# Задание по квантовой механике

**Авторы заметок**: Хоружий Кирилл
Примак Евгений
Гурьева Соня

**От**: *17 октября 2021 г.*

То, что остаётся после всех этих абстракций, не следует ли... считать тем реальным и неизменным содержанием, которое навязывается существам всех видов с одинаковой необходимостью, потому что оно не зависит ни от индивида, ни от момента времени, ни от точки зрения?

*В. И. Ленин*

Также выражаем благодарность Мещерякову Павлу за консультации по отдельным задачам.

# Содержание

# 1 Первое задание

## Упражнения

### У1

В общем и целом нужно найти $A^\dagger$ и $A^{-1}$ для заданного $A$.

**а) Оператор инверсии**. И так, что же такое оператор инверсии, а это $I\psi(x) = \psi(-x)$. Обратный оператор должен по определению

$$I^{-1}I\psi(x) = \psi(x) \qquad \overset{x\mapsto -x}{\Longrightarrow} \qquad I^{-1}\psi(x) = \psi(-x) \qquad \Rightarrow \qquad I^{-1} = I.$$

По определению сопряженного оператора $(\langle\Phi|I\Psi\rangle)^\dagger = \langle\Psi|I^\dagger\Phi\rangle$[1]. Напомним $[I\Psi](x) = \Psi(-x)$, что означает уже для состояний $\langle x|I\Psi\rangle = \langle -x|\Psi\rangle$, с этим знанием

$$\langle\Phi|I\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|x\rangle\langle x|I\Psi\rangle dx = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|x\rangle\langle -x|\Psi\rangle dx = \big/ x\mapsto -x \big/ = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|-x\rangle\langle x|\Psi\rangle dx = \langle I\Phi|\Psi\rangle = \langle\Phi|I^\dagger\Psi\rangle \qquad \Rightarrow \qquad I^* = I.$$

То есть получили, что оператор инверсии унитарен $II^\dagger = \mathbb{E}$ (единичный оператор).

**б) Оператор трансляции**. Оператор трансляции работает $\hat{T}_a\,|x\rangle = |x+a\rangle$ или так $\langle x|T_a\Psi\rangle = \Psi(x+a)$.

Вполне тривиально, что обратный к оператору трансляции это просто $T_{-a}$. Сопряженный же пойдём искать по той же схеме

$$\langle\Phi|T_a\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|x\rangle\langle x+a|\Psi\rangle dx = \big/ x\mapsto x-a \big/ = \int_{\mathbb{R}} \langle\Phi|x-a\rangle\langle x|\Psi\rangle dx = \langle T_a^*\Phi|\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle T_a^*\Phi|x\rangle\langle x|\Psi\rangle dx.$$

Где предпоследние равенство взято просто по определению сопряженного оператора, а последнее неравенство просто по представлению средней величины, тогда видим, что получается следующее

$$\langle x|T_a^\dagger\Phi\rangle = \Phi(x-a) \qquad \Rightarrow \qquad T_a^\dagger = T_{-a} = T_a^{-1}.$$

Мы вновь получили, что $T_a^\dagger T_a = \mathbb{E}$ – унитарный оператор.

### У2

Теперь будем искать собственные значения и собственные числа для операторов, изученных в предыдущей задаче.

Очень удобно совпала, что и оператор трансляции и оператор инверсии являются унитарными. А для унитарного оператора $\hat{A}$ и его собственного состояния $\hat{A}\,|\lambda\rangle = \lambda\,|\lambda\rangle$ легко показать, что

$$\langle A\lambda|A\lambda\rangle = \langle\lambda|A^\dagger A\lambda\rangle = \langle\lambda|\lambda\rangle,$$

но в то же время, учитывая предыдущую выкладку

$$\langle A\lambda|A\lambda\rangle = \lambda\lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \langle\lambda|\lambda\rangle = 1 = \lambda\lambda^*.$$

Тогда имеем $\lambda = e^{i\varphi}$, что приводит к самому виду оператора $\hat{A} = e^{i\hat{\varphi}}$.

*а) Оператор инверсии. И так, когда мы поняли, что $\hat{I} = e^{i\hat{\varphi}}$, то уже всё просто

$$I\psi(x) = \psi(-x) = \lambda\psi(x).$$

Угадаем собственные функции, которые удовлетворяют соотношению выше

$$\begin{cases} \psi(x) = \psi(-x) \\ \lambda = 1 \end{cases} \qquad\qquad \begin{cases} -\psi(x) = \psi(-x) \\ \lambda = -1 \end{cases}$$

*б) Оператор трансляции. И так, оператор трансляции у нас тоже в виде $\hat{T}_a = e^{i\hat{\varphi}}$, и оператор фазы записывают в виде $\hat{\varphi} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}$, где $\hat{\boldsymbol{k}}$ – оператор квазиимпульса.

Собственные же волновые функции для $\hat{T}_a$ выразим в координатном представлении

$$\hat{T}_a\,|\Psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}\,|\Psi\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \langle\boldsymbol{r}|T_a|\Psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}\,|\Psi\rangle\,.$$

Они удовлетворяют уравнению

$$\Psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}) = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}\Psi(r) \qquad \Rightarrow \qquad \Psi(r) = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{k}}\Phi(r), \quad \Phi(r+a) = \Phi(r).$$

В конце мы представили эти функции в таком периодическом виде, они называются функциями Блоха, и позже мы ещё встретим их в действии.

Собственные значения значит выражаются в виде $\lambda = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}$.

[1] тут можно стать свидетелем замены строчной пси на заглавную

### У3

Посмотрим на дейтсвие на волновую функцию оператора, вида $e^{i\hat{I}\varphi}$:

$$e^{i\hat{I}\varphi}\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(i\hat{I}\varphi\right)^k\psi(x) = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)!}\varphi^{2k+1}i^{2k}\psi(-x) + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k)!}\varphi^{2k}i^{2k}\psi(x) = i\sin(\varphi)\psi(-x) + \cos(\varphi)\psi(x).$$

Откуда, в операторном смысле, можем записать равенство

$$e^{i\hat{I}\varphi} = i\sin(\varphi)\hat{I} + \cos(\varphi)\mathbb{1}$$

### У4

Покажем, что $\hat{A}\hat{A}^\dagger$ – эрмитов оператор:

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\Phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\Psi|\hat{A}^\dagger|\Phi\rangle = \langle\Phi|\hat{A}|\hat{A}^\dagger\Psi\rangle^\dagger = \langle\Phi|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle^\dagger = \langle\Psi|(\hat{A}\hat{A}^\dagger)^\dagger|\Phi\rangle.$$

Теперь покажем, что оператор оказывается положительно определен. Предположем противное, в частности, что существует отризательное собственное значние:

$$\langle\Psi|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle = -\lambda, \quad \Rightarrow \quad \langle\hat{A}^\dagger\Psi|\hat{A}^\dagger\Psi\rangle = -\lambda,$$

что противоречит идеям скалярного произведения.

### У5

Покажем равенство коммутаторов:

$$[A,\, BC] = [A,B]C + A[B,C].$$

Возможно, здесь была опечатка, так как

$$[A,\, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A,\, B]C + B[A,\, C].$$

### У6

В этом упражнении казалось бы раскладываем экспоненты в ряд и радуемся жизни. При чем ну ладно даже до третьего члена, всё перемножаем, находим коммутаторы и радуемся жизни. Ведь никогда дальше второго члена всё равно раскладывать не будем[2]

$$e^{\xi A}Be^{-i\xi} = \left(1 + \xi A + \frac{\xi^2A^2}{2} + \frac{\xi^3A^3}{6} + \ldots\right)\cdot B\cdot\left(1 - \xi A + \frac{\xi^2A^2}{2} - \frac{\xi^3A^3}{6} + \ldots\right) =$$

$$= B + \underbrace{\xi AB - \xi BA}_{\xi[A,B]} + \underbrace{\frac{\xi^2}{2}A^2B + \frac{\xi^2}{2}BA^2 - \xi^2ABA}_{\frac{\xi^2}{2}(A[A,B]-[A,B]A)=\frac{\xi^2}{2}[A,[A,B]]} + \ldots = B + \xi[A,B] + \frac{\xi^2}{2!}[A,[A,B]] + \ldots$$

Что и хотелось показать.

Теперь докажем это формальнее, если вдруг очень надо.

Во первых сразу сформулируем общую формулу, которую будем доказывать

$$e^ABe^{-A} = B + \sum_n \underbrace{[A,[A,\ldots[A,B]\ldots]]}_{n}.$$

Начнем с вычисления производных от $F(\lambda) = e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}$

$$\frac{d^n}{d\lambda^n}F(\lambda)\bigg|_{\lambda=0} = \sum_{k=0}^{n}C_n^kA^ke^{\lambda A}Be^{-\lambda A}A^{n-k}(-1)^{n-k}\bigg|_{\lambda=0} = \sum_{k=0}^{n}C_n^kA^kBA^{n-k}(-1)^{n-k},$$

Получив удобное представление разложим требуемое соотношение в ряд Тейлора

$$e^ABe^{-A} = F(1) = \sum_n\frac{1}{n!}\sum_{k=0}^{n}C_n^kA^kBA^{n-k}(-1)^{n-k}.$$

Проверим, что мы всё ещё получаем что-то разумное сравнив с тем, что мы в лоб раскрывали выше, например

[2] При чем не только в рамках этого курса, но и весьма вероятно по жизни в принципе.

при $n=0$

$$\sum_{k=0}^{0} A^k B A^{0-k}(-1)^{n-k} = B.$$

Действительно. Теперь осталось доказать, следующее утверждение с коммутатором

$$\sum_{k=0}^{n} C_n^k A^k B A^{n-k}(-1)^{n-k} = \underbrace{[A,[A,\ldots[A,B]\ldots]]}_{n}.$$

Сделаем это по индукции, так для $n=1$

$$\sum_{k=0}^{1} C_1^k A^k B A^{1-k}(-1)^{1-k} = -BA + AB = [A,B].$$

Тогда пусть для $n=m \geqslant 1$ тоже выполнено, что

$$\sum_{k=0}^{m} C_m^k A^k B A^{m-k}(-1)^{m-k} = \underbrace{[A,[A,\ldots[A,B]\ldots]]}_{m},$$

тогда при следующем $n=m+1$

$$\sum_{k=0}^{m+1} C_{m+1}^k A^k B A^{m+1-k}(-1)^{m+1-k} =^{3} \sum_{k=0}^{m} C_m^k A^k B A^{m+1-k}(-1)^{m+1-k} + \sum_{k=0}^{m+1} C_n^{k-1} A^k B A^{m-(k-1)}(-1)^{m-(k-1)} =$$

$$= -\left(\sum_{k=0}^{m} C_m^k A^k B A^{m-k}(-1)^{m+1-k}\right) A + A\left(\sum_{k=1}^{m+1} C_m^{k-1} A^k B A^{m-(k-1)}(-1)^{m-(k-1)}\right) =$$

$$[A,\ \underbrace{[A,[A,\ldots[A,B]\ldots]]}_{m}] = \underbrace{[A,[A,\ldots[A,B]\ldots]]}_{m+1}.$$

Что и требовалось теперь уже доказать.

**У7**

Давайте посчитаем коммутаторы, в координатном представлении: $\hat{x}=x$ и $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$, тогда $\hat{p}_x^2 = -\hbar^2\partial_x^2$.

**0)** Начнём с нулевого примера, чтобы убедиться, что правильно смотрим на мир:

$$[\hat{x},\,\hat{p}]\psi(x) = x(-i\hbar)\partial_x\psi - (-i\hbar)\partial_x(x\psi) = i\hbar\psi + i\hbar x\partial_x\psi - i\hbar x\partial_x\psi = i\hbar\psi,$$

$$\Rightarrow\quad [\hat{x},\,\hat{p}] = i\hbar.$$

**а)** Аналогично, в смысле операторного равенства,

$$[\hat{x},\,\hat{p}^2]\psi(x) = x(-i\hbar)^2\partial_x^2\psi - (-i\hbar)^2\partial_x^2(x\psi) = -\hbar^2 x\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x(\psi + x\partial_x\psi) =$$

$$= -\hbar^2 x\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x\psi + \hbar^2\partial_x\psi + \hbar^2 x\partial_x^2\psi = 2i\hbar\hat{p}\psi,$$

$$\Rightarrow [\hat{x},\,\hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}.$$

**б)** Теперь найдём коммутатор с некоторой функцией $U(x)$:

$$[U(\hat{x}),\,\hat{p}]\psi(x) = U(x)(-i\hbar\partial_x\psi) + i\hbar\partial_x(U\psi) = U(-i\hbar\partial_x\psi) + i\hbar(\psi\partial_x U + U\partial_x\psi) = i\hbar(\partial_x U)\psi,$$

$$\Rightarrow [U(\hat{x}),\,\hat{p}] = 2i\hbar\hat{p}.$$

**в)** Наконец,

$$[U(\hat{x}),\,\hat{p}^2]\psi(x) = U(-\hbar^2)\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x^2 U\psi = U(-\hbar^2)\psi'' + \hbar^2(\psi U'' + 2U'\psi' + \psi'' U) =$$

$$= \hbar^2(\psi U'' + 2U'\psi') = (\hbar^2 U'' + \hbar 2iU'\hat{p})\psi,$$

$$\Rightarrow [U(\hat{x}),\,\hat{p}^2] = \hbar^2 U'' + 2i\hbar U'\hat{p}.$$

**У8**

Докажем соотношение Фейнмана-Гелмана:

$$\partial_\lambda f_n(\lambda) = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}(\lambda)|n\rangle,$$

где $f_n$ – собственное значение $\hat{f}\,|n\rangle = f_n\,|n\rangle$, то есть $f_n = \langle n|\hat{f}|n\rangle$.

[3] Тут использовали $C_{m+1}^k = C_m^k + C_m^{k-1}$, оговорив, что при $k=m+1$ положим $C_m^{m+1}=0$ и при $k=0$ положим $C_m^{-1}=0$.

По формуле Лейбница:

$$\partial_\lambda f_n = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}|n\rangle + \langle \partial_\lambda n|\hat{f}|n\rangle + \langle n|\hat{f}|\partial_\lambda n\rangle = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}|n\rangle + \langle \partial_\lambda n|n\rangle f_n + \langle n|\partial_\lambda n\rangle f_n =$$
$$= \langle n|\partial_\lambda \hat{f}|n\rangle + f_n \partial_\lambda \langle n|n\rangle = \langle n|\partial_\lambda \hat{f}|n\rangle,$$

что и требовалось доказать.

### У9

Вспомним, что оператор трансляции нам в принципе задавался как

$$\hat{T}_a = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}.$$

Мы в таком случае в этом упражнении имеем просто оператор трансляции слева и обратной трансляции справа

$$e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}} U(\boldsymbol{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}} \quad \xRightarrow{\cdot\Psi(\boldsymbol{r})} \quad \hat{T}_\alpha U(\boldsymbol{r}) \hat{T}_{-a}\Psi(\boldsymbol{r}) = \hat{T}_\alpha[U(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a})] = U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a})\Psi(r).$$

Получили такую же домноженну на просто пси штуку, а значит есть соответсвие

$$\hat{T}_\alpha U(\boldsymbol{r}) \hat{T}_{-a} = U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}).$$

### У10

Для операторов рождения и уничтожения ($[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger] \ominus 1$) найдём коммутатор вида

$$[\hat{a},\, f(\hat{a}^\dagger)] = \hat{a} f(\hat{a}^\dagger) - f(\hat{a}^\dagger)\hat{a}.$$

Глубоко. Допустим аналитичность $f$, и воспользуемся разложением по Тейлору $f(\hat{a}^\dagger) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (\hat{a}^\dagger)^n$:

$$[\hat{a},\, f(\hat{a}^\dagger)] = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left(\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^n - (\hat{a}^\dagger)^n \hat{a}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left((1+\hat{a}^\dagger\hat{a})(\hat{a}^\dagger)^{n-1} - (\hat{a}^\dagger)^n \hat{a}\right) =$$
$$\ominus \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left((\hat{a}^\dagger)^{n-1}\hat{a}^\dagger(1+\hat{a}^\dagger\hat{a})(\hat{a}^\dagger)^{n-2} - (\hat{a}^\dagger)^n\hat{a}\right) =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left(2(\hat{a}^\dagger)^{n-1} + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^{n-2} - (\hat{a}^\dagger)^n\hat{a}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \cdot (\hat{a}^\dagger)^{n-1} = f'(\hat{a}^\dagger),$$

что достаточно забавно.

### У11

Выразим оператор координаты и импульса через операторы рождения и уничтожения:

$$\begin{cases} \hat{q} = \frac{q_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \\ \hat{p} = \frac{ip_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{cases} \qquad q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \qquad p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}.$$

Для операторов $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ верно, что

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\, m \qquad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,.$$

Для начала квадрат координаты:

$$\hat{q}^2 = \frac{q_0^2}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right) = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{m\omega^2}.$$

Стоит заметить, что все «несбалансированные» $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$ не дадут вклада, так как $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$. Поэтому нечетные степени $\langle q^{2k+1}\rangle = \langle p^{2k+1}\rangle = 0$, так как все оператору будут «несбалансированы».

Четвертая степень координаты:

$$\langle q^4\rangle = \frac{q_0^4}{4}\left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right)^2 = \ldots = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \left(6n^2+6n+3\right).$$

Аналогично, находим квадрат импульса

$$\langle\hat{p}^2\rangle = \frac{p_0^2}{2}(2n+2) = p_0^2\left(n+\frac{1}{2}\right) = mE_n$$

И его четвертую степень:

$$\langle\hat{p}^4\rangle = \frac{p_0^2}{4}(6n^2+6n+3) = \frac{(m\omega\hbar)^2}{4}(6n^2+6n+3),$$

что объясняется ненулевым вкладом только слагаемых с $(-a^\dagger)^{4/2}$.

**Полиномы**. Если вдруг будет интересно $F_k(n) = \langle n|(\hat{a} \pm \hat{a}^\dagger)^k|n\rangle$, то ниже приведены посчитанные значения для первых нескольких $k$:

$$
\begin{aligned}
F_4(n) &= 6n^2 + 6n + 3;\\
F_6(n) &= 20n^3 + 30n^2 + 40n + 15;\\
F_8(n) &= 70n^4 + 140n^3 + 350n^2 + 280n + 105;
\end{aligned}
$$

Можно, конечно, продолжить..

$$
\begin{aligned}
F_{10}(n) &= 252n^5 + 630n^4 + 2520n^3 + 3150n^2 + 2898n + 945;\\
F_{12}(n) &= 924n^6 + 2772n^5 + 16170n^4 + 27720n^3 + 45276n^2 + 31878n + 10395;\\
F_{14}(n) &= 3432n^7 + 12012n^6 + 96096n^5 + 210210n^4 + 528528n^3 + 588588n^2 + 453024n + 135135,
\end{aligned}
$$

в общем, да.

**Соотношение неопределенностей**. Обсудим величину

$$\sqrt{\langle x^2\rangle\langle p^2\rangle} = q_0 p_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \geqslant \frac{\hbar}{2},$$

что полностью соответсвует принципу неопределенности Гейзенберга.

### У12

Найдём операторы рождения и уничтожения для гармонического осцилляора в представлении Гейзенберга. Запишем уравнение Гейзенберга

$$i\hbar\frac{d\hat{f}}{dt} = i\hbar\frac{\partial\hat{f}}{\partial t} + \left[\hat{f},\, \hat{H}\right].$$

Запищем гамильтониан системы

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right),$$

тогда можем найти

$$i\hbar\frac{d\hat{a}}{dt} = \hbar\omega\left[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger\hat{a}\right] = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\left[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger\right]\hat{a}\right) = \hbar\omega\hat{a},$$

и, решая диффур, находим

$$i\hbar\frac{d\hat{a}}{dt} = \hbar\omega\hat{a}, \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} \hat{a}(t) = e^{-i\omega t}\hat{a},\\ \hat{a}^\dagger(t) = e^{i\omega t}\hat{a}^\dagger. \end{cases}$$

Или, можно было напрямую, воспользоваться

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right), \qquad \Rightarrow \qquad \hat{a}(t) = \hat{a} + (i\omega t)[\hat{a}^\dagger\hat{a},\, \hat{a}] + (i\omega t)^2[\hat{a}^\dagger\hat{a},\, -\hat{a}] + \ldots = \exp(-i\omega t)\hat{a},$$

где мы воспользовались равенством, доказанным в У6.

## T1

**Собственные функции**. Рассмотрим частицу в очень глубокой потенциальной одномерной яме:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \notin [0, a]; \\ 0. & x \in [0, a]; \end{cases} \qquad H(x, -i\hbar\partial_x)\psi(x) = E\psi(x), \quad \Rightarrow \quad \psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0.$$

Тогда решение может быть найдено в виде

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \qquad k^2 = \tfrac{2m}{\hbar^2}E,$$

но в силу требования $\psi(x)|_{x\in\{0,a\}} = 0$, сразу получаем $B = 0$, и условие на $k$:

$$k = k_n = \frac{\pi n}{a}, \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2 n^2,$$

то есть спектр дискретный.

Из нормировки $\psi$ можем найти

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^a dx|\psi(x)|^2 = \frac{|A|^2}{2}a = 1, \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Тогда искомая волнавая функция стационарных состояний и соответсвующие уровни энергии

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\tfrac{\pi n}{a}x\right), \qquad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2 n^2.$$

**Средние значения**. Найдём среднее значение для координаты

$$\langle x\rangle = \int_0^a x|\psi_n(x)|^2\,dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^( k_n x)\,dx = \frac{2}{a}\left(\frac{a^2}{4} - \frac{1}{4k_n}\frac{1}{2k_n}\cos(2k_n x)\bigg|_0^a\right) = \frac{a}{2}.$$

Аналогично можем найти среднее значение импульса

$$\langle p\rangle = \int_0^a dx\psi^*\hat{p}\psi = -i\hbar k_n\frac{2}{a}\int_0^a \sin(k_n x)\cos(k_n x)\,dx = -\frac{i\hbar k_n}{a}\int_0^a \sin(2k_n x) = 0,$$

в силу интегрирования по периоду.

Теперь можем посчитать дисперсию величин

$$(\Delta x)^2 = \langle\psi|(\hat{x} - \bar{x})^2|\psi\rangle = \langle\psi|x^2|\psi\rangle - \bar{x}^2,$$

и аналогично с $\hat{p}$. Для координаты среднее квадрата

$$\langle x^2\rangle = \frac{2}{a}x^2\sin^2(k_n x)\,dx = \frac{a^2}{3} + \frac{1}{ak_n}\int_0^a \sin(2k_n x)x\,dx = \frac{a^2}{3} - \frac{1}{2ak_n^2}x\cos(2k_n x)\bigg|_0^a = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2},$$

а соответсвующая дисперсия

$$(\delta x)^2 = a^2\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right).$$

Теперь для импульса

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle = \int_0^a dx\psi^*\left(-\hbar^2\partial_x^2\right)\psi = \frac{2k_n^2\hbar^2}{2a}\int_0^a dx\left(1 = \cos(2k_n x)\right) = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{a^2}.$$

**Сравним с классикой**. Понятно, что частица равновероятно может находиться в любой части ящика (в классическом случае), тогда

$$\int_0^a P(x)\,dx = 1, \quad \Rightarrow \quad P(x) = \frac{1}{a}, \quad \Rightarrow \quad \langle x\rangle^{\text{кл}} = \int_0^a P(x)x\,dx = \frac{a}{2} = \langle x\rangle.$$

Теперь для импульса, $p \in \{-p_0, p_0\}$, где $P(p_0) = P(-p_0) = 1/2$, тогда

$$\langle p\rangle^{\text{кл}} = P(p_0)p_0 + P(-p_0)(-p_0) = 0 = \langle p\rangle.$$

Аналогично с квадратом координаты

$$\langle x^2\rangle^{\text{кл}} = \int_0^a \frac{1}{a}x^2\,dx = \frac{a^2}{3} = \lim_{n\to\infty}\langle x^2\rangle,$$

что прекрасно сходится с принципом соответствия.

## T2

**а) Неглубокая симметричная яма**. Задан потенциал, с учетом которого мы получаем оператор Гамильтона для нашей задачи:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0\ , & |x| \leqslant a \\ 0\ , & |x| \geqslant a \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad \hat{H} = \begin{cases} \frac{p^2}{2m} - U_0\ , & |x| \leqslant a \\ \frac{p^2}{2m}\ , & |x| \geqslant a \end{cases}$$

Тогда решаем уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ вне и снаружи ямы, помня что $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi + (\hat{U} - E) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 + E)\psi = 0 \\ \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \end{cases}$$

Посмотрим теперь на движение частицы в неглубокой потенциальной яме

$$U(x) = \{-U_0, |x| < a; \quad 0, |x| \geqslant a. \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x).$$

Так как речь идёт про связанные состояния, то будем считать $E < 0$, тогда, для удобства, переобозначим $E \to -E$. Запишем стационарное уравнение Шредингера, сразу раскрывая $U(r)$, выделяем две области:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & |x| < a; \\ \psi'' - \varkappa^2\psi = 0, & |x| > a; \end{cases} \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \qquad \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E,$$

В силу симметричности потенциала ($[\hat{I}, \hat{H}] = 0$), решения могут быть найдены, как собственные функции оператора инверсии, то есть в виде четных и нечетных функций. Тогда сразу можем выделить два решения:

$$\psi^+(x) = \begin{cases} A\cos(kx), & |x| < a; \\ Be^{-\varkappa|x|}, & |x| > a; \end{cases} \qquad \psi^-(x) = \begin{cases} A\sin(kx), & |x| < a; \\ B\,\mathrm{sign}(x)e^{-\varkappa|x|}, & |x| > a; \end{cases}$$

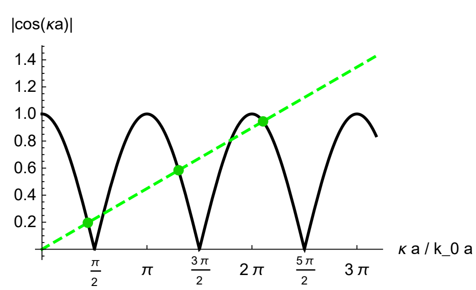
где сразу воспользовались $L_2$ интегрируемостью $\psi$ и выбросили решение вида $e^{\varkappa x}$.

Осталось воспользоваться гладкостью $\psi(x)$, удобнее будет проверить непрерывность логарифмической производной

$$(\ln\psi)' = \frac{\psi'}{\psi}, \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\psi'(a-\varepsilon)}{\psi(a-\varepsilon)} = \frac{\psi'(a+\varepsilon)}{\psi(a+\varepsilon)}, \qquad \Rightarrow \qquad \varkappa = k\tan(ka), \qquad \Leftrightarrow \qquad |\cos(ka)| = \frac{ka}{k_0 a},$$

где ввели $k_0^2 = \varkappa^2 + k^2$. Получили трансцендентное уравнение на уровни энергии, анализ которого удобнее всего произвести графически (рис. 1). Ясно, что спектр не просто дискретен, но и ограничен. Четное состояние существует при $k_0 a > 0$, $N$ четных существует при $k_0 a \geqslant (N-1)\pi$. Важно, что решения существуют только при $\operatorname{tg} ka > 0$.

Аналогично, через логарифмическую производную нахожим условие на уровни энергии нечетных решений.



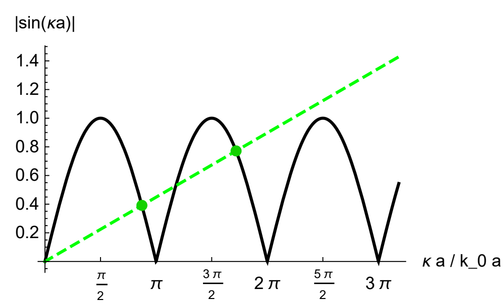




Рис. 1: Трансцендентное уравнение (для четного и нечетного решения) на уровни энергии к задаче T2

## T3

**а)** Задан потенциал $U(x) = -\frac{\hbar^2}{m}\varkappa_0\delta(x)$, который представляет собой дельта-яму. Прежде чем как всегда решать стационарное уравнение шредингера сделаем замечание, что $E < 0$, тогда получим

$$\hat{H}\psi = -|E|\psi, \qquad \varkappa^2 := \frac{2m|E|}{\hbar}.$$

С такой заменой получим вполне красивый диффур второго порядка:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - \frac{\hbar^2}{m}\varkappa_0\delta(x)\psi + |E|\psi = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \psi'' - (\varkappa - 2\varkappa_0\delta(x))\psi = 0.$$

Мы ожидаем непрерывности от волной функции на границах областей, а именно в точке дельта-ямы, то есть одним из граничных условий будет $\psi(-0) = \psi(+0)$.

Потребовав непрерывности $\psi$, из-за дельта функции, мы получаем разрыв для первой производной

$$\psi'' - (\varkappa - 2\varkappa_0\delta(x))\psi = 0 \qquad \overset{\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}}{\Longrightarrow} \qquad \psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\varkappa_0\psi(0).$$

Вне ямы будем наблюдать спад по экспоненте, сама же яма – по сути точечна, значит такое же поведение будем ожидать и в связном состоянии, таким образом ищем волновую функцию как

$$\psi = \begin{cases} C_1 e^{-\varkappa x} \ , x > 0 \\ C_2 e^{\varkappa x} \ , x < 0 \end{cases}$$

Из непрерывности получим автоматически, что

$$\psi(-0) = \psi(+0) \qquad \Rightarrow \qquad C_2 = C_1 = C.$$

Разрыв же первой производной позволит нам найти

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\varkappa_0\psi(0) \quad \Rightarrow \quad -2\varkappa_0 C = C(-\varkappa - \varkappa) \quad \Rightarrow \quad \varkappa = \varkappa_0.$$

Таким образом энергия связного состояния:

$$\boxed{E = -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m}}$$

Теперь, осталось проверить нормировку нашей волновой функции

$$\int_{\mathbb{R}} \psi\psi^* dx = 1 \quad \Rightarrow \quad C^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\varkappa_0|x|}dx = \frac{C^2}{\varkappa_0}\int_0^{+\infty} e^{-2\varkappa_0 x} d2\varkappa_0 x = \frac{C^2}{\varkappa_0} = 1 \quad \Rightarrow \quad \varkappa_0 = C^2.$$

Таким образом собирая всё вместе получаем волновую функцию вида:

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\varkappa_0}e^{-\varkappa_0|x|}}$$

Мы получили волновую функцию в координатном представлении для уровня энергии ноль $\psi(x) = \langle x|0\rangle$. Тогда в импульсном представлении

$$\psi(p) = \langle p|0\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\langle p|x\rangle\langle x|0\rangle = \Big/ \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Big/ = \frac{\sqrt{\varkappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}} e^{-\varkappa_0 x - \frac{i}{\hbar}px}dx = \frac{\sqrt{\varkappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot\frac{2\varkappa_0}{\varkappa_0^2 + (p/\hbar)^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{(\varkappa_0\hbar)^{3/2}}{(\varkappa_0\hbar)^2 + p^2}.$$

Дальше будет менее широко, честно, а ведь это ещё опущено наше любимое интегрирование по частям.

$$\boxed{\langle 0|\hat{p}|0\rangle = 0}, \qquad \boxed{\langle 0|\hat{x}|0\rangle = 0}.$$

По тому же определению теперь будем получать нечто сложнее чем ноль

$$\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle = \int_{\mathbb{R}} \varkappa e^{-2\varkappa_0|x|}\hat{x}^2 dx = \underbrace{2\varkappa_0}_{\alpha}\int_0^{+\infty} e^{-2\varkappa_0 x}x^2 dx = \alpha\frac{d^2}{d\alpha^2}\int_0^{+\infty} e^{-\alpha x}dx = \frac{2}{\alpha^2} = \boxed{\frac{1}{2\varkappa_0^2}}.$$

Красиво продифференцировали под знаком интеграла и получили ответ, осталось ещё немного, не зря же мы $\psi(p)$ считали, стоит, кстати, обратить внимание, что теперь именно по $\alpha^2$ дифференцируем:

$$\langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = \int_{\mathbb{R}} dp\ p^2\frac{2}{\pi}\frac{(\varkappa_0\hbar)^3}{((\hbar\varkappa_0)^2 + p^2)^2} = \frac{2}{\pi}(\varkappa_0\hbar)^3(-\frac{d}{d\alpha^2})\int_{\mathbb{R}}\frac{p^2}{\alpha^2 p^2}dp = \frac{2}{\pi}(\varkappa_0\hbar)^3(-\frac{d}{d\alpha^2})\frac{2\pi i(i\alpha)^2}{2i\alpha}\Big|_{\alpha=\varkappa_0\hbar} = \boxed{(\varkappa_0\hbar)^2}.$$

Из-за того, что средние от координаты и импульса нулевые – дисперсии совпадают с средними квадратами.

Для интереса теперь ещё посмотрим на соотношение неопределенности

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \frac{1}{2\varkappa_0^2}\varkappa_0^2\hbar^2 = \frac{\hbar^2}{2},$$

что больше абсолютного минимума для когерентного состояния осциллятора $= h^2/4$.

**б)** И казалось бы всё хорошо, всё изучили в связном состоянии, но теперь в той же задаче мы будем смотреть на области непрерывного спектра и решать задачу о рассеянии волны на потенциале.

Запишем тогда наиболее общую волновую функцию, в которой на нижней строчки стоят (условно) волны распространяющиеся левее ямы, а точнее подошедшая из $-\infty$ с амплитудой $C$, и ушедшая в $-\infty$ с амплитудой $D$. Аналогично правее потенциала будет ушедшая в $+\infty$ с амплитудой $A$ и пришедшая из $+\infty$ с амплитудой $B$.

$$\psi = \begin{cases} Ae^{i\varkappa x} + Be^{-i\varkappa x} \ , x > 0 \\ Ce^{i\varkappa x} + De^{-i\varkappa x} \ , x < 0 \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad \psi = \begin{cases} Ae^{i\varkappa x} \ , x > 0 \\ Ce^{i\varkappa x} + De^{-i\varkappa x} \ , x < 0 \end{cases}$$

Мы сразу выберем, что волна падала слева, значит $B = 0$, и пусть она это делала с $C = 1$, так как в вопросах рассеивания нас будут интересовать относительные величины.

Тем не менее у нас всё так же должно быть непрерывно для волновой функции и скачкообразно для её производной в нуле:

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ i\varkappa(A - B) - i\varkappa(C - D) &= -2\varkappa_0\psi(0) \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad i\varkappa[(C - D) - (A - B)] = 2\varkappa_0(A + B)$$

Теперь подставим наши допущения ($B = 0,\ C = 0$) и выразим каппу

$$\varkappa = 2i\varkappa_0 \frac{A + B}{(A - B) - (C - D)} = 2i\varkappa_0 \frac{A}{A - (1 - D)} = i\varkappa_0 \frac{A}{A - 1}.$$

Тут последнее равенство последовало из непрерывности в нуле: $A + 0 = 1 + D$. И чтобы научиться сравнивать амплитуды возьмём и выразим их все через $\varkappa$ и $\varkappa_0$, что мы уже можем сделать:

$$A = \frac{\varkappa}{\varkappa - i\varkappa_0}, \qquad D = \frac{i\varkappa_0}{\varkappa - i\varkappa_0}.$$

Теперь введем такое понятие как плотность потока вероятности, что, если грубо обобщать, является отголоском уравнения непрерывности из какой-нибудь механики сплошной среды или теории поля. И так по определению

$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi'\psi^* - \psi\psi'^*).$$

А так же коэффициенты прохождения и отражения соответственно

$$T_u = \left|\frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}}\right|, \qquad R_u = \left|\frac{j_{\text{back}}}{j_{\text{in}}}\right|.$$

Где подписи *in*, *out*, *back* соответствуют пришедшей, прошедшей, отразившейся волне, а в нашем случае коэффициентам потокам вероятности от волновой функции с коэффициентами $C,\ A,\ D$ соответственно.

$$\begin{aligned} j_{in} = j[e^{i\varkappa x}] \quad &= -\frac{i\hbar}{2m}(i\varkappa + i\varkappa) &&= \frac{\hbar\varkappa}{m} \\ j_{out} = j[Ae^{i\varkappa x}] \quad &= -\frac{i\hbar}{2m}|A|^2(i\varkappa + i\varkappa) &&= \frac{\hbar\varkappa}{m\left(\left(\frac{\varkappa}{\varkappa_0}\right)^2 + 1\right)} \\ j_{back} = j[De^{-i\varkappa x}] \quad &= -\frac{i\hbar}{2m}|D|^2(-i\varkappa - i\varkappa) &&= -\frac{\hbar\varkappa}{m\left(\left(\frac{\varkappa}{\varkappa_0}\right)^2 + 1\right)} \end{aligned}$$

И тогда

$$\boxed{T = \left|\frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}}\right| = \frac{\varkappa^2}{\varkappa^2 + \varkappa_0^2}} \qquad \boxed{R = \left|\frac{j_{\text{back}}}{j_{\text{in}}}\right| = \frac{\varkappa_0^2}{\varkappa^2 + \varkappa_0^2}}.$$

**в)** Честно, трудно понять, что автор задания имеет в виду под вероятностью "ионизации". Самое правдоподобное — вылет электрона из ямы при таком её резком изменении, что по аналогии с отрыванием электрона от атома её ионизует.

То есть при резком изменении параметра глубины ямы, у нас также резко изменится собственная волная функция, состояния наших электронов, тогда, вероятность того, что из ямы что-то вылетит это просто

$$W = 1 - |\langle\psi_1|\psi_0\rangle|^2 = 1 - \frac{4\varkappa_0\varkappa_1}{(\varkappa_0 + \varkappa_1)^2} = \left(\frac{\varkappa_0 - \varkappa_1}{\varkappa_0 + \varkappa_1}\right)^2.$$

## T4

### б) потенциальная яма

И так, зададим потенциальную яму и эволюцию нашей системы

$$U(x) = \begin{cases} -U_0\ , & |x| < a/2 \\ 0\ , & |x| > a/2 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} &\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (U_0 + E)\psi(x) = 0\ , \quad &&|x| < a/2 \\ &\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E\psi(x) = 0\ , &&|x| > a/2 \end{aligned}$$

Мы смотрим на энергию в несвязном состоянии, то есть $E > 0$, получаем волновую функцию

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 \cdot e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x} \;, & x < a/2 \\ Be^{ik_2x} + Ce^{-ik_2x} \;, & |x| < a/2 \\ De^{ik_1x} + 0 \cdot e^{-ik_1x} \;, & x > a/2 \end{cases} \qquad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad k_2^2 = \frac{2m(E+U_0)^2}{\hbar^2}.$$

Где аналогично Т3, мы выбираем волну падающую из $-\infty$ с единичной амплитудой, и соответсвенно из $+\infty$ к нам ничего не приходит.

Теперь на каждой границе нам нужно взять граничные условия

$$\begin{cases} \psi(\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi(\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi(-\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi(-\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi'(\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi'(\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi'(-\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi'(-\frac{a}{2} + \varepsilon) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} Be^{ik_2a/2} + Ce^{-ik_2a/2} = De^{ik_1a/2} \\ e^{-ik_1a/2} + Ae^{ik_1a/2} = Be^{ik_2a/2} + Ce^{ik_2a/2} \\ k_1e^{-ik_1a/2} - k_1Ae^{ik_1a/2} = k_2Be^{-ik_2a/2} - k_2Ce^{ik_2a/2} \\ k_1De^{ik_1a/2} = k_2Be^{ik_2a/2} - k_2Ce^{-iak_2a/2} \end{cases}$$

В этот раз мы покажаем какие-то алгебраические выкладки, которые ведут к свету, но на самом деле *Wolfram Mathematica* нам в помощь. Удобно заменить экспоненты в степенях $k_1$ и $k_2$ на соответсвующие $\alpha_i$, тогда каким-нибудь Гауссом, система решиться. Здесь приведем просто, что досчитать это реально

$$\begin{cases} B\alpha_2 + \dfrac{C}{\alpha_2} = D\alpha_1 \\ \dfrac{1}{\alpha_1} + A\alpha_1 = \dfrac{B}{\alpha_2} + C\alpha_2 \\ \dfrac{k_1}{\alpha_1} - Ak_1\alpha_1 = \dfrac{k_2B}{\alpha_2} - k_2C\alpha_2 \\ D\alpha_1k_1 = B\alpha_2k_2 - \dfrac{Ck_2}{\alpha_2} \end{cases} \Rightarrow \qquad \ldots \text{(мы в вас верим)}$$

Куда полезней, сейчас понять, что если помучиться и решить данную систему, то мы по сути и найдём ответ на задачу, ведь

$$j_{\text{in}}[e^{ik_1x}] = -\frac{i\hbar}{2m}(ik_1 + ik_1) = \frac{\hbar k_1}{m}, \qquad j_{\text{out}}[De^{ik_1x}] = |D|^2\frac{\hbar k_1}{m}, \qquad j_{\text{back}}[Ae^{-ik_1x}] = |A|^2\frac{-\hbar k_1}{m},$$

То есть in – падающая волна, амплитуду которой мы выбрали единицей, out – ушедшая в $+\infty$ с амплитудой $D$ и *back* отразившаяся обратно в $-\infty$.

Коэффициенты из той системы получаются и соответственно

$$R = \left|\frac{j_{\text{back}}}{j_{\text{in}}}\right| = |A|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin k_1a}{4k_2^2k_1^2 + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2 k_1a},$$

$$T = \left|\frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}}\right| = |D|^2 = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_1a}.$$

## а) потенциальный барьер

Всё остаётся почти таким же, только сейчас проследим за сменой знаков кое-где

$$U(x) = \begin{cases} U_0 \;, |x| < a/2 \\ \;0 \;, |x| > a/2 \end{cases} \Rightarrow \qquad \begin{aligned} &\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (E - U_0)\psi(x) = 0 \;, && |x| < a/2 \\ &\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E\psi(x) = 0 \;, && |x| > a/2 \end{aligned}$$

Теперь если аналогично предыдущему пункту начать решать задачу, то заметим, что нужно лишь заменить одну! переменную $k_1 \mapsto \varkappa_1 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$. При чем, $0 < E < U_0$. И тогда по аналогии $k_1 = i\varkappa_1$ получаем:

$$R = \frac{(\varkappa_1^2 + k_2^2)^2 sh^2\varkappa_1a}{4\varkappa_1^2k_2^2 + (\varkappa_1 + k_2^2)^2 sh^2\varkappa_1a}, \qquad T = \frac{4\varkappa_1^2k_2^2}{4\varkappa_1^2k_2^2 + (\varkappa_1^2 + k_2^2)^2 sh^2\varkappa_1a}.$$

И главное что в прошлом пункте, что сейчас мы получаем сумму $R + T = 1$ что и ожидается.

## T5

**I**. Найдём уровни энергии и волновые функции связанных состояний ($E < 0$) частицы в поле
$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \varkappa_0}{m}\left(\delta(x+a)+\delta(x-a)\right).$$
Гамильтониан системы и стационарное уравнение Шрёдингера:
$$H = -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m} + U(x), \qquad -\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m}\psi(x) + U(x)\psi(x) = -|E|\psi(x),$$
далее считая $E = -E$, будем решать уравнение
$$\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(U(x)+E)\psi(x) = 0.$$
В местах, где не происходит скачков производной подходит в качестве решения экспонента, так что будем искать решение в виде
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\varkappa(x+a)}, & x < -a \\ Be^{-\varkappa(x+a)} + Ce^{\varkappa(x-a)}, & |x| < a \\ De^{-\varkappa(x-a)}, & x > a. \end{cases}$$
где введено $\varkappa^2 = 2mE/\hbar^2$.

Внимательно приглядевшись к виду $\psi(x)$ понимаем, что $e^{\varkappa a}$ можно спокойно закинуть в константы, что немного упростит вид уравнений:
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\varkappa x}, & x < -a \\ Be^{-\varkappa x} + Ce^{\varkappa x}, & |x| < a \\ De^{-\varkappa x}, & x > a. \end{cases}$$

Можно было бы заметить, что потенциал симметричен, а значит можно искать решение уравнения Шредингера, как собственные функции оператора инверсии: четные и нечетные решения ($A = D$, $B = C$ и $A = -D$, $B = -C$), но мы пойдём другим путём, чтобы посмотреть, как из уравнений вылезет симметрия задачи.

Чтобы найти $\psi(x)$ запишем условия непрерывности и, интегрируя стационарное уравнение Шредингера, уравнение на скачок производной:
$$\left.\begin{aligned} \psi(-a+\varepsilon) &= \psi(-a-\varepsilon), \\ \psi(a+\varepsilon) &= \psi(a-\varepsilon), \\ \psi'(-a+\varepsilon) - \psi'(-a-\varepsilon) &= -2\varkappa_0\psi(-a) \\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) &= -2\varkappa_0\psi(a) \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \left.\begin{aligned} A - C - Be^{2a\varkappa} &= 0 \\ B - D + Ce^{2a\varkappa} &= 0 \\ -A + C - Be^{2a\varkappa} + 2A\varkappa_0/\varkappa &= 0 \\ B - D - Ce^{2a\varkappa} + 2d\varkappa_0/\varkappa &= 0 \end{aligned}\right\}$$
Для удобства введем $X = e^{2a\varkappa}$, и выразив из первого уравнения A, из второго B, из третьего C подставим и получим уравнение вида
$$\frac{D\varkappa(\varkappa-\varkappa_0)}{(\varkappa-\varkappa_0)+\varkappa_0 X^{-2}} = d\varkappa_0, \quad \Rightarrow \quad \varkappa^2 - 2\varkappa\varkappa_0 + \varkappa_0^2 - \frac{\varkappa_0^2}{X^2} = 0, \quad \Rightarrow \quad \boxed{\varkappa_\pm = (1 \pm e^{-2a\varkappa})\varkappa_0}, \tag{1}$$
что составляет условие совместности полученной СЛУ,

Забавный факт: составим матричку для СЛУ и найдём определитель
$$M = \begin{pmatrix} 1 & -X & -1 & 0 \\ 0 & 1 & X & -1 \\ \varkappa - 2\varkappa_0 & \varkappa X & -\varkappa & 0 \\ 0 & \varkappa & -\varkappa X & 2\varkappa_0 - \varkappa \end{pmatrix}, \qquad \det M = 4(X^2(\varkappa-\varkappa_0)^2 - \varkappa_0^2).$$
Решение уравнения $\det M = 0$ относительно $\varkappa$ приводит к тем же корням, что и уравнение (1): $\varkappa = (1 \pm e^{-2A\varkappa})\varkappa_0$, таким образом СЛУ будет совместна, если вырождена.

Стоит заметить, что $\operatorname{rg} M(\varkappa_\pm) = 3$, тогда, решая уравнение относительно $A, B, C$, находим
$$\varkappa_+: \qquad A = D,\ B = C = \frac{A}{1+e^{2a\varkappa}}, \qquad \text{четное решение}$$
$$\varkappa_-: \qquad A = -D,\ B = -C = -\frac{A}{-1+e^{2a\varkappa}}, \qquad \text{нечетное решение}$$

Для наглядности можем их построить[4] .

[4] Само собой зависимость $\psi(x)$ от $x$.

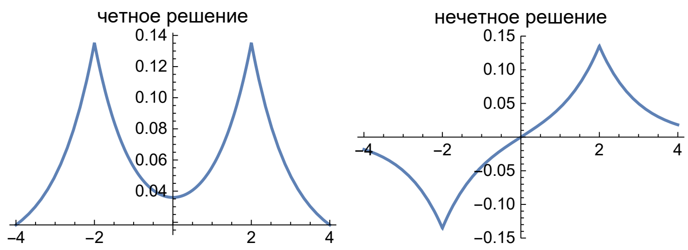



Рис. 2: Четное и нечётное решение к Т5

**Нормировка**. Для нахождения волновой функции, найдём коэффициент $A$ из нормируемости на 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_+(x)|^2\, dx = 1, \quad \Rightarrow \quad A_+^2 = \frac{\varkappa}{2} \frac{(1+e^{2a\varkappa})^2}{1+e^{2a\varkappa}+2a\varkappa}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_-(x)|^2\, dx = 1, \quad \Rightarrow \quad A_-^2 = \frac{\varkappa}{2} \frac{(-1+e^{2a\varkappa})^2}{-1+e^{2a\varkappa}-2a\varkappa}$$

Таким образом нашли собственные функции к этой задаче.

Стоит вспомнить, что уравнение (1) – трансцендентное уравнение, где $\varkappa = \varkappa(E)$, то есть уравнение на уровни энергии. Как мы показали, $\varkappa_+$ соответствует четному решению и $\varkappa_-$ нечётному, из достаточно убедительного рисунка[5] №3 видно, что $E^+ > E^-$.

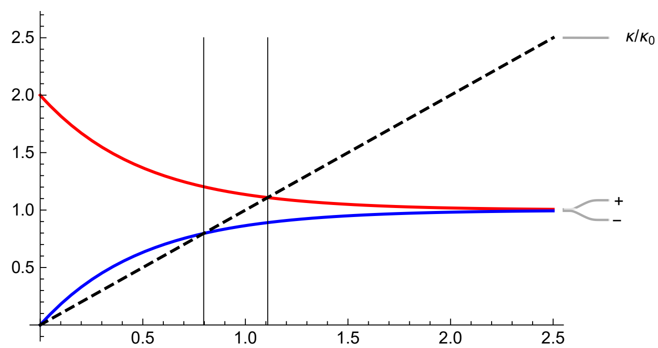



Рис. 3: Решение трансцендентного уравнения к Т5

**Далекие ямы**. Рассмотрим предельный случай $\varkappa_0 a \gg 1$, соответствующий достаточно далёким ямам, тогда $\varkappa_+ \approx \varkappa_- \approx \varkappa_0$, то есть система вырождается по энергии.

**Вероятность перехода**. В силу существования чётного и нечётного решения, можем построить состояния, соответствующие нахождению в правой ($\psi_a$) и левой ($\psi_{-a}$) ямах:

$$\begin{cases} \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ + \psi_-); \\ \psi_{-a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ - \psi_-); \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a + \psi_{-a}); \\ \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a - \psi_{-a}). \end{cases}$$

Теперь, из уравнения Шрёдингера, найдём эволюцию во времени для собственных состояний:

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi = -E\psi, \quad \Rightarrow \quad \psi_+(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_+ t}\psi_+(x), \quad \psi_-(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_- t}\psi_-(x).$$

Для состояния $\psi_a$ найдём зависимость от времени в базисе $\psi_a$, $\psi_{-a}$:

$$\psi_a(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+(x,t)+\psi_-(x,t)) = \frac{1}{2}\left(\psi_a(x)\left(e^{-iE^+t/\hbar}+e^{-iE^-t/\hbar}\right)+\psi_{-a}(x)\left(e^{-iE^+t/\hbar}-e^{-iE^-t/\hbar}\right)\right).$$

Вероятность перехода можем найти, как

$$P = |\langle\psi_a(x,t)|\psi_{-a}(x)\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}\underbrace{\left(\int|\psi_{-a}|^2\,dx\right)}_{\equiv 1}\left(e^{-iE^+t/\hbar}-e^{-iE^-t/\hbar}\right)\right|^2 = \sin^2\left(\frac{E^+-E^-}{2\hbar}t\right).$$

Можем чуть более явно найти вероятность, считая $\varkappa_0 a \gg 1$, тогда

$$\varkappa_+^2 \approx \varkappa_0^2 + \frac{2\varkappa_0^2}{e^{2\varkappa_0 a}}, \quad \varkappa_-^2 \approx \varkappa_0^2 - \frac{2\varkappa_0^2}{e^{2\varkappa_0 a}}, \quad \Rightarrow \quad P = \sin^2\left(\frac{\varkappa_0^2\hbar}{m}e^{-2\varkappa_0 a}t\right).$$

[5] Где по Ох отложена $\varkappa \sim \sqrt{E}$, оси действительно полезно подписывать.

## T6

Возьмём операторы импульса $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ и координаты $\hat{x}$. Сразу найдём их средние и коммутатор

$$\bar{x} = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle, \qquad \bar{p} = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle, \qquad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{E}.$$

Если сейчас ввести такие величины, у которых ещё и оказывается коммутатор тот же

$$\hat{\varkappa} = \hat{x} - \bar{x}, \qquad \hat{\varpi} = \hat{p} - \bar{p} \qquad [\hat{\varkappa}, \hat{\varpi}] = i\hbar\mathbb{E}.$$

Это ещё что[6], самое главное ещё и что помимо $\bar{\varpi} = \bar{\varkappa} = 0$, так ещё

$$(\Delta\varkappa)^2 = \langle\psi|(\hat{\varkappa} - \bar{\varkappa})|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{x} - \bar{x})|\psi\rangle = (\Delta x)^2, \qquad (\Delta\varpi)^2 = (\Delta p)^2.$$

Теперь введем функции по методу Вейля

$$|\Phi\rangle = (\hat{\varkappa} - i\gamma\hat{\varpi})\,|\Psi\rangle\,.$$

И так как по определению нормы $\langle\Phi|\Phi\rangle \geqslant 0$ получим

$$\langle\psi|(\hat{\varkappa} - i\gamma\hat{\varpi})^\dagger(\hat{\varkappa} - i\gamma\hat{\varpi})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\varkappa}^2 - i\gamma(\hat{\varkappa}\hat{\varpi} - \hat{\varpi}\hat{\varkappa}) + \gamma^2\hat{\varpi}^2|\psi\rangle \geqslant 0.$$

А значит неотрицательной должно быть и выражение

$$(\Delta x)^2 + \hbar\gamma\langle\mathbb{E}\rangle + \gamma^2(\Delta p)^2) \geqslant 0 \qquad \Rightarrow \qquad \hbar^2 - 4(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \leqslant 0,$$

что получилось просто из условия на дискриминант для квадратного уравнения на $\gamma$, тогда минимум достигнется просто при нулевом дискриминанте

$$(\Delta p)^2(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{4}, \qquad \gamma = -2\frac{(\Delta x)^2}{\hbar}.$$

Таким образом и нашли волновую функцию, которая удовлетворяет минимизации соотношения неопределенности, что мы четко и показали

$$|\Phi\rangle = [\hat{x} - \bar{x} + i\frac{2}{\hbar}(\Delta x)^2(\hat{p} - \bar{p})]\,|\Psi\rangle\,.$$

## T7

Рассмотрим движение в потенциальном поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2\varkappa_0}{m}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x - na).$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H} = -\tfrac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + U(x), \qquad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Подставляя, находим

$$\psi''(x) - \tfrac{2m}{\hbar^2}\left(U(x) - E\right)\psi(x) = 0, \qquad \Rightarrow \qquad \psi(x) = \begin{cases}\alpha_1 e^{ikx} + \beta_1 e^{-ikx}, & x \in [0, a];\\ \alpha_2 e^{ik(x-a)} + \beta_2 e^{-ik(x-a)}, & x \in [a, 2a];\end{cases}$$

где рассмотрели решение на двух областях: $[0, a]$ и $[a, 2a]$, и ввели $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$.

Запишем условие на непрерывность $\psi(x)$ и скачок первой производной

$$\left.\begin{aligned}\psi(a+\varepsilon) = \psi(a-\varepsilon),\\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) = -2\varkappa_0\psi(a),\end{aligned}\right\} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{pmatrix}\alpha_2\\ \beta_2\end{pmatrix} = A\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \beta_1\end{pmatrix}, \qquad A = \begin{pmatrix} e^{ika}\left(1 - \frac{\varkappa_0}{ik}\right) & -e^{-ika}\frac{\varkappa_0}{ik}\\ e^{ika}\frac{\varkappa_0}{ik} & e^{-ika}\left(1 + \frac{\varkappa_0}{ik}\right)\end{pmatrix}$$

Здесь, для удобства, ввели связь коэффициентов через матрицу $A$.

В силу периодичности потенциала, $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$, и решение может быть найдено в виде функций Блоха[7]

$$U(x+a) = U(x), \qquad \Rightarrow \qquad \psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x).$$

Тогда, подставляя предполагаемое решение, находим

$$\begin{pmatrix}\alpha_2\\ \beta_2\end{pmatrix} = e^{iKa}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \beta_1\end{pmatrix}.$$

[6] это \varpi, классно выглядит же

[7] Действительно, $\psi(x) = e^{Ka}F(x)$, где $F(x+a) = F(x)$, тогда $\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x)$.

Получается, матрица $A$ должна быть скалярна, чего можем добиться дополнительными условиями на $\alpha$ и $\beta$:

$$\lambda^2 - (\operatorname{tr} A)\lambda + \det(A) = 0, \qquad \operatorname{tr} A = e^{ika}\left(1 - \tfrac{\varkappa_0}{ik}\right) + e^{-ika}\left(1 + \tfrac{\varkappa_0}{ik}\right) \overset{\text{def}}{=} 2\rho, \qquad \det A = 1.$$

Подставляя условие из $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$, находим

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iKa} = \rho \pm i\sqrt{1-\rho^2},$$

что, вроде, носит гордое имя дисперсионного соотношения. Подставляя[8] $\rho$ находим выражение для $K$:

$$\cos(Ka) = \cos(ka) - \tfrac{\varkappa_0}{k}\sin(ka).$$

Так как $Ka \in \mathbb{R}$, то дисперсионное соотношение становится условием на допустимые значения энергии и, из уравнения и достаточно убедительного рисунка, можем сделать вывод о разрешенных зонах. Действительно, для того, чтобы зона была разрешенной необходимо, чтобы

$$|\cos(k[E]a) - \tfrac{\varkappa_0}{k[E]}\sin(k[E]a)| < 1, \tag{2}$$

на что чуть подробнее посмотрим в предельных случаях.

Построим $|\cos(k[E]a) - \frac{\varkappa_0}{k[E]}\sin(k[E]a)|$ для $\varkappa_0 a \ll 1$ (слабая связь) и $\varkappa_0 a \gg 1$ (сильная связь). Видно, что слабой связи соответствует почти непрерывный спектр $\cos(Ka) \approx \cos(ka)$ и $K \approx k + \frac{2\pi n}{a}$, а сильная связб приводит к почти дискретному спектру с $ka \approx \pi n$.

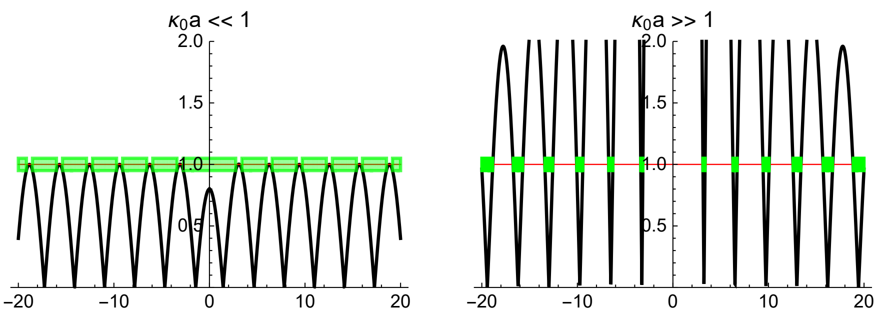



Рис. 4: Слабая и сильная связь в задаче T7

По определению, эффективной массой частицы называется

$$m^* \overset{\text{def}}{=} \hbar^2 \left(\frac{d^2E}{dK^2}\right)^{-1},$$

где $\hbar K$ – квазиимпульс.

Считая $k$ малым, находим

$$\frac{1}{6}k^2\left(a^3\varkappa_0 - 3a^2\right) - a\varkappa_0 + 1 = \cos(aK), \qquad \Rightarrow \qquad E(K) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{6}{a^2}\frac{1-\cos(Ka) - a\varkappa_0}{3 - \varkappa_0 a}.$$

Тогда эффективная масса система равна

$$E''_{KK} = \frac{3\hbar^2\cos(aK)}{m\,(3 - a\varkappa_0)}, \qquad \Rightarrow \qquad m^* = m\frac{1 - a\varkappa_0/3}{\cos(aK)},$$

которое $a\varkappa_0 \ll 1$ и $aK \ll 1$ переходит в классический случай!

## T8

Рассмотрим связанное сферически симметричное состояние частицы в сфрически симметричной потенциальной яме, вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < r_0, \\ 0, & r \geqslant r_0, \end{cases}$$

в частности случаи $\dim \in \{1, 2, 3\}$.

[8]Имеет смысл выразить $\rho = \cos(ak) - \frac{\varkappa_0}{k}\sin(ak)$.

Как обычно, запищем стационарное уравнение Шрёдингера, в силу связного состояния ($E < 0$)переобозначим $E \to -E$:

$$\hat{H}\psi = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U\right)\psi = -E\psi, \quad \Rightarrow \quad \triangle\psi - \frac{2m}{\hbar^2}(U+E)\psi = 0.$$

Раскрывая $U(r)$, выделяем две области:

$$\begin{cases} \triangle\psi + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \triangle\psi - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \qquad \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E.$$

Осталось раскрыть лапласиан, считая $\psi \equiv \psi(r)$ (сферически симметричное состояние)

$$\triangle|_{\text{dim}=1} = \partial_r^2, \qquad \triangle|_{\text{dim}=2} = \tfrac{1}{r}\partial_r + \partial_r^2, \qquad \triangle|_{\text{dim}=3} = \tfrac{2}{r}\partial_r + \partial_r^2.$$

**Одномерный случай**. Подробно разобран в Т2, здесь ограничимся только указанием итоговой охапки диффуров и ответа:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \psi'' - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \psi^+(r) = \begin{cases} A\cos(kr), & r < r_0; \\ Be^{-\varkappa r}, & r > r_0; \end{cases} \qquad \psi^-(r) = \begin{cases} A\sin(kr), & r < r_0; \\ Be^{-\varkappa r}, & r > r_0; \end{cases}$$

где $\psi^+$ и $\psi^-$ – четное и нечетное решение (в силу симметричности потенциала), а $A$ и $B$ известны из условий нормировки, непрерывности и гладкости.

**Двухмерный случай**. Дифференциальное уравнение на $\psi(r)$ примет вид

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{1}{r}\psi' + k^2\psi = 0, \\ \psi'' + \frac{1}{r}\psi' - \varkappa^2\psi = 0. \end{cases}$$

В силу сферической симметрии задачи, решение может быть найден в виде функций Бесселя $J_n$ и $Y_n$:

$$\psi(r) = \begin{cases} A_1 J_0(kr) + B_1 Y_0(kr), & r < r_0; \\ A_2 J_0(i\varkappa r) + B_2 Y_0(-i\varkappa r), & r > r_0. \end{cases}$$

В силу нормируемости $\psi$ должно выполняться равенство $B_2 = A_2/i$.

Дальше вспоминаем, что $\psi(r \leqslant r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)|_{r=r_0}$, также $\psi(r \leqslant r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)'|_{r=r_0}$, плюс $\int |\psi(r)|^2\, dr = 1$, что даёт нам три уравнения, на три коэффициента. Однако ожидается дискретность спектра, так что необходимо дополнительное условие, чтобы прийти к уравнению на $E$.

Можно предположить, что волновой функции ненормально уходить в бесконечность (даже оставаясь $L_2$ интегрируемой), тогда $B_1 = 0$, и мы получаем дискретный спектр. А может быть здесь просто не будет связанного состояния, но это было бы необычно.

**Трёхмерный случай**. Попробуем найти решение в виде $\psi(r) = \mu(r)\nu(r)$, где $\mu(r) = \exp\left(-\int \frac{f(r)}{2}\, dr\right)$, иногда это помогает диффурах вида $F'' + f(r)F' + F = 0$:

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{2}{r}\psi' + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \psi'' + \frac{2}{r}\psi' - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \qquad \nu(r) = e^{-\ln r} = \tfrac{1}{r}, \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \nu'' + k^2\nu = 0, & r < r_0; \\ \nu'' - \varkappa^2\nu = 0, & r > r_0. \end{cases}$$

А такое уравнение на $\nu(r)$ уже решается, итого находим

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{A_1}{r}e^{-ikr} + \frac{B_1}{r}e^{ikr}, & r < r_0; \\ \frac{A_2}{r}e^{-\varkappa r} + \frac{B_2}{r}e^{\varkappa r}, & r > r_0. \end{cases}$$

Осталось наполнить это физическим смыслом: при $r > r_0$ требование нормировки приведет к $B_2 = 0$, при $r < r_0$ для наглядности перепишем в тригонометрических функциях:

$$\psi(r < r_0) = -\frac{iA_1\sin(kr)}{r} + \frac{A_1\cos(kr)}{r} + \frac{iB_1\sin(kr)}{r} + \frac{B_1\cos(kr)}{r}, \quad \Rightarrow \quad B_1 = -A_1,$$

из того же требования нормируемости функции.

Из непрерывности в $r = r_0$ находим:

$$\psi(r \leqslant r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)|_{r=r_0}, \quad \Rightarrow \quad A_2 = -2iA_1 e^{r_0\varkappa}\sin(kr_0).$$

Выразив все коэффициенты через $A_1$, подставим их в условие глакзкости $\psi(r)$:

$$\psi(r \leqslant r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)'|_{r=r_0}, \quad \Rightarrow \quad k\cos(kr_0) + \varkappa\sin(kr_0) = 0, \quad \Rightarrow \quad \boxed{k[E] = -\varkappa[E] \cdot \operatorname{tg}(k[E]r_0)},$$

это трансцендентное уравнение на $E$ имеет решения, соответсвенно выделяет дискретный спектр уровней энергии.

Осталось найти $A_1$ из условия нормировки, к сожалению через элементарные функции у меня это условие не выражается, возможно выше была вычислительная ошибка, но система $\pm$ физична. Для начала посчитаем плотность вероятности

$$|\psi(r<r_0)|^2 = \frac{4A_1^2\left(k\cos\left(k\left(r-r_0\right)\right)-\varkappa\sin\left(k\left(r-r_0\right)\right)\right)^2}{r^2\left(\varkappa^2+k^2\right)}, \qquad |\psi(r>r_0)|^2 = \frac{4A_1^2k^2e^{2\varkappa(r_0-r)}}{r^2\left(\varkappa^2+k^2\right)}.$$

тогда условие нормировки:

$$\int_0^{r_0}|\psi(r<r_0)|^2\,dr + \int_{r_0}^{\infty}|\psi(r>r_0)|^2\,dr = 1, \quad\Rightarrow\quad A_1^{-2} = 8e^{2\varkappa r_0}\,\mathrm{Ei}\left(-2r_0\varkappa\right)\sin(kr_0)^2 + 4k\,\mathrm{Si}\left(2kr_0\right),$$

где Si – интегральный синус, Ei – интегральная экспонента, таким образом нашли волновую функцию и уровни энергии:

$$\psi(r) = 2A_1\begin{cases}\sin(kr)/r, & r<r_0;\\ \sin(kr_0)\,e^{\varkappa(r_0-r)}/r, & r>r_0.\end{cases}$$

## T9

Найдём уровни энергии трёхмерного изотропного гармонического осциллятора в ПДСК. Запишем уравнение Шрёдингера примет вид

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

и перейдём к безразмерным величинам

$$\hat{\boldsymbol{Q}} = \frac{\hat{\boldsymbol{q}}}{q_0}, \quad \hat{\boldsymbol{P}} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p_0} = -i\partial_{\boldsymbol{Q}}, \qquad p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}, \quad q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad\Rightarrow\quad \hat{H}_Q = \frac{1}{2}\left(Q^2+\hat{P}^2\right) = \hat{H}/(\hbar\omega).$$

Для благоприятного разделения переменных[9] представим $\psi(x,y,z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, и $E = E_x+E_y+E_z$:

$$\frac{1}{2}\left(x^2+y^2+z^2-\left(\partial_x^2+\partial_y^2+\partial_z^2\right)\right)\psi_x\psi_y\psi_z = \frac{1}{\hbar\omega}(E_x+E_y+E_z)\psi_x\psi_y\psi_z.$$

Нетрудно получить

$$\left(x^2-\frac{\psi_x''(x)}{\psi_x(x)}-\frac{2E_x}{\hbar\omega}\right)\psi_x\psi_y\psi_z+\ldots\left(z^2-\frac{\psi_z''(z)}{\psi_z(z)}-\frac{2E_z}{\hbar\omega}\right)\psi_x\psi_y\psi_z = 0,$$

таким образом переменные разделились и мы получили три независимых уравнения одномерных осцилляторов:

$$\begin{cases}\psi_x''(x)+\left(\frac{2E_x}{\hbar\omega}-x^2\right)\psi_x(x)=0,\\ \psi_y''(y)+\left(\frac{2E_y}{\hbar\omega}-y^2\right)\psi_y(y)=0,\\ \psi_z''(z)+\left(\frac{2E_z}{\hbar\omega}-z^2\right)\psi_z(z)=0.\end{cases}\quad\Rightarrow\quad E_i = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n_i\right).$$

Так приходим к выражению для энергии изотропного гармонического осциллятора через число квантов по каждой из осей:

$$E = E_x+E_y+E_z = \hbar\omega\left(\frac{3}{2}+n_x+n_y+n_z\right),$$

где явно видно вырождение уровней энергии, при $n_x+n_y+n_z=n$. Нетруно посчитать[10] , что

$$\#(n) = \mathrm{card}\left\{(n_x,\,n_y,\,n_z)\mid n_x+n_y+n_z=n\right\} = \frac{(n+1)(n+2)}{2},$$

что и является кратностью вырождения.

Заметим, что $\#(0)=1$, $\#(1)=3$, $\#(2)=6$, тогда

$$2\cdot\big(\#(0)\big) = 2,$$
$$2\cdot\big(\#(0)+\#(1)\big) = 8,$$
$$2\cdot\big(\#(0)+\#(1)+\#(2)\big) = 20,$$

что намекает на некоторую связь с магическими числами (ЛЛ3, §118: модель оболочек).

## T10

В нашем гармоническом осцилляторе посмотрим на коммутатор оператора уничтожения с гамильтонианом

$$[\hat{H},\hat{a}] = [\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right),\hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}] = -\hbar\omega[\hat{a},\hat{a}^\dagger]\hat{a} = -\hbar\omega\hat{a}.$$

[9] Здесь и далее $\boldsymbol{Q} = (x,\,y,\,z)^{\mathrm{T}}$ – обезразмеренные для удобства перменные.

[10] $n \geqslant 0$.

Как видим, этот коммутатор не обращается в нуль, если собственное значение $\hat{a}$ – не ноль. То есть энергия такого состояния $|\alpha\rangle$ флуктуирует вокруг своего среднего значения[11]. Разложим это состояния по базису стационарных состояний

$$|\alpha\rangle = \sum_n C_n(\alpha)\,|n\rangle\,.$$

Найдём $C_n$ из уравнения на собственные значения

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

Сопряженный оператор уничтожения работает как

$$\hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,, \qquad (\hat{a}^\dagger\,|n\rangle)^\dagger = \langle n|\,\hat{a} = \left\langle \hat{a}^\dagger n\right|.$$

То есть получили рекурентную формулу с помощью которой $C_n$ уже вычисляется

$$\alpha C_n(\alpha) = \sqrt{n+1}\langle n+1|\alpha\rangle = \sqrt{n+1}C_{n+1}(\alpha) \qquad \Rightarrow \qquad C_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}C_0(\alpha).$$

Теперь посмотрим на вид нашего разложения

$$|\alpha\rangle = C_0(\alpha)\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle = C_0(\alpha)\sum_n \frac{(\alpha\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle = C_0(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle\,.$$

Теперь по условию единично нормировки находим $C_0(\alpha)$ и ликуем

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = |C_0(\alpha)|^2\langle 0|e^{\alpha^*\hat{a}}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle = |C_0(\alpha)|^2\sum_n \frac{(\alpha^*\alpha)^n}{n!} = 1,$$

и тут под суммой снова удобный ряд

$$|C_0(\alpha)|^2 e^{|\alpha|^2} = 1 \qquad \Rightarrow \qquad C_0(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2}.$$

Окончательно получили

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_n \frac{\alpha^2}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,.$$

Теперь мы готовы искать распределение по числу квантов, ведь вероятность, что в $|\alpha\rangle$ найдётся $n$ квантов это

$$P_n = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2} = \frac{\langle N\rangle^n}{n!}e^{-\langle N\rangle}.$$

Получили распределение Пуассона для числа квантов со средним значением $\langle N\rangle$.

[11] Эта энергия определена как $\langle E\rangle = \hbar\omega(\langle N\rangle + 1/2)$. А вот $\langle N\rangle = |\alpha|^2$

## Дополнение к Т10

**I**. Пусть есть некоторое состояние, которое соответствует
$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_0 + iP_0), \qquad \hat{a}\left|\alpha\right\rangle = \alpha\left|\alpha\right\rangle.$$
В Т10 мы показали, что состояние $\left|\alpha\right\rangle$ можно разложить по базису собственных состояний $\hat{N}$: $\hat{N}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle$:
$$\left|\alpha\right\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\left|0\right\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right)\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\left|n\right\rangle,$$
где воспользовались представлением
$$\left|n\right\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\left|0\right\rangle.$$
Также можно переписать волновую функцию $\left|\psi\right\rangle$ в виде
$$\left|\psi\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\left|n\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\left|0\right\rangle = \left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{c_n}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n\right)\left|0\right\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\left|0\right\rangle.$$
То есть волновая функция может быть представлена, как действие $f(\hat{a}^\dagger)$ на состояние $\left|0\right\rangle$, где $f(x)$:
$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{c_n}{\sqrt{n!}}x^n.$$

**II**. Посмотрим на действие операторов $\hat{a}^\dagger$ и $\hat{a}$ на $\left|\psi\right\rangle$ в новом представлении:
$$\hat{a}\left|\psi\right\rangle = \hat{a}f(\hat{a}^\dagger)\left|0\right\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\underbrace{\hat{a}\left|0\right\rangle}_{\equiv 0} + f'(\hat{a}^\dagger)\left|0\right\rangle = f'(\hat{a}^\dagger)\left|0\right\rangle, \quad \Rightarrow \quad \boxed{\hat{a} \overset{*}{=} \partial_{\hat{a}^\dagger}, \quad \hat{a}^\dagger \overset{*}{=} \hat{a}^\dagger}.$$
где воспользовались равенствами из У10:
$$[\hat{a},\, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}, \qquad \left[\hat{a},\, f(\hat{a}^\dagger)\right] = f'(\hat{a}^\dagger).$$

**Когерентные состояния**. Перепишем в новых обозначениях уравнения для когерентного состояния:
$$\hat{a}\left|\alpha\right\rangle = \alpha\left|\alpha\right\rangle, \quad \Rightarrow \quad f' = \alpha f.$$
Нетрудно получить, что
$$f(x) = Ce^{\alpha x}, \quad \Rightarrow \quad \left|\alpha\right\rangle = Ce^{\alpha\,\hat{a}^\dagger}\left|0\right\rangle = C\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}(\hat{a}^\dagger)^n\left|0\right\rangle = C\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\left|n\right\rangle,$$
где нужжно поправить нормировку:
$$\|\alpha\|^2 = |C|^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha\bar{\alpha})^n}{n!} = |C|^2 e^{|\alpha|^2}, \quad \Rightarrow \quad \left|\alpha\right\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\cdot e^{\alpha\,\hat{a}^\dagger}\left|0\right\rangle.$$

**Смысл**. Рассмотрим проекцию $\left|\psi\right\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\left|0\right\rangle$, на когерентное состояние $\left|\alpha\right\rangle$:
$$\left|\alpha\right\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\cdot e^{\alpha\,\hat{a}^\dagger}\left|0\right\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\left|n\right\rangle, \qquad \left|\psi\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}c_n\frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\left|0\right\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\left|0\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(x)|_{x=0}}{\sqrt{n!}}\left|n\right\rangle.$$
скалярно перемножая, находим:
$$\left\langle\alpha|\psi\right\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{c_n\alpha^n}{\sqrt{n!}} = e^{-|\alpha|^2/2}\cdot f(\alpha).$$

**Разбиение единицы**. Вспомним, что
$$\alpha = \frac{Q_0 - iP_0}{\sqrt{2}}, \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{Q} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}, \qquad \left|f\right\rangle = f(\hat{a}^\dagger)\left|0\right\rangle.$$
Посмотрим на скалярное произведение:
$$\left\langle f_2|f_1\right\rangle = \int_{\mathbb{C}}\bar{f}_2(\alpha)f_1(\alpha)e^{-|\alpha|^2}\,d\alpha\,d\bar{\alpha}, \qquad \psi(x) = \langle x|f(\hat{a}^\dagger)|0\rangle \;\sim\; F(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2}f(\alpha).$$
В этих терминах и посмотрим на матричный элемент для $\hat{a}^\dagger$:
$$\langle F_2|\hat{a}^\dagger|F_1\rangle = \int_{\mathbb{C}}\bar{F}_2(\alpha)\,\alpha\,F_1(\alpha)\,d\alpha\,d\bar{\alpha},$$
и для $\hat{a}$:
$$\langle F_2|\hat{a}|F_1\rangle = \int_{\mathbb{C}}e^{-|\alpha|^2}\bar{f}_2(\alpha)\partial_\alpha f_1(\alpha)\,d\alpha\,d\bar{\alpha} = \Big/\text{по частям}\Big/ = \int_{\mathbb{C}}\bar{F}_2(\alpha)\,\bar{\alpha}\,F_1(\alpha)\,d\alpha\,d\bar{\alpha}.$$

## Сжатые состояния

Общее когерентное состояния для пары операторов координата-импульс должно удовлетворять уравнению

$$(\hat{x} + i\gamma\hat{p})\,|\psi\rangle = \alpha\,|\psi\rangle\,,$$

в котором $\gamma = \frac{q_0}{p_0} = \frac{1}{m\omega}$ – когерентные состояния гармонического осциллятора.

Можем посмотреть на друние $\gamma$, которым соответствуют более/менее широкие гауссовы распределения, чем для основного состояния осциллятора – *сжатые состояния осциллятора*, которые получим изменением масштаба по координате.

Построим оператор сжатия: сжатие по $x$ – сдвиг по $\ln|x|$, а значит генератор преобразования имеет вид

$$\hat{G}_0 = -i\hbar\partial_{\ln|x|} = -i\hbar x\partial_x = \hat{x}\hat{p},$$

что достаточно забавно, хотя оператор и не эрмитов, но при этом:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}k\hat{G}_0\right)\psi(x) = \psi(e^k x).$$

Квадрат нормы при этом тоже уменьшается, так что добавим константу так, чтобы новый оператор оказался эрмитовым:

$$\hat{G} = -i\hbar\left(x\partial_x + \tfrac{1}{2}\right) = \hat{x}\hat{p} - \frac{i\hbar}{2} = \frac{1}{2}\left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\right) = -i\hbar\frac{\hat{a}^2 - (\hat{a}^\dagger)^2}{2},$$

с автоматически унитарной экспонентой:

$$\hat{D}_k = \exp\left(\frac{i}{\hbar}k\hat{G}\right) = \exp\left(\frac{k}{2}\left(\hat{a}^2 - (\hat{a}^\dagger)^2\right)\right), \qquad \hat{D}_k\psi(x) = e^{k/2}\psi(e^k x).$$

Теперь удобно проследить за эволюцией сжатого состояния:

$$|\psi_k\rangle = \hat{D}_k\,|\psi\rangle\,, \qquad |\psi_k(t)\rangle = \hat{U}_t\hat{D}_k\hat{U}_t^{-1}\hat{U}_t\,|\psi\rangle = \hat{D}_k^{\text{H}}(-t)\,|\psi(t)\rangle\,,$$

где можем найти явный вид оператора сжатия в представлении Гейзенберга:

$$\hat{D}_k^{\text{H}}(-t) = \exp\left(\frac{k}{2}\hat{a}_{\text{H}}^2(-t) - \frac{k}{2}\hat{a}_{\text{H}}^{\dagger\,2}(-t)\right) = \exp\left(\frac{k}{2}e^{2i\omega t}\hat{a}^2 - \frac{k}{2}e^{-2i\omega t}(\hat{a}^\dagger)^2\right).$$

Итого, сжатое состояние со временем оказывается не когерентным для $\hat{P}, \hat{Q}$, но когерентным для

$$\hat{Q}_{\text{H}}(t) = \cos(\omega t)\hat{Q} + \sin(\omega t)\hat{P},$$
$$\hat{P}_{\text{H}}(t) = \cos(\omega t)\hat{P} - \sin(\omega t)\hat{Q}.$$

Перейдём к уравнени, вида

$$x^2\partial_x^2 u + x\partial_x u + x^2 u - \nu^2 u = 0.$$

Для начала решаем уравнение:

$$x\partial_x^2 f + \partial_z f = 0, \qquad \Rightarrow \qquad f(x) = c_1 + c_2\ln x,$$

откуда находим асимптотику: $f(x) \sim \log x$.

Однако вблизи $x = 0$, приведенное уравнение имеет степенные решения $f \sim x^\alpha$, где

$$x^2\alpha(\alpha-1)x^{\alpha-2} + x\alpha x^{\alpha-1} + x^2 x^\alpha - \nu^2 x^\alpha = 0,$$