{\sqrt{k^2 - \kappa^2}} \quad (355)$$

$$\xi(1-\xi)\Psi''(\xi) - (2\sqrt{k^2 - \kappa^2} + 1)(\xi - 1)\Psi'(\xi) - 2k^2\Psi(\xi) = 0 \quad (356)$$

$$\begin{aligned} \Psi(\xi) = & C_1 \xi^{\sqrt{k^2 - \kappa^2}} {}_2F_1(\sqrt{-k^2 - \kappa^2} + \sqrt{k^2 - \kappa^2}, -\sqrt{-k^2 - \kappa^2} + \sqrt{k^2 - \kappa^2}, 1 + 2\sqrt{k^2 - \kappa^2}, \xi) + \\ & + C_2 \xi^{-\sqrt{k^2 - \kappa^2}} {}_2F_1(-\sqrt{k^2 - \kappa^2} - \sqrt{-k^2 - \kappa^2}, -\sqrt{k^2 - \kappa^2} + \sqrt{-k^2 - \kappa^2}, 1 - 2\sqrt{k^2 - \kappa^2}, \xi) \end{aligned} \quad (357)$$

Рассмотрим 2 базисное решение:

$$\psi(\xi) = \xi^{-i\sqrt{\kappa^2 - k^2}} {}_2F_1(-\sqrt{k^2 - \kappa^2} - \sqrt{-k^2 - \kappa^2}, -\sqrt{k^2 - \kappa^2} + \sqrt{-k^2 - \kappa^2}, 1 - 2\sqrt{k^2 - \kappa^2}, \xi) \quad (358)$$

При  $x \rightarrow \infty$

$${}_2F_1(\dots, e^{-\frac{2x}{a}}) \sim 1 \quad (359)$$

$$\psi(x) = (-1)^{i\sqrt{k^2 + \kappa^2}} e^{-i\frac{2x}{a}\sqrt{k^2 + \kappa^2}} = e^{\pi\sqrt{\kappa^2 - k^2}} e^{i\frac{2x}{a}\sqrt{\kappa^2 - k^2}} \quad (360)$$

При  $x \rightarrow -\infty$

$$\begin{aligned} \frac{\sin(\pi(b-a))}{\pi} {}_2F_1(a, b, c, \xi) = & \frac{(-\xi)^a}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} {}_2F_1(a, a-c+1, a-b+1, \frac{1}{\xi}) - \\ & - \frac{(-\xi)^{-b}}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(b, b-c+1, b-a+1, \frac{1}{\xi}) \end{aligned} \quad (361)$$

$${}_2F_1(a, b, c, \frac{1}{\xi}) \sim 1 \quad (362)$$

$$\begin{aligned} \Psi(\xi) = & -\frac{\pi}{i \sinh(\pi\sqrt{k^2 + \kappa^2})} e^{\pi\sqrt{\kappa^2 - k^2}} \left( \frac{e^{-i\frac{2x}{a}\sqrt{k^2 + \kappa^2}}}{(i\sqrt{\kappa^2 - k^2} - i\sqrt{\kappa^2 + k^2})\Gamma^2(i\sqrt{\kappa^2 - k^2} - i\sqrt{\kappa^2 + k^2})} - \right. \\ & \left. - \frac{e^{i\frac{2x}{a}\sqrt{k^2 + \kappa^2}}}{(i\sqrt{\kappa^2 - k^2} + i\sqrt{\kappa^2 + k^2})\Gamma^2(i\sqrt{\kappa^2 - k^2} + i\sqrt{\kappa^2 + k^2})} \right) \end{aligned} \quad (363)$$



$$r = \frac{\pi i}{\sinh \pi \sqrt{\kappa^2 + k^2}} (i\sqrt{\kappa^2 - k^2} + i\sqrt{\kappa^2 + k^2}) \Gamma^2(i\sqrt{\kappa^2 - k^2} + i\sqrt{\kappa^2 + k^2}) \quad (364)$$

$$t = \frac{\pi i}{\sinh \pi \sqrt{\kappa^2 + k^2}} (i\sqrt{\kappa^2 - k^2} - i\sqrt{\kappa^2 + k^2}) \Gamma^2(i\sqrt{\kappa^2 - k^2} - i\sqrt{\kappa^2 + k^2}) \quad (365)$$

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

$$R = |r|^2 = \frac{\sinh^2(\pi(\sqrt{\kappa^2 - k^2} - \sqrt{\kappa^2 + k^2}))}{\sinh^2(\pi(\sqrt{\kappa^2 - k^2} + \sqrt{\kappa^2 + k^2}))} \quad (366)$$

$$T = \frac{\sqrt{\kappa^2 + k^2}}{\sqrt{\kappa^2 - k^2}} |t|^2 = \frac{\sinh(2\pi(\sqrt{\kappa^2 - k^2})) \sinh(2\pi\sqrt{\kappa^2 + k^2})}{\sinh^2(\pi(\sqrt{\kappa^2 - k^2} + \sqrt{\kappa^2 + k^2}))} \quad (367)$$

## 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:

$$\int dx \psi_E^*(x) \psi_{E'}(x) = \delta(E - E') \quad (368)$$

и убедитесь, что для них выполняется соотношение

$$\int dE \psi_E^*(x') \psi_E(x) = \delta(x - x') \quad (369)$$

#### Решение.

Стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + Fx \psi(x) = E \psi(x) \quad (370)$$

Сдвинем начало координат:

$$z = \frac{x - E/F}{(\hbar^2/2mF)^{\frac{1}{3}}} \quad (371)$$

Такая подстановка приводит к уравнению Эйри:

$$\psi''(z) - z\psi(z) = 0 \quad (372)$$

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

$$\psi(z) = C_1 \text{Ai}(z) + C_2 \text{Bi}(z) \quad (373)$$

Асимптотики функции Эйри:

$$\text{Ai}(z) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}\right), & z \rightarrow \infty \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right), & z \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (374)$$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \left( e^{i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right)} + e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{3\pi}{4}\right)} \right) \quad (375)$$

$$\psi_E(x) = C \text{Ai}(z) \quad (376)$$

$$\begin{aligned} \int dx \psi_E^*(x) \psi_{E'}(x) &= \\ &= \frac{C^2}{4\pi(z z')^{\frac{1}{4}}} \int_{-\infty}^0 dx \left( e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right)} + e^{i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{3\pi}{4}\right)} \right) \left( e^{i\left(\frac{2}{3}(-z')^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right)} + e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z')^{\frac{3}{2}} + \frac{3\pi}{4}\right)} \right) + \\ &+ \frac{C^2}{4\pi(z z')^{\frac{1}{4}}} \int_0^{\infty} dx \left( e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right)} + e^{i\left(\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{3\pi}{4}\right)} \right) \left( e^{i\left(\frac{2}{3}(-z')^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right)} + e^{-i\left(\frac{2}{3}(-z')^{\frac{3}{2}} + \frac{3\pi}{4}\right)} \right) + \text{reg.} = \\ &= \frac{C^2}{4\pi(z z')^{\frac{1}{4}}} \int_{-\infty}^0 dx \left( e^{\frac{2i}{3}\left((-z')^{\frac{3}{2}} - (-z)^{\frac{3}{2}}\right)} + e^{-\frac{2i}{3}\left((-z')^{\frac{3}{2}} - (-z)^{\frac{3}{2}}\right)} \right) + \text{reg.} \quad (377) \end{aligned}$$

$$\Delta z = z - z' = \frac{\Delta E}{F} \left( \frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (378)$$

$$\begin{aligned} \int dx \psi_E^*(x) \psi_{E'}(x) &= \frac{C^2}{4\pi z^{\frac{1}{2}}} \left( \frac{\hbar^2}{2mF} \right)^{\frac{1}{3}} \int_{-\infty}^0 dz \left( e^{-\frac{2i}{3}i(-z)^{\frac{3}{2}} \frac{3\Delta z}{2z}} + e^{\frac{2i}{3}i(-z)^{\frac{3}{2}} \frac{3\Delta z}{2z}} \right) = \\ &= \left( \frac{\hbar^2}{2mF} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{C^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(\sqrt{z}) e^{-i\Delta z \sqrt{z}} = C^2 \left( \frac{\hbar^2 \sqrt{F}}{2m} \right)^{\frac{2}{3}} \delta(E' - E) = \delta(E' - E) \quad (379) \end{aligned}$$

$$C = \left( \frac{2m}{\hbar^2 \sqrt{F}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (380)$$

$$\boxed{\psi_E(x) = \left( \frac{2m}{\hbar^2 \sqrt{F}} \right)^{\frac{1}{3}} \text{Ai} \left( \frac{x - E/F}{(\hbar^2/2mF)^{\frac{1}{3}}} \right)} \quad (381)$$

$$\begin{aligned} \int dE \psi_E^*(x') \psi_E(x) &= \frac{C^2}{4\pi} \int_{-\infty}^0 dE \left( e^{\frac{2i}{3}\left((-z')^{\frac{3}{2}} - (-z)^{\frac{3}{2}}\right)} + e^{-\frac{2i}{3}\left((-z')^{\frac{3}{2}} - (-z)^{\frac{3}{2}}\right)} \right) + \text{reg.} = \\ &= -\frac{FC^2}{4\pi} \left( \frac{\hbar^2}{2mF} \right)^{\frac{1}{3}} \int_{-\infty}^0 dz \frac{e^{iz^{\frac{1}{2}} \Delta z} + e^{-iz^{\frac{1}{2}} \Delta z}}{z^{\frac{1}{2}}} = FC^2 \left( \frac{\hbar^2}{2mF} \right)^{\frac{2}{3}} \delta(x - x') = \delta(x - x') \quad (382) \end{aligned}$$

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

**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  $\omega$ . Пусть в какой-то момент времени характерная частота осциллятора мгновенно меняется и становится равной  $\omega'$ . Вычислите вероятность остаться в основном состоянии.

**Решение.**

1. Действие операторов повышения и понижения:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (384)$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (385)$$

$$\begin{aligned} \langle x^4 \rangle &= \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \langle n | (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2)^2 | n \rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \langle n | \hat{a}^4 + \hat{a}^3\hat{a}^\dagger + \hat{a}^2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \\ &+ \hat{a}^2(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2\hat{a} + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^3 + \hat{a}^\dagger\hat{a}^3 + \hat{a}^\dagger\hat{a}^2\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}^2 + \\ &+ (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}\hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^3\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^4 | n \rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} ((n+1)(n+2) + (n+1)^2 + n(n+1) + n(n+1) + n^2 + n(n-1)) \end{aligned} \quad (386)$$

$$\boxed{\langle x^4 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2}(2n^2 + 2n + 1)} \quad (387)$$

2. Волновая функция основного состояния:

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (388)$$

$$P = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi'(x) dx \right|^2 = \left| \sqrt[4]{\frac{m^2\omega\omega'}{\pi^2\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m(\omega + \omega')x^2}{2\hbar}\right) dx \right|^2 \quad (389)$$

$$\boxed{P = \frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega + \omega'}} \quad (390)$$

### 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  $\alpha$  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»:

$$\hat{\mathbb{I}} = \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} |\alpha\rangle \langle\alpha| \quad (391)$$

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

**Решение.**

1. Оператор уничтожения:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} \quad (392)$$

$$\langle x|\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha \langle x|\alpha\rangle = \alpha \psi_\alpha(x) \quad (393)$$

$$\left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} \right) \psi_\alpha(x) = \alpha \psi_\alpha(x) \quad (394)$$

$$\left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_\alpha(x) = \alpha \psi_\alpha(x) \quad (395)$$

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial \psi_\alpha(x)}{\partial x} = \left( \alpha - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \right) \psi_\alpha(x) \quad (396)$$

$$\boxed{\psi_\alpha(x) = e^{\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \alpha x - \frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (397)$$

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

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t) |\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad (398)$$

$$E_n = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + n \right) \quad (399)$$

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega n t} |n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (400)$$

$$\psi_\alpha(x, t) \equiv \langle x|\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \langle x|n\rangle \quad (401)$$

$$\boxed{\psi_\alpha(x, t) = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} H_n \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)} \quad (402)$$

2. Разложим когерентное состояние по базису:

$$|\alpha\rangle = \sum_n C_n(\alpha) |n\rangle, \quad C_n(\alpha) = \langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\alpha} \langle n|\hat{a}\alpha\rangle = \frac{1}{\alpha} \langle \hat{a}^\dagger n|\alpha\rangle \quad (403)$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (404)$$

Получаем рекуррентное соотношение:

$$\alpha C_n(\alpha) = \sqrt{n+1} C_{n+1}(\alpha) \rightarrow C_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0(\alpha) \quad (405)$$

Условие нормировки:

$$C_0(\alpha) = \langle 0|\alpha\rangle = 1 \quad (406)$$

$$\boxed{|\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle} \quad (407)$$

3.

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (408)$$

$$|\alpha\rangle = \sum_n \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle = C(\alpha) |0\rangle \quad (409)$$

$$\boxed{C(\alpha) = e^{\alpha \hat{a}^\dagger}} \quad (410)$$

4.

$$\begin{aligned} \langle \alpha|\alpha'\rangle &= \langle 0|\hat{C}^\dagger(\alpha)\hat{C}(\alpha')|0\rangle = \langle 0|e^{\alpha^* \hat{a}} e^{\alpha' \hat{a}^\dagger} |0\rangle = \left\langle 0 \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha^* \hat{a})^k}{k!} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha' \hat{a}^\dagger)^n}{n!} \right| 0 \right\rangle = \\ &= \left\langle k \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{a}^k}{\sqrt{k!}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha'^n}{\sqrt{n!}} \right| n \right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^k}{\sqrt{k!}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha')^n}{\sqrt{n!}} \delta_{kn} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^* \alpha')^n}{n!} = e^{\alpha^* \alpha'} \end{aligned} \quad (411)$$

$$\boxed{\langle \alpha|\alpha'\rangle = e^{\alpha^* \alpha'}} \quad (412)$$

5.

$$\langle m|\hat{\mathbb{I}}|n\rangle = \delta_{mn} \quad (413)$$

$$\begin{aligned} \left\langle m \left| \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} |\alpha\rangle \langle \alpha| \right| n \right\rangle &= \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} \langle m|\alpha\rangle \langle \alpha|n\rangle = \\ &= \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} \frac{(\alpha^*)^m}{\sqrt{m!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \end{aligned} \quad (414)$$

$$\alpha = r e^{i\varphi}, \quad d(\text{Re}\alpha) d(\text{Im}\alpha) = r dr d\varphi \quad (415)$$

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{dr d\varphi}{\pi} r e^{-r^2} \frac{r^{m+n} e^{i(n-m)\varphi}}{\sqrt{m!n!}} &= \frac{1}{\sqrt{m!n!}} \int_0^\infty dr r^{m+n+1} e^{-r^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\pi} e^{i(n-m)\varphi} = \\
&= \frac{2}{\sqrt{m!n!}} \int_0^\infty dr r^{m+n+1} e^{-r^2} \delta_{nm} = \frac{1}{m!} \int_0^\infty d(r^2) r^{2m} e^{-r^2} \delta_{mn} = \frac{\Gamma(m+1)}{m!} \delta_{mn} = \delta_{mn} \quad (416)
\end{aligned}$$

Таким образом,

$$\hat{\mathbb{I}} = \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (417)$$

## 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:

$$\langle e^{\alpha_1 \hat{a} + \alpha_2 \hat{a}^\dagger} \rangle = e^{\frac{1}{2} \langle (\alpha_1 \hat{a} + \alpha_2 \hat{a}^\dagger)^2 \rangle} \quad (418)$$

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

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]}, \quad \text{если } [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (419)$$

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

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}) = \text{Tr} \left( \frac{1}{Z} e^{-\beta \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}} e^{\alpha_1 \hat{a} + \alpha_2 \hat{a}^\dagger} \right) \quad (420)$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr} \left( \frac{1}{Z} e^{-\beta \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}} e^{\alpha_1 \hat{a} + \alpha_2 \hat{a}^\dagger} \right) = \frac{1}{Z} \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} \langle \alpha | e^{\alpha_1 \hat{a} + \alpha_2 \hat{a}^\dagger} e^{-\beta \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}} | \alpha \rangle \quad (421)$$

$$e^{\alpha_1 \hat{a} + \alpha_2 \hat{a}^\dagger} = e^{\alpha_1 \hat{a}} e^{\alpha_2 \hat{a}^\dagger} e^{-\frac{\alpha_1 \alpha_2}{2} [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]} = e^{\alpha_1 \hat{a}} e^{\alpha_2 \hat{a}^\dagger} e^{\frac{\alpha_1 \alpha_2}{2}} \quad (422)$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} e^{\alpha_2 \alpha^*} e^{\frac{\alpha_1 \alpha_2}{2}} \langle \alpha | e^{\alpha_1 \hat{a}} e^{-\beta \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}} | \alpha \rangle \quad (423)$$

$$e^{-\beta \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}} | \alpha \rangle = e^{-\beta \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} | n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\beta \omega n} | n \rangle = e^{-\beta \omega} | \alpha \rangle \quad (424)$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O} \rangle &= \frac{e^{\frac{\alpha_1 \alpha_2}{2}}}{Z} \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2} e^{\alpha_2 \alpha^*} e^{\alpha_1 \alpha e^{-\beta \omega}} \langle \alpha | e^{-\beta \omega} | \alpha \rangle = \\
&= \frac{e^{\frac{\alpha_1 \alpha_2}{2}}}{Z} \int \frac{d\alpha d\alpha^*}{\pi} e^{-|\alpha|^2 (1 - e^{-\beta \omega})} e^{\alpha_2 \alpha^*} e^{\alpha_1 \alpha e^{-\beta \omega}} \quad (425)
\end{aligned}$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{e^{\frac{\alpha_1 \alpha_2}{2}}}{Z} (1 - e^{-\beta \omega}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{\pi}} e^{-(u^2 - \frac{\alpha_2 + \alpha_1 e^{-\beta \omega}}{\sqrt{1 - e^{-\beta \omega}}} u)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{\pi}} e^{-(u^2 + i \frac{\alpha_2 - \alpha_1 e^{-\beta \omega}}{\sqrt{1 - e^{-\beta \omega}}} u)} \quad (426)$$

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|e^{-\beta\omega n}|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\omega n} = \frac{1}{1-e^{-\beta\omega}} \quad (427)$$

$$\langle \hat{O} \rangle = e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2}} e^{\frac{(\alpha_2+\alpha_1 e^{-\beta\omega})^2}{4(1-e^{-\beta\omega})}} e^{-\frac{(\alpha_2-\alpha_1 e^{-\beta\omega})^2}{4(1-e^{-\beta\omega})}} = e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2} \left( \frac{1+e^{-\beta\omega}}{1-e^{-\beta\omega}} \right)} \quad (428)$$

$$\boxed{\langle e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger} \rangle = e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2} \coth \frac{\beta\omega}{2}}} \quad (429)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) = \text{Tr} \left( \frac{1}{Z} e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}} (\alpha_1\hat{a} + \alpha_2\hat{a}^\dagger)^2 \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left\langle n \left| \frac{1}{Z} e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}} (\alpha_1\hat{a} + \alpha_2\hat{a}^\dagger)^2 \right| n \right\rangle = \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \left\langle n \left| \frac{1}{Z} e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}} (\alpha_1^2\hat{a}^2 + \alpha_1\alpha_2\hat{a}\hat{a}^\dagger + \alpha_1\alpha_2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \alpha_2^2\hat{a}^{\dagger 2}) \right| n \right\rangle = \frac{\alpha_1\alpha_2}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}(2n+1)|n\rangle = \\ &= \frac{\alpha_1\alpha_2}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\omega n} (2n+1) = \frac{\alpha_1\alpha_2}{Z} \frac{1+e^{-\beta\omega}}{(1-e^{-\beta\omega})^2} = \alpha_1\alpha_2 \frac{1+e^{-\beta\omega}}{1-e^{-\beta\omega}} = \alpha_1\alpha_2 \coth \frac{\beta\omega}{2} \quad (430) \end{aligned}$$

$$\boxed{e^{\frac{1}{2}\langle (\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger)^2 \rangle} = e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{2} \coth \frac{\beta\omega}{2}} = \langle e^{\alpha_1\hat{a}+\alpha_2\hat{a}^\dagger} \rangle} \quad (431)$$

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:

$$U(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2 x^2}{2}, & |x| < L \\ \infty, & |x| > L \end{cases} \quad (432)$$

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  $|x| < L$ :

$$\psi(y) = C_{11} F_1 \left( -\frac{\epsilon}{2}, \frac{1}{2}, y^2 \right) e^{-\frac{y^2}{2}} + C_{21} y_1 F_1 \left( -\frac{\epsilon-1}{2}, \frac{3}{2}, y^2 \right) e^{-\frac{y^2}{2}} = C_1 \psi_1(y) + C_2 \psi_2(y) \quad (433)$$

$$x = \pm L \rightarrow y = \pm L \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (434)$$

$$\psi \left( \pm L \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) = 0 \quad (435)$$

$${}_1F_1 \left( -\frac{\epsilon}{2}, \frac{1}{2}, y^2 \right) e^{-\frac{m\omega L^2}{\hbar}} = 0 \quad (436)$$

Поскольку  $\frac{m\omega L^2}{\hbar} \gg 1$ , то воспользуемся асимптотической формулой

$${}_1F_1(a, b, z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} \quad (437)$$

$$\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right)} e^z z^{-\frac{\epsilon+1}{2}} + \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\epsilon+1}{2}\right)} (-z)^{\frac{\epsilon}{2}} = 0 \quad (438)$$

$$e^z + \frac{\Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\epsilon+1}{2}\right)} (-1)^{\frac{\epsilon}{2}} z^{\epsilon+\frac{1}{2}} = 0 \quad (439)$$

$$\Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right) \Gamma\left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right) = \frac{\pi}{\sin\left(-\frac{\pi\epsilon}{2}\right)} \quad (440)$$

$$\frac{\Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\epsilon+1}{2}\right)} = -\frac{\pi}{\sin\frac{\pi\epsilon}{2} \Gamma\left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1+\epsilon}{2}\right)} = -\frac{2^\epsilon \sqrt{\pi}}{\sin\frac{\pi\epsilon}{2} \Gamma(1 + \epsilon)} = -\frac{2^\epsilon \sqrt{\pi}}{\sin\frac{\pi\epsilon}{2} \epsilon \Gamma(\epsilon)} \quad (441)$$

$$\Gamma(\epsilon) = \Gamma(n + \delta n) = (n - 1 + \delta n) \dots (1 + \delta n) \Gamma(1 + \delta n) \approx \Gamma(n) \quad (442)$$

$$\frac{\Gamma\left(-\frac{\epsilon}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\epsilon+1}{2}\right)} = -\frac{2^n \sqrt{\pi}}{\sin\left(\frac{\pi n}{2} + \frac{\pi \delta n}{2}\right) n \Gamma(n) \Gamma(1 + \delta n)} \approx \begin{cases} -\frac{(-1)^k 2^n \sqrt{\pi}}{n \Gamma(n)}, & n = 2k + 1 \\ -\frac{(-1)^k 2^{n+1}}{\sqrt{\pi n \delta n} \Gamma(n)}, & n = 2k \end{cases} \quad (443)$$

$$e^z - \frac{2^{n+1} \sqrt{\pi}}{\pi \delta n n \Gamma(n)} z^{n+\frac{1}{2}} = 0 \quad (n = 2k) \quad (444)$$

$$\delta n = \frac{e^{-z} 2^{n+1}}{\sqrt{\pi n} \Gamma(n)} z^{n+\frac{1}{2}} \quad (445)$$

$${}_1F_1\left(-\frac{\epsilon-1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega L^2}{\hbar}\right) e^{-\frac{m\omega L^2}{2\hbar}} = 0 \quad (446)$$

$$\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\epsilon-1}{2}\right)} e^z z^{-\frac{\epsilon}{2}-1} + \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\epsilon+1}{2}\right)} (-z)^{\frac{\epsilon-1}{2}} = 0 \quad (447)$$

$$e^z + \frac{\Gamma\left(-\frac{\epsilon-1}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right)} (-1)^{\frac{\epsilon+1}{2}} z^{\epsilon+\frac{1}{2}} = 0 \quad (448)$$

$$\Gamma\left(-\frac{\epsilon-1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\epsilon+1}{2}\right) = \frac{\pi}{\sin\left(-\frac{\pi(\epsilon-1)}{2}\right)} \quad (449)$$

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma\left(-\frac{\epsilon-1}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right)} &= -\frac{\pi}{\sin\left(\frac{\pi(\epsilon-1)}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\epsilon}{2} + 1\right) \Gamma\left(\frac{1+\epsilon}{2}\right)} = -\frac{\pi}{\sqrt{\pi} 2^{-\epsilon} \epsilon \Gamma(\epsilon) \sin\left(\frac{\pi(\epsilon-1)}{2}\right)} = \\ &= -\frac{2^\epsilon \sqrt{\pi}}{\sin\left(\frac{\pi}{2}(n-1) + \frac{\pi}{2} \delta n\right) n \Gamma(n)} \approx \begin{cases} \frac{(-1)^k 2^\epsilon \sqrt{\pi}}{n \Gamma(n)}, & n = 2k + 1 \\ \frac{(-1)^k 2^{\epsilon+1}}{\sqrt{\pi n \delta n} \Gamma(n)}, & n = 2k \end{cases} \end{aligned} \quad (450)$$

$$e^z - \frac{2^{n+1} \sqrt{\pi}}{\pi \delta n n \Gamma(n)} z^{n+\frac{1}{2}} = 0 \quad (n = 2k + 1) \quad (451)$$

$$\delta n = \frac{e^{-z} 2^{n+1}}{\sqrt{\pi n} \Gamma(n)} z^{n+\frac{1}{2}} \quad (452)$$



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

$$E_n = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + n + \frac{2^{n+1} e^{-\frac{m\omega L^2}{\hbar}} \left( \frac{m\omega L^2}{\hbar} \right)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}\Gamma(n+1)} \right) \quad (453)$$

$$F_n = -\frac{\partial E_n}{\partial L} \approx \frac{2^{n+2} m\omega^2 L e^{-\frac{m\omega L^2}{\hbar}} \left( \frac{m\omega L^2}{\hbar} \right)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}\Gamma(n+1)} \quad (454)$$

### 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:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi - \frac{e^2}{r}\psi = E\psi \quad (455)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{e^2}{r} \psi = E\psi \quad (456)$$

Разделим переменные:

$$\psi(r, \varphi) = R(r) e^{im\varphi} \quad (457)$$

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

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} - \left( \frac{2Me^2}{\hbar^2 r} + \kappa^2 + \frac{m^2}{r^2} \right) R = 0 \quad (458)$$

Пусть  $x = \kappa r$ , тогда

$$R'' + \frac{R'}{x} - \left( 1 + \frac{2Me^2}{\hbar^2 \kappa x} + \frac{m^2}{x^2} \right) R = 0 \quad (459)$$

Введём замену  $R = x^m f$ :

$$R' = mx^{m-1}f + x^m f', \quad R'' = m(m-1)x^{m-2}f + 2mx^{m-1}f' + x^m f'' = \quad (460)$$

$$xf'' + (2m+1)f' - \left( x + \frac{2Me^2}{\hbar^2 \kappa} \right) f = 0 \quad (461)$$

$$x \rightarrow \infty : f'' - f = 0 \rightarrow f \sim e^{-x} \quad (462)$$

Введём замену  $f(x) = e^{-x}\chi(x)$ .

$$f'(x) = -e^{-x}\chi + e^{-x}\chi', \quad f''(x) = e^{-x}\chi - 2e^{-x}\chi' + e^{-x}\chi'' \quad (463)$$

$$x\chi'' + (2m+1-2x)\chi' - \left( 2m+1 + \frac{2Me^2}{\hbar^2 \kappa} \right) \chi = 0 \quad (464)$$

$$\chi(x) = C_1 F_1 \left( m + \frac{1}{2} - \frac{Me^2}{\hbar^2 \kappa}, 2m + 1, 2x \right) \quad (465)$$

Второе линейно независимое решение сингулярно в 0.

$$m + \frac{1}{2} - \frac{Me^2}{\hbar^2 \kappa} = -n \quad (466)$$

$$E_{n,m} = -\frac{\hbar^2}{2M} \chi^2 = -\frac{Me^2}{2\hbar^2 (|m| + n + \frac{1}{2})^2} \quad (467)$$

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

$$K = 2N + 1 \quad (468)$$

$$\psi(r, \varphi) = C e^{im\varphi} \left( \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r \right)^{|m|} e^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r} {}_1F_1 \left( -n, 2m + 1, 2 \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r \right) \quad (469)$$

## 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:

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (470)$$

Невозмущённая задача:

$$\hat{H}_0 \psi = E_m^{(0)} \psi \quad (471)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \psi = E_m^{(0)} \psi \rightarrow \psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (472)$$

Константа получена из условия нормировки:

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_{m'} d\varphi = \delta(m - m') \quad (473)$$

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

$$E_m^{(0)} = \frac{m^2}{2MR^2} \quad (474)$$

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

Возмущённый гамильтониан:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2MR^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - e\mathcal{E}R \cos \varphi \quad (475)$$

Матричные элементы возмущения:

$$V_{\alpha\beta} \equiv \langle n_\alpha^{(0)} | \hat{V} | n_\beta^{(0)} \rangle = -e\mathcal{E}R \int_0^{2\pi} \cos \varphi e^{i(\beta-\alpha)\varphi} d\varphi = -\frac{1}{2}e\mathcal{E}R(\delta_{\beta-\alpha,1} + \delta_{\beta-\alpha,-1}) \quad (476)$$

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

$$\hat{H}_{\alpha\beta}^{(\text{eff})} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{\alpha m} V_{m\beta}}{\omega_{mn}}, \quad \omega_{mn} = E_m^{(0)} - E_n^{(0)} = \frac{m^2 - n^2}{2MR^2} \quad (477)$$

Сужение гамильтониана:

$$\hat{H}_{\alpha\beta}^{(\text{eff})} = e^2 \mathcal{E}^2 MR^4 \begin{pmatrix} \frac{1}{4n^2-1} & \frac{\delta_{n,1}}{2} \\ \frac{\delta_{n,1}}{2} & \frac{1}{4n^2-1} \end{pmatrix} \quad (478)$$

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

$$E_1^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2 MR^4}{6}, \quad E_1^{(2)} = -\frac{5e^2 \mathcal{E}^2 MR^4}{6}, \quad E_n^{(2)} = -\frac{e^2 \mathcal{E}^2 MR^4}{4n^2 - 1} \quad (479)$$

$$\boxed{\alpha_1 \in \left\{ -\frac{e^2 MR^4}{3}, \frac{5e^2 MR^4}{3} \right\}, \quad \alpha_n = \frac{2e^2 MR^4}{4n^2 - 1}} \quad (480)$$

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

$$V_{00} = 0 \quad (481)$$

Второй порядок теории возмущений:

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|V_{0n}|^2}{\omega_{0n}} \quad (482)$$

$$E_0^{(2)} = -e^2 \mathcal{E}^2 MR^4 \quad (483)$$

$$\boxed{\alpha_0 = 2e^2 MR^4} \quad (484)$$

## 2. Базис состояний с фиксированной чётностью.

Рассмотрим базис из функций:

$$\psi_m^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(m\varphi), \quad \psi_m^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(m\varphi) \quad (485)$$

Матричные элементы возмущения:

$$V_{\alpha+, \beta+} = \frac{e\mathcal{E}R}{\varphi} \int_0^{2\pi} \cos(\varphi\alpha) \cos(\varphi\beta) \cos \varphi d\varphi = \frac{e\mathcal{E}R}{2} (\delta_{\alpha-\beta,1} + \delta_{\beta-\alpha,1} + \delta_{n+m,1}) \quad (486)$$

$$V_{\alpha-, \beta-} = \frac{e\mathcal{E}R}{\pi} \int_0^{2\pi} \sin(\varphi\alpha) \sin(\varphi\beta) \cos \varphi d\varphi = \frac{e\mathcal{E}R}{2} (\delta_{\alpha-\beta,1} + \delta_{\alpha+\beta,1} - \delta_{\alpha+\beta,1}) \quad (487)$$

$$V_{\alpha-, \beta+} = \frac{e\mathcal{E}R}{\pi} \int_0^{2\pi} \sin(\varphi\alpha) \cos(\varphi\beta) \cos \varphi d\varphi = 0 = V_{\alpha+, \beta-} \quad (488)$$

Сужение эффективного гамильтониана:

$$\hat{H}_{\alpha\beta}^{(\text{eff})} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2 M R^4}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\delta_{n,1}}{2} + \frac{1}{4n^2-1} & 0 \\ 0 & -\frac{\delta_{n,1}}{2} + \frac{1}{4n^2-1} \end{pmatrix} \quad (489)$$

Решая секулярное уравнение, получаем тот же ответ.

В случае  $n = 0$ :

$$V_{0\beta, +} = \frac{e\mathcal{E}R}{\sqrt{2}} \delta_{n,1}, \quad V_{0\beta, -} \equiv 0 \quad (490)$$

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  $2 \times 2$ , который записывается следующим образом:

$$\hat{H} = v_F \hat{\sigma} \cdot \hat{p} = v_F (\hat{\sigma}_x \hat{p}_x + \hat{\sigma}_y \hat{p}_y) = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} \quad (491)$$

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

$$\psi(x) = (\psi_A^{(1)}(x), \psi_B^{(1)}(x), \psi_A^{(2)}(x), \psi_B^{(2)}(x)) \quad (492)$$

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

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & v_F(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) & 0 & 0 \\ v_F(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & v_F(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ 0 & 0 & v_F(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (493)$$

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

$$w_{11} = w_{14} = 0, \quad w_{12} = \Delta, \quad w_{13} = -\Delta \quad (494)$$

1 порядок не убирает вырождение по энергии.

$$\hat{V} = v_F \begin{pmatrix} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \end{pmatrix} \quad (495)$$

$$H_{11}^{(1)} = \frac{V_{12}V_{21}}{\omega_{12}} + \frac{V_{13}V_{31}}{\omega_{13}} = -\frac{aa^\dagger}{\Delta}, \quad H_{14}^{(1)} = \frac{V_{12}V_{24}}{\omega_{12}} + \frac{V_{13}V_{34}}{\omega_{13}} = 0 \quad (496)$$

$$H_{41}^{(1)} = \frac{V_{42}V_{21}}{\omega_{12}} + \frac{V_{43}V_{31}}{\omega_{13}} = 0, \quad H_{44}^{(1)} = \frac{V_{42}V_{24}}{\omega_{12}} + \frac{V_{43}V_{34}}{\omega_{13}} = \frac{aa^\dagger}{\Delta} \quad (497)$$

$$\boxed{\hat{H}^{\text{eff}} = \frac{v_F^2 p^2}{\Delta} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} \quad (498)$$

$$\det(\hat{H}^{\text{eff}} - E_0^{(2)}) = 0 \rightarrow \boxed{E_0^{(2)} = \pm \frac{p^2}{\Delta} v_F^2} \quad (499)$$

### 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  $\alpha$ .

*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:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (500)$$

Волновая функция и энергия основного состояния:

$$\psi^{(0)}(r) = \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}, \quad E^{(0)} = -\frac{e^2}{2a} \quad (501)$$

Возмущение:

$$\hat{V} = -e\mathcal{E}\hat{z} \quad (502)$$

$$\psi = \psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r, \theta) \quad (503)$$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})(\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r, \theta)) = (E^{(0)} + E^{(1)})(\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r, \theta)) \quad (504)$$

$$z = r \cos \theta \quad (505)$$

$$\hat{H}_0 \psi^{(1)} + \hat{V} \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(1)} \quad (506)$$

$$\begin{aligned} -\frac{ae^2}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2} \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi^{(1)}(r, \theta) - \frac{e^2}{r} \psi^{(1)}(r, \theta) - \frac{e\mathcal{E}e^{-\frac{r}{a}}}{\sqrt{\pi a^3}} r \cos \theta = \\ = -\frac{e^2}{2a} \psi^{(1)}(r, \theta) \end{aligned} \quad (507)$$

$$\psi^{(1)}(r, \theta) = f(r)e^{-r/a} \cos \theta \quad (508)$$

$$\frac{af''(r)}{2} + \frac{(a-r)f'(r)}{r} + \frac{r^2 - 2ar - 2a^2}{2ar^2} f(r) + \frac{f(r)}{r} + \frac{\mathcal{E}r}{e\sqrt{\pi a^3}} = \frac{f(r)}{2a} \quad (509)$$

$$\frac{af''(r)}{2} + \frac{(a-r)f'(r)}{r} - \frac{af(r)}{r^2} + \frac{\mathcal{E}r}{e\sqrt{\pi a^3}} = 0 \quad (510)$$

Пусть  $x = \frac{r}{a}$ , тогда

$$\boxed{f''(x) + \frac{2(1-x)f'(x)}{x} - \frac{2f(x)}{x^2} + 2\sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\mathcal{E}x}{e} = 0} \quad (511)$$

2. Данное уравнение имеет простое полиномиальное решение:

$$f(x) = A + Bx + Cx^2 \quad (512)$$

$$C + \frac{(1-x)(B+2Cx)}{x} - \frac{A+Bx+Cx^2}{x^2} + \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\mathcal{E}x}{e} = 0 \quad (513)$$

$$2C - B - 2Cx - \frac{A}{x^2} + \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\mathcal{E}x}{e} = 0 \quad (514)$$

Приравняем коэффициенты при каждой степени:

$$\begin{cases} A = 0, \\ 2C - B = 0. \\ C = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\mathcal{E}}{2e} \end{cases} \quad (515)$$

$$\boxed{A = 0, \quad B = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\mathcal{E}}{e}, \quad C = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\mathcal{E}}{2e}} \quad (516)$$

3.

$$f(x) = A + Bx + Cx^2 = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\mathcal{E}x}{e} \left(1 + \frac{x}{2}\right) \quad (517)$$

$$\psi^{(1)}(r, \theta) = f(r) e^{-r/a} \cos \theta \quad (518)$$

$$\boxed{\psi^{(1)}(r, \theta) = \frac{\mathcal{E}r}{e\sqrt{\pi a}} \left(1 + \frac{r}{2a}\right) e^{-r/a} \cos \theta} \quad (519)$$

2 порядок теории возмущений:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})(\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r, \theta) + \psi^{(2)}(r, \theta)) = (E^{(0)} + E^{(2)})(\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r, \theta) + \psi^{(2)}(r, \theta)) \quad (520)$$

$$\hat{H}_0 \psi^{(2)}(r, \theta) + \hat{V} \psi^{(1)}(r, \theta) = E^{(0)} \psi^{(2)}(r) + E^{(2)} \psi^{(0)}(r) \quad (521)$$

$$E^{(2)} = \langle \psi^{(0)}(r) | \hat{V} | \psi^{(1)}(r, \theta) \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int_1^{-1} d \cos \theta \int_0^{\infty} dr r^2 \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}} (-e \mathcal{E} r \cos \theta) \frac{\mathcal{E} r}{e \sqrt{\pi a}} * \\ \left(1 + \frac{r}{2a}\right) e^{-r/a} \cos \theta = -\frac{9}{4} a^3 \mathcal{E}^2 \quad (522)$$

$$\boxed{E^{(2)} = -\frac{9}{4} a^3 \mathcal{E}^2} \quad (523)$$

$$\boxed{\chi = -\frac{\partial^2 E^{(2)}}{\partial \mathcal{E}^2} = \frac{9a^3}{2}} \quad (524)$$

**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)** Прodelайте 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  $\delta E_0$ .
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:

$$(\hat{H} + \hat{V}_1)(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle) = (E^{(0)} + E^{(1)})(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle) \quad (525)$$

Поскольку  $E^{(0)} = E_0 = 0$ , то  $\hat{H}|\psi^{(0)}\rangle = 0$  и

$$\hat{V}_1|\psi^{(0)}\rangle + \hat{H}|\psi^{(1)}\rangle = E^{(1)}|\psi^{(0)}\rangle \quad (526)$$

Домножив скалярно на  $\langle \psi^{(0)} |$ , получим

$$\langle \psi^{(0)} | \hat{V}_1 | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | \hat{H} | \psi^{(1)} \rangle = \langle \psi^{(0)} | E^{(1)} | \psi^{(0)} \rangle \quad (527)$$



$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_1 | \psi^{(0)} \rangle \quad (528)$$

Из нечётности  $\hat{V}_1$  получим

$$\boxed{E^{(1)} = 0} \quad (529)$$

Полученный ответ наталкивает на мысль перейти ко 2 пункту.

2. 1 порядок теории возмущений:

$$\hat{H}\psi^{(1)} + \hat{V}^{(1)}\psi^{(0)} = 0 \quad (530)$$

$$\frac{1}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - 1 \right) \psi^{(1)}(x) + gx(1-x^2) \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} = 0 \quad (531)$$

$$\psi^{(1)}(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} f(x) \quad (532)$$

$$\left( f e^{-\frac{x^2}{2}} \right)'' = \left( -x f e^{-\frac{x^2}{2}} + f' e^{-\frac{x^2}{2}} \right)' = e^{-\frac{x^2}{2}} ((x^2 - 1)f(x) - 2x f'(x) + f''(x)) \quad (533)$$

$$2x f'(x) - f''(x) + \frac{2gx(1-x^2)}{\sqrt[4]{\pi}} = 0 \quad (534)$$

Ищем  $f(x)$  в виде:

$$f(x) = Bx + Cx^2 + Dx^3 \quad (535)$$

$$2x(B + 2Cx + 3Dx^2) - 2C - 6Dx + \frac{2gx(1-x^2)}{\sqrt[4]{\pi}} = 0 \quad (536)$$

$$\begin{cases} C = 0, \\ 2B - 6D + \frac{2g}{\sqrt[4]{\pi}} = 0, \\ 6D - \frac{2g}{\sqrt[4]{\pi}} = 0. \end{cases} \quad (537)$$

$$B = C = 0, \quad D = \frac{g}{3\sqrt[4]{\pi}} \quad (538)$$

$$f(x) = \frac{gx^3}{3\sqrt[4]{\pi}} \quad (539)$$

$$\boxed{\psi^{(1)}(x) = \frac{gx^3 e^{-\frac{x^2}{2}}}{3\sqrt[4]{\pi}}} \quad (540)$$

Рассмотрим 2 порядок теории возмущений:

$$(\hat{H} + \hat{V}_1 + \hat{V}_2)(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + |\psi^{(2)}\rangle) = (E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)})(|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + |\psi^{(2)}\rangle) \quad (541)$$

$$\hat{H}|\psi^{(2)}\rangle + \hat{V}_1|\psi^{(1)}\rangle + \hat{V}_2|\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\psi^{(2)}\rangle + E^{(1)}|\psi^{(1)}\rangle + E^{(2)}|\psi^{(0)}\rangle \quad (542)$$

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

$$\langle \psi^{(0)} | \hat{V}_1 | \psi^{(1)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_2 | \psi^{(0)} \rangle = E^{(2)} \quad (543)$$

$$E^{(2)} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{gx^3 e^{-\frac{x^2}{2}}}{3\sqrt[4]{\pi}} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \frac{g^2 x^4}{2} dx = -\frac{3g^2}{8} + \frac{3g^2}{8} = 0 \quad (544)$$

$$\boxed{E^{(2)} = 0} \quad (545)$$

$$\hat{H}^{(0)}\psi^{(2)} + \hat{V}^{(1)}\psi^{(1)} + \hat{V}^{(2)}\psi^{(0)} = 0 \quad (546)$$

$$\frac{1}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 \right) \psi^{(2)} + gx(1-x^2) \frac{gx^3}{3\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} + \frac{g^2 x^4 e^{-\frac{x^2}{2}}}{2\sqrt[4]{\pi}} = 0 \quad (547)$$

Решая ДУ аналогично предыдущему, получим

$$\boxed{\psi^{(2)} = \frac{g^2 x^6}{18\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}} \quad (548)$$

3. Рассмотрим произвольный  $n$ -й порядок теории возмущений:

$$\hat{H} |\psi^{(n)}\rangle + \hat{V}_1 |\psi^{(n-1)}\rangle + \hat{V}_2 |\psi^{(n-2)}\rangle = E^{(0)} |\psi^{(n)}\rangle + E^{(1)} |\psi^{(n-1)}\rangle + \dots + E^{(n)} |\psi^{(0)}\rangle \quad (549)$$

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

$$E^{(n)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_1 |\psi^{(n-1)}\rangle + \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_2 |\psi^{(n-2)}\rangle \quad (550)$$

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

$$\begin{aligned} E^{(n)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{g^n x^{3(n-1)}}{\sqrt[4]{\pi} 3^{n-1} (n-1)!} e^{-\frac{x^2}{2}} gx(1-x^2) dx + \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{g^{n-2} x^{3(n-2)}}{\sqrt[4]{\pi} 3^{n-2} (n-2)!} e^{-\frac{x^2}{2}} \frac{g^2 x^4}{2} dx = -\frac{3^{2-n}(1+(-1)^{3n})g^n \Gamma(\frac{3n}{2} - \frac{1}{2})}{4\sqrt{\pi}(n-2)!} + \\ &+ \frac{3^{2-n}(1+(-1)^{3n})g^n \Gamma(\frac{3n}{2} - \frac{1}{2})}{4\sqrt{\pi}(n-2)!} = 0 \end{aligned} \quad (551)$$

$$\boxed{E^{(n)} = 0} \quad (552)$$

Теперь проверим, что будет выполняться:

$$\hat{H}\psi^{(n)} + \hat{V}^{(1)}\psi^{(n-1)} + \hat{V}^{(2)}\psi^{(n-2)} = 0 \quad (553)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 \right) \frac{g^n x^{3n}}{\sqrt[4]{\pi} 3^n n!} e^{-\frac{x^2}{2}} + gx(1-x^2) \frac{g^{n-1} x^{3(n-1)}}{\sqrt[4]{\pi} 3^{n-1} (n-1)!} e^{-\frac{x^2}{2}} + \\ + \frac{g^2 x^4}{2} \frac{g^{n-2} x^{3(n-2)}}{\sqrt[4]{\pi} 3^{n-2} (n-2)!} e^{-\frac{x^2}{2}} = 0 \end{aligned} \quad (554)$$

Таким образом, поправка произвольного порядка к волновой функции:

$$\boxed{\psi^{(n)} = \frac{g^n x^{3n}}{\sqrt[4]{\pi} 3^n n!} e^{-\frac{x^2}{2}}} \quad (555)$$

Просуммируем ряд возмущений:

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^n x^{3n}}{\sqrt[4]{\pi} 3^n n!} e^{-\frac{x^2}{2}} = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{gx^3}{3} \right)^n = \frac{\exp\left(g \frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}\right)}{\sqrt[4]{\pi}} \quad (556)$$

Проверим, что это точное решение уравнения Шрёдингера:

$$\left( \frac{1}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - 1 \right) + gx(1-x^2) + \frac{g^2 x^4}{2} \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (557)$$

$$\frac{1}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - 1 \right) \psi(x) = -\frac{gx(2-2x^2+gx^3)}{2\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(g \frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}\right) \quad (558)$$

$$\left( \frac{1}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - 1 \right) + gx(1-x^2) + \frac{g^2 x^4}{2} \right) \psi(x) = 0 \quad (559)$$

Таким образом, точное решение уравнения Шрёдингера:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{\exp\left(g \frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2}\right)}{\sqrt[4]{\pi}}} \quad (560)$$

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

#### 4. Критерий применимости теории возмущений:

$$\langle \psi^{(n)} | \psi^{(n)} \rangle \gg \langle \psi^{(n+1)} | \psi^{(n+1)} \rangle \quad (561)$$

$$\langle \psi^{(n)} | \psi^{(n)} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g^{2n} x^{6n}}{\sqrt{\pi} 3^{2n} (n!)^2} e^{-x^2} dx = \frac{g^{2n} \Gamma(3n + \frac{1}{2})}{\sqrt{\pi} 3^{2n} \Gamma(n+1)^2} = \frac{g^{2n} (6n)!}{2^{6n} 3^{2n} (n!)^2 (3n)!} \quad (562)$$

При больших  $n$  воспользуемся формулой Стирлинга:

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left( \frac{n}{e} \right)^n \quad (563)$$

$$\langle \psi^{(n)} | \psi^{(n)} \rangle \sim \frac{g^{2n} \sqrt{12\pi n} (6n)^{6n}}{2^{6n} 3^{2n} 2\pi n^{2n+1} \sqrt{6\pi n} (3n)^{3n}} = \frac{3^n g^{2n} n^{n-1}}{\sqrt{2\pi}} \quad (564)$$

$$\frac{\langle \psi^{(n+1)} | \psi^{(n+1)} \rangle}{\langle \psi^{(n)} | \psi^{(n)} \rangle} = \frac{3g^2 (n+1)^n}{n^{n-1}} \approx 3g^2 n \ll 1 \quad (565)$$

$$n^* \gg \frac{1}{3g^2} \quad (566)$$

Например, можно взять другую степень  $g$ :

$$\boxed{n^* = \frac{1}{3g}} \quad (567)$$

5. Подставим  $n^*$ :

$$\langle \delta\psi | \delta\psi \rangle = \langle \psi^{(n^*)} | \psi^{(n^*)} \rangle = \frac{3^{n^*} g^{2n^*} (n^*)^{n^*-1}}{\sqrt{2\pi}} \quad (568)$$

## 8 Нестационарная теория возмущений

### Задача 1. Осцилляция Раби (20 баллов)

К атому водорода, находящемуся в основном состоянии, прикладывается переменное электрическое поле  $\hat{V} = -e\mathcal{E}\hat{z}\cos(\omega t)$  с частотой  $\omega = \frac{3}{4}\text{Ry} + \varepsilon$ , где «отстройка частоты» и характерная величина электрического поля  $e\mathcal{E}a$ ,  $\varepsilon \ll \text{Ry}$  (тут  $\text{Ry} = \frac{me^4}{2\hbar^2}$  – постоянная Ридберга, а  $a = \frac{1}{me^2}$  – Боровский радиус); в то же время, соотношение поля  $\mathcal{E}$  и отстройки частоты  $\varepsilon$ , 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:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (569)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad \hat{V}(t) = -e\mathcal{E}\hat{z}\cos(\omega t), \quad \hat{z} = r \cos \theta \quad (570)$$

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

$$|\psi_1(t)\rangle = e^{-\frac{i\text{Ry}t}{\hbar}} |\psi_1\rangle, \quad |\psi_2(t)\rangle = e^{-\frac{i\text{Ry}t}{4\hbar}} |\psi_2\rangle \quad (571)$$

Нестационарная теория возмущений:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = V_{21} \psi_1(t), \quad V_{21} = \langle \psi_2(t) | \hat{V}(t) | \psi_1(t) \rangle \quad (572)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -e\mathcal{E} \cos(\omega t) e^{\frac{3i\text{Ry}t}{4\hbar}} \langle \psi_2 | r \cos \theta | \psi_1 \rangle \psi_1(t) \quad (573)$$

$$\langle \psi_2 | r \cos \theta | \psi_1 \rangle = \iint d\Omega r^3 \cos \theta R_{2,1} Y_{1,0} R_{1,0} Y_{0,0} = \frac{2^6 \sqrt{2} a}{3^4} \quad (574)$$

Остальные усреднения с  $\psi_2$  при  $n = 2$ :  $l = 0, m = 0$ ,  $l = 1, m = -1$ ,  $l = 1, m = 1$  дают 0 ввиду нечётности по углу  $\theta$ .

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -e\mathcal{E} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{\frac{3i\text{Ry}t}{4\hbar}} \frac{2^5 \sqrt{2} a}{3^4} \psi_1(t) = -e\mathcal{E} e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} \frac{2^5 \sqrt{2} a}{3^4} \psi_1(t) \quad (575)$$

где в последнем слагаемом пренебрегли быстроосциллирующим слагаемым. По аналогии,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = -e\mathcal{E} e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} \frac{2^5 \sqrt{2} a}{3^4} \psi_2(t) \quad (576)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = i \frac{e\mathcal{E}a}{\hbar} e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} \frac{2^5 \sqrt{2}}{3^4} \psi_2(t), \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = i \frac{e\mathcal{E}a}{\hbar} e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} \frac{2^5 \sqrt{2}}{3^4} \psi_1(t). \end{cases} \quad (577)$$

Решая полученную систему, получим

$$\psi_2(t) = -ie^{-i\frac{\epsilon}{2}t} \frac{C}{\sqrt{\epsilon^2 + C^2}} \sin\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + C^2}}{2\hbar}t\right) \quad (578)$$

где  $C = \frac{2^6\sqrt{2}}{3^4}e\mathcal{E}a$ .

Вероятность оказаться в возбуждённом состоянии:

$$P_{n=2}(T) = \frac{C^2}{\epsilon^2 + C^2} \sin^2\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + C^2}}{2\hbar}T\right) \quad (579)$$

Вероятность остаться в основном состоянии:

$$P_{n=1}(T) = 1 - \frac{C^2}{\epsilon^2 + C^2} \sin^2\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + C^2}}{2\hbar}T\right) \quad (580)$$

## 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:

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} \alpha t & \gamma \\ \gamma & -\alpha t \end{pmatrix} \quad (581)$$

В начальный момент времени  $t \rightarrow -\infty$ , система находилась в первом состоянии (так что  $|\psi_1(t \rightarrow -\infty)|^2 = 1$ ). Определите вероятность перехода системы во второе состояние после такой эволюции  $|\psi_2(t \rightarrow \infty)|^2$ , считая «скорость движения уровней» большой  $\alpha \gg \gamma^2$ .

**Решение.**

Выделим в гамильтониане невозмущённую и возмущённую части:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{V}(t), \quad \hat{H}_0(t) = \begin{pmatrix} \alpha t & 0 \\ 0 & -\alpha t \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma \\ \gamma & 0 \end{pmatrix} \quad (582)$$

Эволюция состояний, если бы не было возмущения:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_1(t)\rangle}{\partial t} = \alpha t |\psi_1\rangle, \quad i\hbar \frac{\partial |\psi_2(t)\rangle}{\partial t} = -\alpha t |\psi_2\rangle \quad (583)$$

$$|\psi_1(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\alpha t^2}{2}\right) |\psi_1\rangle, \quad |\psi_2(t)\rangle = \exp\left(i\frac{\alpha t^2}{2}\right) |\psi_2\rangle \quad (584)$$

Нестационарная теория возмущений:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2(t)}{\partial t} = V_{21} \psi_1(t), \quad V_{21} = \langle \psi_2(t) | \hat{V} | \psi_1(t) \rangle \quad (585)$$

$$V_{21} = \gamma \exp(-i\alpha t^2) \quad (586)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2(t)}{\partial t} = \gamma \exp(-i\alpha t^2) \psi_1(t) \approx \gamma \exp(-i\alpha t^2) \quad (587)$$

$$\psi_2(t \rightarrow \infty) = -\frac{i\gamma}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\alpha t^2) dt = \frac{\sqrt{\pi i} \gamma}{\sqrt{\alpha} \hbar} \quad (588)$$

Вероятность перехода системы во второе состояние:

$$P = \frac{\pi \gamma^2}{\alpha \hbar^2} \quad (589)$$

### 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:

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} + e\mathcal{E}(t)\hat{x}, \quad \mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \quad (590)$$

При  $t \rightarrow -\infty$ , электрон находится в основном состоянии системы. Определите вероятность обнаружить его в произвольном  $n$ -том возбуждённом состоянии при  $t \rightarrow +\infty$  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:

$$|n(t)\rangle = e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} \quad (591)$$

Определим, какие матричные элементы возмущения вообще отличны от нуля. Используя лестничные операторы, видно, что отличны от нуля только переходы между соседними уровнями:

$$V_{nm}(t) = -e\mathcal{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \langle n(t) | x | m(t) \rangle = -\frac{e\mathcal{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}}{\sqrt{2m\omega}} \begin{cases} e^{i\omega t} \sqrt{n}, & m = n - 1 \\ e^{-i\omega t} \sqrt{n+1}, & m = n + 1 \end{cases} \quad (592)$$

$n$ -ый порядок теории возмущений:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t} = V_{nn-1} \psi_{n-1}(t) = -\frac{e\mathcal{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} e^{i\omega t}}{\sqrt{2m\omega}} \sqrt{n} \psi_{n-1}(t) \quad (593)$$

$$\psi_n(t \rightarrow \infty) = \left( \frac{ie\mathcal{E}_0}{\hbar\sqrt{2m\omega}} \right)^n \sqrt{n!} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 e^{-\frac{\tau_1^2}{\tau^2} + i\omega\tau_1} \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 e^{-\frac{\tau_2^2}{\tau^2} + i\omega\tau_2} \dots \int_{-\infty}^{\tau_{n-1}} d\tau_n e^{-\frac{\tau_n^2}{\tau^2} + i\omega\tau_n} \quad (594)$$

Эти интегралы можно превратить в интеграл по всему  $\mathbb{R}^n$ , разделив на  $2^{n-1}$ :

$$\psi_n(t \rightarrow \infty) = 2^{1-n} \left( \frac{ie\mathcal{E}_0}{\hbar\sqrt{2m\omega}} \right)^n \sqrt{n!} \int_{\mathbb{R}^n} dt^n e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} e^{i\omega \sum_{i=1}^n t_i} = \frac{2}{\sqrt{n!}} \left( \frac{ie\mathcal{E}_0 \sqrt{\pi} \tau e^{-\frac{\omega^2 \tau^2}{4}}}{2\hbar\sqrt{2m\omega}} \right)^n \quad (595)$$

Вероятность оказаться в  $n$ -том состоянии:

$$P_n = \frac{4}{n!} \left( \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2 \pi \tau^2 e^{-\frac{\omega^2 \tau^2}{2}}}{8m\hbar^2 \omega} \right)^n \quad (596)$$

## 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,  $L \rightarrow \infty$ , и электрон находится в одной из ям. Расстояние между ямами затем медленно 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  $L \rightarrow \infty$  реализуется туннельный режим. Волновая функция электрона в начальный момент времени:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\text{чёт}} + \psi_{\text{нечет}}) \quad (597)$$

где  $\psi_{\text{чёт}}$  – чётная волновая функция,  $\psi_{\text{нечет}}$  – нечётная. Нечётное состояние существует только при  $\kappa L \geq 1$ . Поэтому при  $L \rightarrow 0$  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.

$$\psi_{\text{чёт}}(t) \propto \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{\text{чёт}}(0) \quad (598)$$

Вероятность остаться в яме:

$$\boxed{P = \frac{1}{2}} \quad (599)$$

#### 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:

$$a(t) = a(1 - \alpha \sin^2 \omega t), \quad \alpha < 1 \quad (600)$$

При каких условиях в такой задаче следует ожидать применимость адиабатического приближения?

#### Решение.

Уровни энергии в бесконечно глубокой яме:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad (601)$$

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (2n+1)}{2ma^2} \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (602)$$

Критерий адиабатичности:

$$\omega \ll \Delta E \quad (603)$$

Таким образом, условия применимости адиабатичности:

$$\boxed{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \gg \omega} \quad (604)$$

## Задачи (90 баллов)

### Задача 1. Переворот спина (20 баллов)

Спин-1/2 находится в магнитном поле  $\vec{B}$ , которое медленно вращается в плоскости  $yz$ :

$$\hat{H} = -\mu \vec{B} \cdot \hat{\vec{\sigma}}, \quad \vec{B}(t) = B \left( 0, \frac{1}{\cosh \omega t}, -\tanh \omega t \right) \quad (605)$$

и  $\omega \ll \mu B$ . В начальный момент времени  $t \rightarrow -\infty$  спин и магнитное поле направлены по оси  $z$ . Найдите в первом не исчезающем порядке вероятность того, что спин останется направленным по оси  $z$  после завершения вращения при  $t \rightarrow \infty$ .

**Решение.**

$$\hat{H} = -\mu \vec{B} \cdot \hat{\vec{\sigma}} = -\mu \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} = \mu B \begin{pmatrix} \tanh \omega t & \frac{i}{\cosh \omega t} \\ -\frac{i}{\cosh \omega t} & -\tanh \omega t \end{pmatrix} \quad (606)$$

Собственные значения и векторы этой матрицы:

$$E_- = -\mu B, \quad E_+ = \mu B \quad (607)$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{-2\omega t}}} \begin{pmatrix} -ie^{-\omega t} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + e^{2\omega t}}} \begin{pmatrix} ie^{\omega t} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (608)$$

В начальный момент  $c_- = 1, c_+ = 0$ . Нестационарная адиабатика:

$$c_+(T \rightarrow \infty) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left( i \int_0^t \omega_{+-}(\tau) d\tau \right) \frac{\langle \psi_+ | \partial_t \hat{H} | \psi_- \rangle}{\omega_{+-}(t)} dt, \quad \omega_{+-} = E_+ - E_- = 2\mu B \quad (609)$$

$$\partial_t \hat{H} = \frac{\mu B \omega}{\cosh^2 \omega t} \begin{pmatrix} 1 & -i \sinh \omega t \\ i \sinh \omega t & -1 \end{pmatrix} \quad (610)$$

$$\langle \psi_+ | \partial_t \hat{H} | \psi_- \rangle = -\frac{\mu B \omega}{\cosh \omega t} \quad (611)$$

$$c_-(T \rightarrow \infty) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i2\mu B t)}{2 \cosh \omega t} \omega dt = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i \frac{2\mu B x}{\omega})}{2 \cosh x} dx \quad (612)$$

Вычислим интеграл при помощи вычетов. Нули знаменателя:  $z_k = \pi i \left( \frac{1}{2} + k \right), k \in \mathbb{Z}$ . Берём только полюс  $z_0 = \frac{i\pi}{2}$ .

$$c_-(T \rightarrow \infty) = -2\pi i \operatorname{res}_{z=\frac{i\pi}{2}} \frac{\exp(i \frac{2\mu B z}{\omega})}{2 \cosh z} = -\pi \exp \left( -\frac{\pi \mu B}{\omega} \right) \quad (613)$$

Вероятность того, что спин будет направлен по оси  $z$ :

$$P = \pi^2 \exp \left( -\frac{2\pi \mu B}{\omega} \right) \quad (614)$$

### 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  $\Phi$ , так что гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p}_\varphi - \frac{e}{c} A_\varphi)^2}{2m} - U_0 \delta(\varphi - \varphi_0), \quad \hat{p}_\varphi = -\frac{i}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad A_\varphi = \frac{\Phi}{2\pi R} \quad (615)$$



Яму адиабатически медленно обводят вокруг кольца по часовой стрелке — величина  $\varphi_0$  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:

$$\hat{H}\psi(\varphi) = E\psi(\varphi) \quad (616)$$

Распишем гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\left(\frac{i}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e\Phi}{2\pi Rc}\right)^2}{2m} - U_0\delta(\varphi - \varphi_0) \quad (617)$$

При  $\varphi \neq \varphi_0$ :

$$\left(\frac{i}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e\Phi}{2\pi Rc}\right)^2 \psi(\varphi) = 2mE\psi(\varphi) \quad (618)$$

Ищем решение  $\psi(\varphi)$  в виде экспоненты:

$$\left(\frac{i}{R}\lambda + \frac{e\Phi}{2\pi Rc}\right)^2 = 2mE \quad (619)$$

$$\lambda_{1,2} = i \left( \frac{e\Phi}{2\pi c} \pm \sqrt{2mER} \right) \quad (620)$$

Поскольку состояние связанное  $E < 0$ , то

$$\lambda_{1,2} = \left( \frac{ie\Phi}{2\pi c} \mp \sqrt{2m|E|R} \right) \quad (621)$$

Пусть  $A = \frac{e\Phi}{2\pi c}$ ,  $B = \sqrt{2m|E|R}$ , тогда

$$\psi(\varphi) = C_1 e^{(iA-B)\varphi} + C_2 e^{(iA+B)\varphi} \quad (622)$$

Положим  $\varphi_0 = 0$ , а после сшивки сдвинем  $\varphi$  обратно. Условия сшивки:

$$\begin{cases} \psi(0+0) = \psi(2\pi-0), \\ \psi'(0) - \psi'(2\pi-0) = -2mU_0R^2; \end{cases} \quad (623)$$

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = C_1 e^{(iA-B)2\pi} + C_2 e^{(iA+B)2\pi}, \\ (iA-B)C_1 + (iA+B)C_2 - (iA-B)C_1 e^{(iA-B)2\pi} - (iA+B)C_2 e^{(iA+B)2\pi} = -2mU_0R^2(C_1 + C_2); \end{cases}$$

Выразим  $C_2$  через  $C_1$ :

$$C_2 = -C_1 e^{-2\pi B} \frac{\sin(\pi(A+iB))}{\sin(\pi(A-iB))} \quad (624)$$

Характерный размер волновой функции  $\ll R$ , поэтому  $e^{-B\varphi} \ll 1$  и  $B \gg 1$ . Условие нормировки:

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \quad (625)$$

Пользуясь тем, что  $B \gg 1$ , получим

$$C_2 = \sqrt{B}e^{-2\pi B}, \quad C_1 = \sqrt{B}e^{2\pi iA} \quad (626)$$

$$\psi(\varphi) = \sqrt{B}e^{2\pi iA}e^{(iA-B)\varphi} + \sqrt{B}e^{-2\pi B}e^{(iA+B)\varphi} \quad (627)$$

Сдвигая на угол  $\varphi_0$ , получим

$$\psi(\varphi) = \sqrt{B}e^{2\pi iA}e^{(iA-B)(\varphi-\varphi_0)} + \sqrt{B}e^{-2\pi B}e^{(iA+B)(\varphi-\varphi_0)} \quad (628)$$

Фаза Берри:

$$\gamma = \int_0^{2\pi} d\varphi_0 \langle \psi(\varphi_0) | i\partial_{\varphi_0} | \psi(\varphi_0) \rangle \quad (629)$$

$$\partial_{\varphi_0}\psi(\varphi_0) = -\sqrt{B}e^{2\pi iA}(iA-B)e^{(iA-B)(\varphi-\varphi_0)} - \sqrt{B}(iA+B)e^{-2\pi B}e^{(iA+B)(\varphi-\varphi_0)} \quad (630)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi(\varphi_0) | i\partial_{\varphi_0} | \psi(\varphi_0) \rangle &= - \int_0^{2\pi} d\varphi (\sqrt{B}e^{-2\pi iA}e^{(-iA-B)(\varphi-\varphi_0)} + \sqrt{B}e^{-2\pi B}e^{(-iA+B)(\varphi-\varphi_0)})i \\ &(\sqrt{B}e^{2\pi iA}(iA-B)e^{(iA-B)(\varphi-\varphi_0)} + \sqrt{B}(iA+B)e^{-2\pi B}e^{(iA+B)(\varphi-\varphi_0)}) = A \end{aligned} \quad (631)$$

$$\gamma = \int_0^{2\pi} d\varphi_0 A = 2\pi A \quad (632)$$

$$\boxed{\gamma = \frac{e\Phi}{c}} \quad (633)$$

### 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:

$$|\psi(0)\rangle = \psi_1 |1, 0\rangle + \psi_2 |0, 1\rangle \quad (634)$$

Затем ящик адиабатически медленно поворачивается в плоскости на угол  $2\pi$  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:

$$\psi_{n,m} = \frac{2}{L} \sin\left(k_n \left(x + \frac{L}{2}\right)\right) \sin\left(k_m \left(\frac{L}{2} + y\right)\right) \quad (635)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{L}y\right), \quad |0, 1\rangle = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) \cos\left(\frac{\pi}{L}x\right) \quad (636)$$

Связь между неподвижной и повернутой координатами:

$$\begin{cases} x_\theta = x \cos \theta - y \sin \theta, \\ y_\theta = x \sin \theta + y \cos \theta. \end{cases} \quad (637)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{2\pi}{L} x_\theta\right) \cos\left(\frac{\pi}{L} y_\theta\right) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{2\pi}{L} (x \cos \theta - y \sin \theta)\right) \cos\left(\frac{\pi}{L} (x \sin \theta + y \cos \theta)\right)$$

$$|0, 1\rangle = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{2\pi}{L} y_\theta\right) \cos\left(\frac{\pi}{L} x_\theta\right) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{2\pi}{L} (x \sin \theta + y \cos \theta)\right) \cos\left(\frac{\pi}{L} (x \cos \theta - y \sin \theta)\right)$$

Уравнение для динамической фазы:

$$i\partial_\theta c_n(\theta) = -i \sum_m \exp\left(i \int \omega_{nm}(\tau) d\tau\right) \langle n(\theta) | \partial_\theta | m(\theta) \rangle c_m(\theta), \quad \omega_{nm} = E_n - E_m = 0 \quad (638)$$

$$\partial_\theta c_n(\theta) = - \sum_m \langle n(\theta) | \partial_\theta | m(\theta) \rangle c_m(\theta) \quad (639)$$

$$\partial_\theta c_1(\theta) = - \langle 1, 0 | \partial_\theta | 1, 0 \rangle c_1(\theta) - \langle 1, 0 | \partial_\theta | 0, 1 \rangle c_2(\theta) \quad (640)$$

$$\partial_\theta c_2(\theta) = - \langle 0, 1 | \partial_\theta | 1, 0 \rangle c_1(\theta) - \langle 0, 1 | \partial_\theta | 0, 1 \rangle c_2(\theta) \quad (641)$$

$$\langle 1, 0 | \partial_\theta | 1, 0 \rangle = \langle 0, 1 | \partial_\theta | 0, 1 \rangle = 0, \quad \langle 1, 0 | \partial_\theta | 0, 1 \rangle = - \langle 0, 1 | \partial_\theta | 1, 0 \rangle = \frac{256}{27\pi^2} \quad (642)$$

$$\begin{cases} \partial_\theta c_1(\theta) = -\frac{256}{27\pi^2} c_2(\theta), & c_1(0) = \psi_1 \\ \partial_\theta c_2(\theta) = \frac{256}{27\pi^2} c_1(\theta), & c_2(0) = \psi_2 \end{cases} \quad (643)$$

$$\begin{cases} c_1(\theta) = \psi_1 \cos\left(\frac{256\theta}{27\pi^2}\right) - \psi_2 \sin\left(\frac{256\theta}{27\pi^2}\right) \\ c_2(\theta) = \psi_1 \sin\left(\frac{256\theta}{27\pi^2}\right) + \psi_2 \cos\left(\frac{256\theta}{27\pi^2}\right) \end{cases} \quad (644)$$

$$|\psi(T)\rangle = c_1(2\pi) |1, 0\rangle + c_2(2\pi) |0, 1\rangle \quad (645)$$

$$|\psi(T)\rangle = \left( \psi_1 \cos\left(\frac{512\theta}{27\pi}\right) - \psi_2 \sin\left(\frac{512\theta}{27\pi}\right) \right) |1, 0\rangle + \left( \psi_1 \sin\left(\frac{512\theta}{27\pi}\right) + \psi_2 \cos\left(\frac{512\theta}{27\pi}\right) \right) |0, 1\rangle$$

## 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:

$$\hat{H}(r, \varphi) = \hat{H}_s(\varphi) + \hat{H}_f(r, \varphi) \quad (646)$$

$$\hat{H}_s(\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2mR_2^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2, \quad \hat{H}_f(r, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 \quad (647)$$

Зафиксируем положение медленной подсистемы и решим задачу для быстрой. В первом приближении пренебрегаем производной по  $\varphi$ :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 \psi(r, \varphi) = \varepsilon^{(f)}(\varphi) \psi(r, \varphi) \quad (648)$$

Обозначим  $k(\varphi) = \frac{2m\varepsilon^{(f)}(\varphi)}{\hbar^2}$ . Тогда решение с учетом граничного условия при  $r = R_2$ :

$$\psi(r, \varphi) = A(\varphi) \sin(k(\varphi)(r - R_2)) \quad (649)$$

Пусть  $h(\varphi)$  – длина отрезка луча в полости между цилиндрами, идущего под углом  $\varphi$  ( $\varphi$  отсчитываем от плоскости симметрии системы), а  $\Delta = R_1 - R_2$ . Используя  $|R_1 - R_2| \ll R_{1,2}$  и теорему косинусов, получим:

$$h(\varphi) = (R_1 - R_2)(1 + \cos \varphi) \quad (650)$$

Граничное условия на внешнем цилиндре:

$$\psi(R_2 + h(\varphi), \varphi) = 0 \rightarrow k_N(\varphi) = \frac{\pi N}{(1 + \cos \varphi)\Delta} \quad (651)$$

Соответствующие нормированные волновые функции:

$$\psi_N^{(f)} = \sqrt{\frac{2}{\Delta(1 + \cos \varphi)}} \sin \left( \frac{\pi N(r - R_2)}{(1 + \cos \varphi)\Delta} \right) \quad (652)$$

Уровни энергии быстрой подсистемы:

$$\varepsilon_N(\varphi) = \frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{2m\Delta^2(1 + \cos \varphi)^2} \quad (653)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mR_2^2} \frac{d^2 \psi_N(\varphi)}{d\varphi^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{2m\Delta^2(1 + \cos \varphi)^2} \psi_N(\varphi) = E_N^{(s)} \psi_N(\varphi) \quad (654)$$

Сведём задачу к гармоническому осциллятору. Разложим по малому углу  $\varphi$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2mR_2^2} \frac{d^2 \psi_N(\varphi)}{d\varphi^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{2m\Delta^2(1 + \cos \varphi)^2} \psi_N(\varphi) = E_N^{(s)} \psi_N(\varphi) \quad (655)$$

Уровни энергии:

$$E_{N,n} = \frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{8m(R_1 - R_2)^2} + \frac{\hbar^2 \pi N}{2\sqrt{2}mR_1(R_1 - R_2)} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (656)$$

### 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 низлежащие уровни энергии такой системы.

**Решение.**

Гамильтониан системы:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 - \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 - \frac{1}{2M} \left( \frac{\partial}{\partial X} \right)^2 + U(x_1, x_2, X) \quad (657)$$

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:

$$\hat{H}_f = -\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^2 - \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^2 + U_1(x_1, X) + U_2(x_2, X), \quad \hat{H}_s = -\frac{1}{2M} \left( \frac{\partial}{\partial X} \right)^2 \quad (658)$$

Волновые функции шариков  $m$ , соответствующие  $\hat{H}_f$ :

$$\psi_{1,N_1}(x_1, X) = \sqrt{\frac{2}{X}} \sin \left( \frac{\pi N_1}{X} x_1 \right), \quad \psi_{2,N_2}(x_2, X) = \sqrt{\frac{2}{L-X}} \sin \left( \frac{\pi N_2}{L-X} (L-x_2) \right) \quad (659)$$

$$\psi_{N_1,N_2}(x_1, x_2, y) = \frac{2}{\sqrt{y(L-y)}} \sin \left( \frac{\pi N_1}{y} x_1 \right) \cdot \sin \left( \frac{\pi N_2}{L-y} (L-x_2) \right) \quad (660)$$

Энергия – сумма энергий каждого движения:

$$\varepsilon_{N_1,N_2}^{(f)} = \frac{\pi^2}{2m} \left( \frac{N_1^2}{X^2} + \frac{N_2^2}{(L-X)^2} \right) \quad (661)$$

Эффективная потенциальная энергия для медленной подсистемы:

$$\hat{H}_s^{(\text{eff})}(X) = \frac{\hat{p}_X^2}{2M} + \frac{\pi^2}{2m} \left( \frac{N_1^2}{X^2} + \frac{N_2^2}{(L-X)^2} \right) \quad (662)$$

Минимум энергии находится в точке:  $X_0 = \frac{L}{1+(N_2/N_1)^{2/3}}$ .

$$U_{\text{eff}}''(X_0) = \frac{3\pi^2}{mL^4} \left( N_1^2 \left( 1 + \left( \frac{N_2}{N_1} \right)^{2/3} \right)^4 + N_2^2 \left( 1 + \left( \frac{N_1}{N_2} \right)^{2/3} \right)^4 \right) \quad (663)$$

$$E_{N_1,N_2,n} = \frac{\pi^2}{2mL^2} \left( N_1^2 \left( 1 + \left( \frac{N_2}{N_1} \right)^{2/3} \right)^2 + N_2^2 \left( 1 + \left( \frac{N_1}{N_2} \right)^{2/3} \right)^2 \right) + \sqrt{\frac{3\pi^2}{MmL^4} \left( N_1^2 \left( 1 + \left( \frac{N_2}{N_1} \right)^{2/3} \right)^4 + N_2^2 \left( 1 + \left( \frac{N_1}{N_2} \right)^{2/3} \right)^4 \right)} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (664)$$

**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:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2mR^2} \partial_\varphi^2 - \mu_B B (\cos \varphi \hat{\sigma}_x + \sin \varphi \hat{\sigma}_y) \quad (665)$$

Определите уровни энергии такой системы в пределе  $\mu_B B \gg \frac{1}{mR^2}$ .

**Решение.**

Гамильтониан:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2mR^2} \left( \frac{d}{d\varphi} \right)^2 - \mu_0 B \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad (666)$$

Медленная подсистема – движение по углу, быстрая – спин. Адиабатика:

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_f, \quad \hat{H}_s = -\frac{1}{2mR^2} \left( \frac{d}{d\varphi} \right)^2, \quad \hat{H}_f = -\mu_0 B \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad (667)$$

Зафиксируем положение медленной подсистемы и решим стационарное уравнение Шрёдингера для быстрой:

$$\hat{H}_f |\psi^{(f)}\rangle = \varepsilon^{(f)} |\psi^{(f)}\rangle \quad (668)$$

Собственные числа и векторы  $\hat{H}_f$ :

$$\varepsilon_-^{(f)} = -\mu_0 B_0, \quad \varepsilon_+^{(f)} = +\mu_0 B_0 \quad (669)$$

$$|\psi_-^{(f)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_+^{(f)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (670)$$

Разложим состояние по базису  $\{|\psi_-^{(f)}\rangle, |\psi_+^{(f)}\rangle\}$ :

$$|\psi(\varphi)\rangle = f_+(\varphi) |\psi_+^{(f)}\rangle + f_-(\varphi) |\psi_-^{(f)}\rangle \quad (671)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 |\psi(\varphi)\rangle}{d\varphi^2} = & f_+''(\varphi) |\psi_+^{(f)}(\varphi)\rangle + 2f_+'(\varphi) |\psi_+^{(f)}(\varphi)\rangle' + f_+(\varphi) |\psi_+^{(f)}(\varphi)\rangle'' + \\ & + f_-''(\varphi) |\psi_-^{(f)}(\varphi)\rangle + 2f_-'(\varphi) |\psi_-^{(f)}(\varphi)\rangle' + f_-(\varphi) |\psi_-^{(f)}(\varphi)\rangle'' \end{aligned} \quad (672)$$

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:

$$f_{\pm}(\varphi) = \alpha_{\pm} e^{i\omega_{\pm}\varphi} \quad (673)$$

Граничные условия:

$$\begin{cases} |\psi(0)\rangle = |\psi(2\pi)\rangle \\ |\psi(0)\rangle' = |\psi(2\pi)\rangle' \end{cases} \quad (674)$$

$$\begin{cases} f_{\pm}(0) = f_{\pm}(2\pi) \\ f_{\pm}'(0) = f_{\pm}'(2\pi) \end{cases} \rightarrow \omega_{\pm} = n_{\pm} \in \mathbb{Z} \quad (675)$$

$$\begin{cases} \alpha_+ \left( n_+^2 - n_+ - \frac{1}{2} + 2mR^2\mu_0 B + 2mR^2 E \right) + \alpha_- \left( n_- - \frac{1}{2} \right) = 0 \\ \alpha_- \left( n_-^2 + n_- - \frac{1}{2} - 2mR^2\mu_0 B + 2mR^2 E \right) - \alpha_+ \left( n_+ + \frac{1}{2} \right) = 0 \end{cases} \quad (676)$$

$$\left( (n+2)^2 - n - \frac{5}{2} + 2mR^2\mu_0 B + 2mR^2 E \right) \left( n^2 + n - \frac{1}{2} - 2mR^2\mu_0 B + 2mR^2 E \right) = - \left( n - \frac{1}{2} \right) \left( n + \frac{5}{2} \right) \quad (677)$$

Приближение:  $2mR^2\mu_0 B \gg 1$ ,  $n \ll \sqrt{2mR^2\mu_0 B}$ :

$$E_n = \pm \mu_0 B \mp \frac{\left(n - \frac{1}{2}\right) \left(n + \frac{5}{2}\right)}{4m^2 R^4 \mu_0 B} \quad (678)$$

## 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:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \cos \left( \int_b^x p(y) dy - \frac{\pi}{4} \right) \quad (679)$$

где  $b$  – правая точка остановки. Из непрерывности волновой функции:

$$\psi(0) = 0 \quad (680)$$

Получаем условие квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\int_a^b p(y) dy + \frac{\pi}{4} = \pi n - \frac{\pi}{2}, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - Fx)} \quad (681)$$

$$E_n = \left( \frac{3\pi F}{2\sqrt{2m}} \left( n - \frac{3}{4} \right) \right)^{2/3} \quad (682)$$

- Кулоновский потенциал.  
Поскольку рассматриваются сферически-симметричные состояния, то  $l = m = 0$ .

В упражнении 5.2. мы нашли решение для кулоновского потенциала для  $E = 0$ :

$$\psi(r, \theta, \phi) = J_{2l+1} \left( 2\sqrt{\frac{2M\alpha}{\hbar^2}} r \right) \left( \sqrt{\frac{2M\alpha}{\hbar^2}} r \right)^{-1} \mathcal{Y}_{l,m}(\theta, \phi) \quad (683)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) - \frac{e^2}{r} u(r) = E u(r), \quad \psi_{l,m}(r, \theta, \varphi) = R_E(r) \mathcal{Y}_{l,m}(\theta, \varphi), \quad R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (684)$$

Применим квазиклассическое приближение к этому уравнению. Волновая функция ограничена, а значит  $u(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow 0$ . Т.е. все решения при малых  $r$  эквивалентны ассимптотически решению на нулевой энергии, поскольку совпадают стационарные уравнения Шрёдингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) - \frac{e^2}{r} u(r) = 0 \quad (685)$$

Поскольку в правой точке нужно использовать стандартное граничное условие, то

$$u(r) = \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \cos \left( \int_b^r p(r) dr - \frac{\pi}{4} \right), \quad p(r) = \sqrt{2m \left( E + \frac{e^2}{r} \right)} \quad (686)$$

где  $b$  - правая точка остановки. Сшиваем решение для нулевой энергии с квазиклассическим решением, где они оба применимы. Ассимптотика функции Бесселя:

$$J_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos \left( z - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{2} \right), \quad z \rightarrow \infty \quad (687)$$

$$u(r) \sim r^{1/4} \cos \left( 2\sqrt{\frac{2M\alpha}{\hbar^2}} r - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2} \right) \quad (688)$$

$$u(r) = \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \cos \left( \int_0^r p(r) dr + \phi \right) \quad (689)$$

$$\int_0^r p(r) dr = \sqrt{2m} \int_0^r \sqrt{E + \frac{e^2}{r}} dr \approx 2\sqrt{2me^2} \sqrt{r} \quad (690)$$

$$\phi = -\frac{3\pi}{4} \quad (691)$$

Условие квантовая:

$$\int_0^b p(r) dr = \pi \hbar n \quad (692)$$

$$\int_0^b p(r) dr = \sqrt{2me^2} \int_0^b \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{b}} dr = \sqrt{2me^2} \int_0^\infty \frac{dq}{(b+q^2)^2} \cdot (-2b^2) = -\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2me^2}{b}} \quad (693)$$

$$\sqrt{2me^2 b_n} \frac{\pi}{2} = \pi \hbar n \quad (694)$$

$$\boxed{E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}} \quad (695)$$



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:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}u''(r) + U'(r)u(r) = Eu(r), \quad u(r) = rR_E(r), \quad U'(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{2Mr^2} \quad (696)$$

Одномерное правило квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\int_{r_{\min}^l}^{r_{\max}^l} \sqrt{2M(E_{n,l,m} - U'(r))} dr = \pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (697)$$

Обозначим через  $N_{E,l}$  – максимальное  $n$ , для которого  $E_{n,l,m} \leq E$ .

$$\int_{r_{\min}^l}^{r_{\max}^l} \sqrt{2M(E - U'(r))} dr = \pi\hbar \left( N_{E,l} + \frac{1}{2} \right) \quad (698)$$

$$N(E) = \sum_m \sum_{l=0}^{l_{\max}} N_{E,l} = \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) N_{E,l} \quad (699)$$

Заменим сумму по  $l$  на интеграл:

$$N(E) = \int_0^{l_{\max}} dl (2l+1) \frac{\sqrt{2M}}{\pi\hbar} \int_{r_{\min}^l}^{r_{\max}^l} \sqrt{E - U(r) - \frac{l(l+1)}{2Mr^2}} dr \quad (700)$$

Переставим пределы и проинтегрируем по  $r$ :

$$N(E) = -\frac{\sqrt{2M}}{\pi\hbar} \frac{4M}{3} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} dr r^2 \left( E - U(r) - \frac{l(l+1)}{2Mr^2} \right)^{3/2} \Big|_{l=0}^{l=l_{\max}} \quad (701)$$

Верхним пределом можно пренебречь:

$$N(E) = \frac{2(2M)^{3/2}}{3\pi\hbar} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r^2 (E - U(r))^{3/2} dr \quad (702)$$

б) Интеграл по трёхмерному фазовому объёму:

$$N(E) = \int d^3r \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \theta(E - E_p) = \int d^3r \int_0^{p_{\max}} \frac{dp 4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3}, \quad p = \sqrt{2m(E - U(\vec{r}))} \quad (703)$$

$$N(E) = \frac{2(2M)^{3/2}}{3\pi\hbar} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r^2 (E - U(r))^{3/2} dr \quad (704)$$