

Упражнения

Первое

В общем и целом нужно найти A^* 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

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

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

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

То есть получили, что оператор инверсии унитарен $II^* = \mathbb{E}$ (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

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

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

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

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

Второе

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

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

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

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

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 $\hat{\varphi} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}$, где $\hat{\mathbf{k}}$ – оператор квазиимпульса.

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

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

¹ тут можно стать свидетелем замены строчной пси на заглавную

Они удовлетворяют уравнению

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

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 $\lambda = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{k}}$.

Шестое

Т3

а)

Задан потенциал $U(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \kappa_0 \delta(x)$, который представляет собой дельта-яму. Прежде чем как всегда решать стационарное уравнение Шредингера сделаем замечание, что $E < 0$, тогда получим

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

С такой заменой получим вполне красивый диффур второго порядка:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - \frac{\hbar^2}{m} \kappa_0 \delta(x) \psi + |E|\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi'' - (\kappa - 2\kappa_0 \delta(x))\psi = 0.$$

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 ψ , из-за дельта функции, мы получаем разрыв для первой производной

$$\psi'' - (\kappa - 2\kappa_0 \delta(x))\psi = 0 \quad \xrightarrow{\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}} \quad \psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\kappa_0 \psi(0).$$

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

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

Из непрерывности получим автоматически, что

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

Разрыв же первой производной позволит нам найти

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\kappa_0 \psi(0) \quad \Rightarrow \quad -2\kappa_0 C = C(-\kappa - \kappa) \quad \Rightarrow \quad \kappa = \kappa_0.$$

Таким образом энергия связного состояния:

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m}$$

Теперь, осталось проверить нормировку нашей волновой функции

$$\int_{\mathbb{R}} \psi \psi^* dx = 1 \quad \Rightarrow \quad C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\kappa_0 |x|} dx = \frac{C^2}{\kappa_0} \int_0^{+\infty} e^{-2\kappa_0 x} d2\kappa_0 x = \frac{C^2}{\kappa_0} = 1 \quad \Rightarrow \quad \kappa_0 = C^2.$$

Таким образом собирая всё вместе получаем волновую функцию вида:

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0 |x|}$$

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

$$\psi(p) = \langle p|0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \langle p|x \rangle \langle x|0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle p|x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} = \frac{\sqrt{\kappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\kappa_0 x - \frac{i}{\hbar} p x} dx = \frac{\sqrt{\kappa_0}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{2\kappa_0}{\kappa_0^2 + (p/\hbar)^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(\kappa_0 \hbar)^{3/2}}{(\kappa_0 \hbar)^2 + p^2}.$$

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

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

По тому же определению теперь будем получать нечто сложнее чем ноль

$$\langle 0|\hat{x}^2|0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \kappa e^{-2\kappa_0 |x|} \hat{x}^2 dx = \underbrace{2\kappa_0}_{\alpha} \int_0^{+\infty} e^{-2\kappa_0 x} x^2 dx = \alpha \frac{d^2}{d\alpha^2} \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x} dx = \frac{2}{\alpha^2} = \boxed{\frac{1}{2\kappa_0^2}}.$$

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 α^2 дифференцируем:

$$\langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = \int_{\mathbb{R}} dp p^2 \frac{2}{\pi} \frac{(\kappa_0 \hbar)^3}{((\hbar \kappa_0)^2 + p^2)^2} = \frac{2}{\pi} (\kappa_0 \hbar)^3 \left(-\frac{d}{d\alpha^2}\right) \int_{\mathbb{R}} \frac{p^2}{\alpha^2 p^2} dp = \frac{2}{\pi} (\kappa_0 \hbar)^3 \left(-\frac{d}{d\alpha^2}\right) \frac{2\pi i (i\alpha)^2}{2i\alpha} \Big|_{\alpha=\kappa_0 \hbar} = \boxed{(\kappa_0 \hbar)^2}.$$

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

Для интереса теперь ещё посмотрим на соотношение неопределенности

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \frac{1}{2\kappa_0^2} \kappa_0^2 \hbar^2 = \frac{\hbar^2}{2},$$

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

б)

И казалось бы всё хорошо, всё изучили в связанном 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 строчке 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 .

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

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:

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ i\kappa(A - B) - i\kappa(C - D) &= -2\kappa_0\psi(0) \end{aligned} \Rightarrow i\kappa[(C - D) - (A - B)] = 2\kappa_0(A + B)$$

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

$$\kappa = 2i\kappa_0 \frac{A + B}{(A - B) - (C - D)} = 2i\kappa_0 \frac{A}{A - (1 - D)} = i\kappa_0 \frac{A}{A - 1}.$$

Тут последнее равенство последовало из непрерывности в нуле: $A + 0 = 1 + D$. И чтобы научиться сравнивать амплитуды возьмём и выразим их все через κ и κ_0 , что мы уже можем сделать:

$$A = \frac{\kappa}{\kappa - i\kappa_0}, \quad D = \frac{i\kappa_0}{\kappa - i\kappa_0}.$$

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

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

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.

$$\begin{aligned} j_{\text{in}} &= j[e^{i\kappa x}] = -\frac{i\hbar}{2m}(i\kappa + i\kappa) = \frac{\hbar\kappa}{m} \\ j_{\text{out}} &= j[Ae^{i\kappa x}] = -\frac{i\hbar}{2m}|A|^2(i\kappa + i\kappa) = \frac{\hbar\kappa}{m \left(\left(\frac{\kappa}{\kappa_0} \right)^2 + 1 \right)} \\ j_{\text{back}} &= j[De^{-i\kappa x}] = -\frac{i\hbar}{2m}|D|^2(-i\kappa - i\kappa) = -\frac{\hbar\kappa}{m \left(\left(\frac{\kappa}{\kappa_0} \right)^2 + 1 \right)} \end{aligned}$$

И тогда

$$T = \left| \frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}} \right| = \frac{\varkappa^2}{\varkappa^2 + \varkappa_0^2}$$

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

в)

Честно, трудно понять, что автор задания имеет в виду под вероятностью "ионизации". Самое правдоподобное, что нам удалось придумать — вылет электрона из ямы при таком её резком изменении, что по аналогии с отрыванием электрона от атома её ионизует. Однако посчитать что-то близкое по ответу к Белоусову так и не вышло, а потому по определению вероятность "ионизации":

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

Т4

б) потенциальная яма

И так, зададим потенциальную яму и эволюцию нашей системы

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

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

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 \cdot e^{ik_1x} + A e^{-ik_1x}, & x < a/2 \\ B e^{ik_2x} + C e^{-ik_2x}, & |x| < a/2 \\ D e^{ik_1x} + 0 \cdot e^{-ik_1x}, & x > a/2 \end{cases} \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k_2^2 = \frac{2m(E + U_0)^2}{\hbar^2}.$$

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

Теперь на каждой границе нам нужно взять граничные условия

$$\begin{cases} \psi(\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi(\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi(-\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi(-\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi'(\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi'(\frac{a}{2} + \varepsilon) \\ \psi'(-\frac{a}{2} - \varepsilon) = \psi'(-\frac{a}{2} + \varepsilon) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B e^{ik_2a/2} + C e^{-ik_2a/2} = D e^{ik_1a/2} \\ e^{-ik_1a/2} + A e^{ik_1a/2} = B e^{ik_2a/2} + C e^{-ik_2a/2} \\ k_1 e^{-ik_1a/2} - k_1 A e^{ik_1a/2} = k_2 B e^{-ik_2a/2} - k_2 C e^{ik_2a/2} \\ k_1 D e^{ik_1a/2} = k_2 B e^{ik_2a/2} - k_2 C e^{-ik_2a/2} \end{cases}$$

В этот раз мы покажем какие-то алгебраические выкладки, которые ведут к свету, но на самом деле *Wolfram Mathematica* нам в помощь. Удобно заменить экспоненты в сетнях k_1 и k_2 на соответствующие α_i , тогда каким-нибудь Гауссом, система решится. Здесь приведем просто, что досчитать это реально

$$\begin{cases} B\alpha_2 + \frac{C}{\alpha_2} = D\alpha_1 \\ \frac{1}{\alpha_1} + A\alpha_1 = \frac{B}{\alpha_2} + C\alpha_2 \\ \frac{k_1}{\alpha_1} - A k_1 \alpha_1 = \frac{k_2 B}{\alpha_2} - k_2 C \alpha_2 \\ D\alpha_1 k_1 = B\alpha_2 k_2 - \frac{C k_2}{\alpha_2} \end{cases} \Rightarrow \dots \text{(мы в вас верим)}$$

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

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

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

Проверим, что коэффициенты из той системы получаются и соответственно

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

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

а) потенциальный барьер

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

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

Теперь если аналогично предыдущему пункту начать решать задачу, то заметим, что нужно лишь заменить одну! переменную $k_1 \mapsto \kappa_1 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$. При чем, $0 < E < U_0$. И тогда по аналогии $k_1 = i\kappa_1$ получаем:

$$R = \frac{(\kappa_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2 \kappa_1 a}{4\kappa_1^2 k_2^2 + (\kappa_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2 \kappa_1 a}, \quad T = \frac{4\kappa_1^2 k_2^2}{4\kappa_1^2 k_2^2 + (\kappa_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2 \kappa_1 a}.$$

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