

ЗАДАНИЕ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: 17 сентября 2021 г.

Содержание

1	Первое задание	2
	Упражнения	2
	T1	7
	T2	8
	T3	8
	T4	10
	T5	12
	T6	14
	T7	14
	T8	15
	T9	17
	T10	17

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

¹ тут можно стать свидетелем замены строчной пси на заглавную

У3

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

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

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. Предположим противное, в частности, что существует отрицательное собственное значение:

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

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 будем²

$$\begin{aligned} e^{\xi A} B e^{-\xi A} &= \left(1 + \xi A + \frac{\xi^2 A^2}{2} + \frac{\xi^3 A^3}{6} + \dots \right) \cdot B \cdot \left(1 - \xi A + \frac{\xi^2 A^2}{2} - \frac{\xi^3 A^3}{6} + \dots \right) = \\ &= B + \underbrace{\xi AB - \xi BA}_{\xi[A, B]} + \underbrace{\frac{\xi^2}{2} A^2 B + \frac{\xi^2}{2} B A^2 - \xi^2 A B A}_{\frac{\xi^2}{2}(A[A, B] - [A, B]A) = \frac{\xi^2}{2}[A, [A, B]]} + \dots \end{aligned}$$

Что и хотелось показать.

Теперь докажем это формальнее, если вдруг очень надо.

Во первых сразу сформулируем общую формулу, которую будем доказывать

$$e^A B e^{-A} = B + \sum_n \underbrace{[A, [A, \dots [A, B] \dots]]}_n.$$

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

$$\left. \frac{d^n}{d\lambda^n} F(\lambda) \right|_{\lambda=0} = \sum_{k=0}^n C_n^k A^k e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} A^{n-k} (-1)^{n-k} \Big|_{\lambda=0} = \sum_{k=0}^n C_n^k A^k B A^{n-k} (-1)^{n-k},$$

Получив удобное представление разложим требуемое соотношение в ряд Тейлора

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

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

²При 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

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

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 $n = m \geq 1$ тоже выполнено, что

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

тогда при следующем $n = m + 1$

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{m+1} C_{m+1}^k A^k B A^{m+1-k} (-1)^{m+1-k} &= \sum_{k=0}^m C_m^k A^k B A^{m+1-k} (-1)^{m+1-k} + \sum_{k=0}^{m+1} C_n^{k-1} A^k B A^{m-(k-1)} (-1)^{m-(k-1)} = \\ &= - \left(\sum_{k=0}^m C_m^k A^k B A^{m-k} (-1)^{m+1-k} \right) A + A \left(\sum_{k=1}^{m+1} C_m^{k-1} A^k B A^{m-(k-1)} (-1)^{m-(k-1)} \right) = \\ &= [A, \underbrace{[A, [A, \dots [A, B] \dots]]}_m] = \underbrace{[A, [A, \dots [A, B] \dots]]}_{m+1}. \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}]\psi(x) &= x(-i\hbar)\partial_x\psi - (-i\hbar)\partial_x(x\psi) = i\hbar\psi + i\hbar x\partial_x\psi - i\hbar x\partial_x\psi = i\hbar\psi, \\ \Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] &= i\hbar. \end{aligned}$$

а) Аналогично, в смысле операторного равенства,

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}^2]\psi(x) &= x(-i\hbar)^2\partial_x^2\psi - (-i\hbar)^2\partial_x^2(x\psi) = -\hbar^2 x\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x(\psi + x\partial_x\psi) = \\ &= -\hbar^2 x\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x\psi + \hbar^2\partial_x\psi + \hbar^2 x\partial_x^2\psi = 2i\hbar\hat{p}\psi, \\ \Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}^2] &= 2i\hbar\hat{p}. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} [U(\hat{x}), \hat{p}]\psi(x) &= U(x)(-i\hbar\partial_x\psi) + i\hbar\partial_x(U\psi) = U(-i\hbar\partial_x\psi) + i\hbar(\psi\partial_x U + U\partial_x\psi) = i\hbar(\partial_x U)\psi, \\ \Rightarrow [U(\hat{x}), \hat{p}] &= 2i\hbar\hat{p}. \end{aligned}$$

в) Наконец,

$$\begin{aligned} [U(\hat{x}), \hat{p}^2]\psi(x) &= U(-\hbar^2)\partial_x^2\psi + \hbar^2\partial_x^2 U\psi = U(-\hbar^2)\psi'' + \hbar^2(\psi U'' + 2U'\psi' + \psi''U) = \\ &= \hbar^2(\psi U'' + 2U'\psi') = (\hbar^2 U'' + \hbar^2 2U'\hat{p})\psi, \\ \Rightarrow [U(\hat{x}), \hat{p}^2] &= \hbar^2 U'' + 2i\hbar U'\hat{p}. \end{aligned}$$

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 $f_n = \langle n | \hat{f} | n \rangle$.

³Тут 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:

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

что и требовалось доказать.

У9

Вспомним, что оператор трансляции нам в принципе задавался как

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

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

$$e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}} U(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}} \xrightarrow{\Psi(\mathbf{r})} \hat{T}_a U(\mathbf{r}) \hat{T}_{-a} \Psi(\mathbf{r}) = \hat{T}_a [U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{a})] = U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \Psi(\mathbf{r}).$$

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

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

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 $f(\hat{a}^\dagger) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (\hat{a}^\dagger)^n$:

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

что достаточно забавно.

У11

Выразим оператор координаты и импульса через операторы рождения и уничтожения:

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

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

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

Для начала квадрат координаты:

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

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:

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

Аналогично, находим квадрат импульса

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

И его четвертую степень:

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

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

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

что полностью соответствует принципу неопределенности Гейзенберга.

У12

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

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

Запишем гамильтониан системы

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

тогда можем найти

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

и, решая диффур, находим

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

Или, можно было напрямую, воспользоваться

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

где мы воспользовались равенством, доказанным в У6.

Т1

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

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

Тогда решение может быть найдено в виде

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

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 ψ 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 волновая функция стационарных состояний и соответствующие уровни энергии

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

Средние значения. Найдём среднее значение для координаты

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

Аналогично можем найти среднее значение импульса

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

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

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

а соответствующая дисперсия

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

Теперь для импульса

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

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

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

что прекрасно сходится с принципом соответствия.

Т2

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

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

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

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

Посмотрим теперь на движение частицы в неглубокой потенциальной яме

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a; \\ 0, & |x| \geq a. \end{cases} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x).$$

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

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

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:

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

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

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

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

где ввели $k_0^2 = \kappa^2 + k^2$. 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 $k_0 a \geq (N - 1)\pi$. Важно, что решения существуют только при $\text{tg } ka > 0$.

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

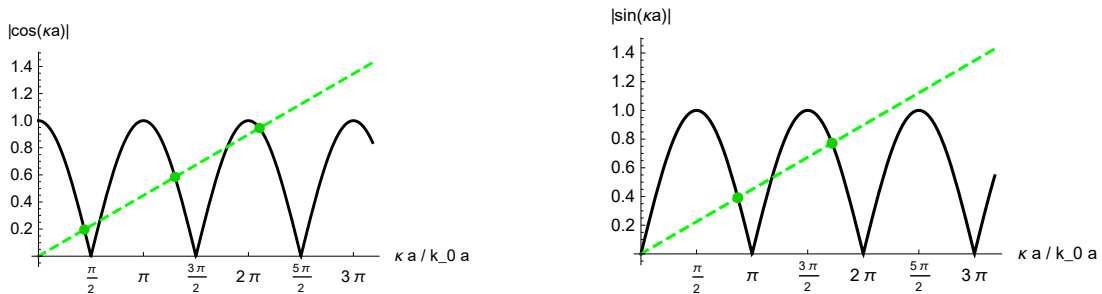


Рис. 1: Трансцендентное уравнение (для четного и нечетного решения) на уровни энергии к задаче Т2

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 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 .

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

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 кашу

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

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

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

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.

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

И тогда

$$T = \left| \frac{j_{out}}{j_{in}} \right| = \frac{\kappa^2}{\kappa^2 + \kappa_0^2} \quad R = \left| \frac{j_{back}}{j_{in}} \right| = \frac{\kappa_0^2}{\kappa^2 + \kappa_0^2}.$$

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 волновая функция, состояния наших электронов, тогда, вероятность того, что из ямы что-то вылетит это просто

$$W = 1 - |\langle \psi_1 | \psi_0 \rangle|^2 = 1 - \frac{4\kappa_0\kappa_1}{(\kappa_0 + \kappa_1)^2} = \left(\frac{\kappa_0 - \kappa_1}{\kappa_0 + \kappa_1} \right)^2.$$

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

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

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

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

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 степенях k_1 и k_2 на соответствующие α_i , тогда каким-нибудь Гауссом, система решится. Здесь приведем просто, что досчитать это реально

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

Т5

I. Найдём уровни энергии и волновые функции связанных состояний ($E < 0$) частицы в поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} \left(\delta(x+a) + \delta(x-a) \right).$$

Гамильтониан системы и стационарное уравнение Шрёдингера:

$$H = -\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + U(x), \quad -\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} \psi(x) + U(x) \psi(x) = -|E| \psi(x),$$

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

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa(x+a)}, & x < -a \\ Be^{-\kappa(x+a)} + Ce^{\kappa(x-a)}, & |x| < a \\ De^{-\kappa(x-a)}, & x > a. \end{cases}$$

где введено $\kappa^2 = 2mE/\hbar^2$.

Внимательно приглядевшись к виду $\psi(x)$ понимаем, что $e^{\kappa a}$ можно спокойно закинуть в константы, что немного упростит вид уравнений:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x}, & x < -a \\ Be^{-\kappa x} + Ce^{\kappa x}, & |x| < a \\ De^{-\kappa x}, & x > a. \end{cases}$$

Можно было бы заметить, что потенциал симметричен, а значит можно искать решение уравнения Шрёдингера, 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 Шрёдингера, уравнение на скачок производной:

$$\left. \begin{aligned} \psi(-a+\varepsilon) &= \psi(-a-\varepsilon), \\ \psi(a+\varepsilon) &= \psi(a-\varepsilon), \\ \psi'(-a+\varepsilon) - \psi'(-a-\varepsilon) &= -2\kappa_0 \psi(-a), \\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) &= -2\kappa_0 \psi(a) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} A - C - Be^{2a\kappa} &= 0 \\ B - D + Ce^{2a\kappa} &= 0 \\ -A + C - Be^{2a\kappa} + 2A\kappa_0/\kappa &= 0 \\ B - D - Ce^{2a\kappa} + 2D\kappa_0/\kappa &= 0 \end{aligned} \right\}$$

Для удобства введем $X = e^{2a\kappa}$, и выразив из первого уравнения А, из второго В, из третьего С подставим и получим уравнение вида

$$\frac{D\kappa(\kappa - \kappa_0)}{(\kappa - \kappa_0) + \kappa_0 X^{-2}} = d\kappa_0, \quad \Rightarrow \quad \kappa^2 - 2\kappa\kappa_0 + \kappa_0^2 - \frac{\kappa_0^2}{X^2} = 0, \quad \Rightarrow \quad \boxed{\kappa_{\pm} = (1 \pm e^{-2a\kappa})\kappa_0}, \quad (1)$$

что составляет условие совместности полученной СЛУ,

Забавный факт: составим матричку для СЛУ и найдём определитель

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -X & -1 & 0 \\ 0 & 1 & X & -1 \\ \kappa - 2\kappa_0 & \kappa X & -\kappa & 0 \\ 0 & \kappa & -\kappa X & 2\kappa_0 - \kappa \end{pmatrix}, \quad \det M = 4(X^2(\kappa - \kappa_0)^2 - \kappa_0^2).$$

Решение уравнения $\det M = 0$ относительно κ приводит к тем же корням, что и уравнение (1): $\kappa = (1 \pm e^{-2a\kappa})\kappa_0$, таким образом СЛУ будет совместна, если вырождена.

Стоит заметить, что $\text{rg } M(\kappa_{\pm}) = 3$, тогда, решая уравнение относительно A, B, C , находим

$$\begin{aligned} \kappa_+ : \quad A = D, \quad B = C &= \frac{A}{1 + e^{2a\kappa}}, & \text{четное решение} \\ \kappa_- : \quad A = -D, \quad B = -C &= -\frac{A}{-1 + e^{2a\kappa}}, & \text{нечетное решение} \end{aligned}$$

Для наглядности можем их построить⁴.

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

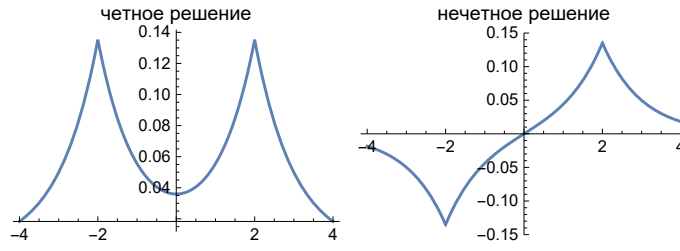


Рис. 2: Четное и нечётное решение к Т5

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

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_+(x)|^2 dx = 1, & \Rightarrow A_+^2 = \frac{\kappa}{2} \frac{(1 + e^{2a\kappa})^2}{1 + e^{2a\kappa} + 2a\kappa} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_-(x)|^2 dx = 1, & \Rightarrow A_-^2 = \frac{\kappa}{2} \frac{(-1 + e^{2a\kappa})^2}{-1 + e^{2a\kappa} - 2a\kappa} \end{aligned}$$

Таким образом нашли собственные функции к этой задаче.

Стоит вспомнить, что уравнение (1) – трансцендентное уравнение, где $\kappa = \kappa(E)$, то есть уравнение на уровни энергии. Как мы показали, κ_+ соответствует четному решению и κ_- нечётному, из достаточно убедительного рисунка⁵ №3 видно, что $E^+ > E^-$.

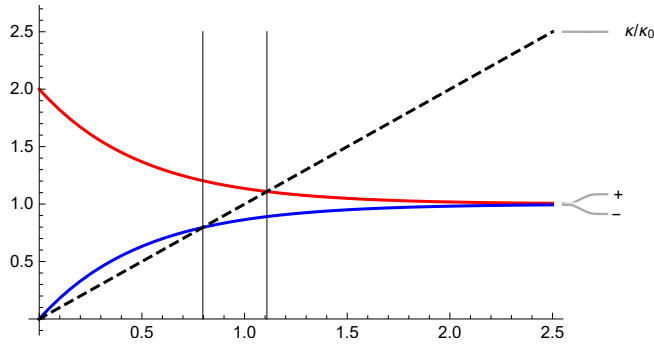


Рис. 3: Решение трансцендентного уравнения к Т5

Далекие ямы. Рассмотрим предельный случай $\kappa_0 a \gg 1$, соответствующий достаточно далёким ямам, тогда $\kappa_+ \approx \kappa_- \approx \kappa_0$, то есть система вырождается по энергии.

Вероятность перехода. В силу существования чётного и нечётного решения, можем построить состояния, соответствующие нахождению в правой (ψ_a) и левой (ψ_{-a}) ямах:

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

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 ψ_a найдём зависимость от времени в базисе ψ_a, ψ_{-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

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

Можем чуть более явно найти вероятность, считая $\kappa_0 a \gg 1$, тогда

$$\kappa_+^2 \approx \kappa_0^2 + \frac{2\kappa_0^2}{e^{2\kappa_0 a}}, \quad \kappa_-^2 \approx \kappa_0^2 - \frac{2\kappa_0^2}{e^{2\kappa_0 a}}, \quad \Rightarrow \quad P = \sin^2 \left(\frac{\kappa_0^2 \hbar}{m} e^{-2\kappa_0 a} t \right).$$

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

Т6

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

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

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

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

Это ещё что⁶, самое главное ещё и что помимо $\bar{\omega} = \bar{\varkappa} = 0$, так ещё

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

Теперь введём функции по методу Вейля

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

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

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

А значит неотрицательной должно быть и выражение

$$(\Delta x)^2 + \hbar\gamma\langle \mathbb{E} \rangle + \gamma^2(\Delta p)^2 \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \hbar^2 - 4(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \leq 0,$$

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

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

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

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

Т7

Рассмотрим движение в потенциальном поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2\kappa_0}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na).$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера

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

Подставляя, находим

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

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

$$\left. \begin{aligned} \psi(a+\varepsilon) &= \psi(a-\varepsilon), \\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) &= -2\kappa_0\psi(a), \end{aligned} \right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} e^{ika} \left(1 - \frac{\kappa_0}{ik}\right) & -e^{-ika} \frac{\kappa_0}{ik} \\ e^{ika} \frac{\kappa_0}{ik} & e^{-ika} \left(1 + \frac{\kappa_0}{ik}\right) \end{pmatrix}$$

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 Блоха⁷

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

Тогда, подставляя предполагаемое решение, находим

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

⁶это *vari*, классно выглядит же

⁷Действительно, $\psi(x) = e^{Ka}F(x)$, 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 α и β :

$$\lambda^2 - (\text{tr } A)\lambda + \det(A) = 0, \quad \text{tr } A = e^{ika} \left(1 - \frac{\kappa_0}{ik}\right) + e^{-ika} \left(1 + \frac{\kappa_0}{ik}\right) \stackrel{\text{def}}{=} 2\rho, \quad \det A = 1.$$

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. Подставляя⁸ ρ находим выражение для K :

$$\cos(Ka) = \cos(ka) - \frac{\kappa_0}{k} \sin(ka).$$

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

$$|\cos(k[E]a) - \frac{\kappa_0}{k[E]} \sin(k[E]a)| < 1, \quad (2)$$

на что чуть подробнее посмотрим в предельных случаях.

Построим $|\cos(k[E]a) - \frac{\kappa_0}{k[E]} \sin(k[E]a)|$ для $\kappa_0 a \ll 1$ (слабая связь) и $\kappa_0 a \gg 1$ (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 связь приводит к почти дискретному спектру с $ka \approx \pi n$.

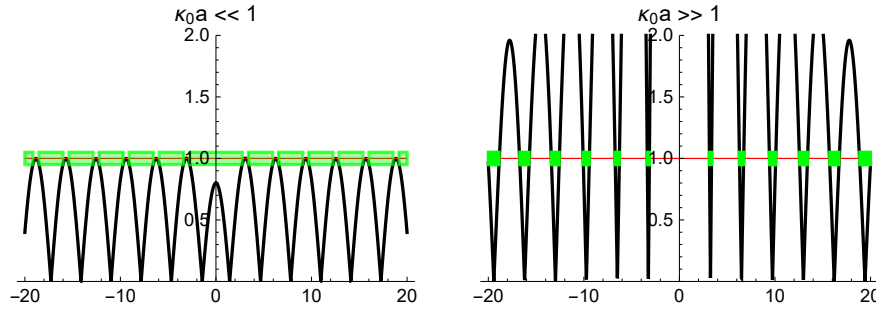


Рис. 4: Слабая и сильная связь в задаче Т7

По определению, эффективной массой частицы называется

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

где $\hbar K$ – квазиимпульс.

Считая k малым, находим

$$\frac{1}{6} k^2 (a^3 \kappa_0 - 3a^2) - a\kappa_0 + 1 = \cos(aK), \quad \Rightarrow \quad E(K) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{6}{a^2} \frac{1 - \cos(Ka) - a\kappa_0}{3 - \kappa_0 a}.$$

Тогда эффективная масса система равна

$$E''_{KK} = \frac{3\hbar^2 \cos(aK)}{m(3 - a\kappa_0)}, \quad \Rightarrow \quad m^* = m \frac{1 - a\kappa_0/3}{\cos(aK)},$$

которое $a\kappa_0 \ll 1$ и $aK \ll 1$ переходит в классический случай!

Т8

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

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

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

⁸Имеет смысл выразить $\rho = \cos(ka) - \frac{\kappa_0}{k} \sin(ka)$.

Как обычно, запишем стационарное уравнение Шрёдингера, в силу связанного состояния ($E < 0$) переобозначим $E \rightarrow -E$:

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

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

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

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

$$\Delta|_{\dim=1} = \partial_r^2, \quad \Delta|_{\dim=2} = \frac{1}{r}\partial_r + \partial_r^2, \quad \Delta|_{\dim=3} = \frac{2}{r}\partial_r + \partial_r^2.$$

Одномерный случай. Подробно разобран в Т2, здесь ограничимся только указанием итоговой охалки диффузов и ответа:

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

где ψ^+ и ψ^- – 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

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

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

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

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

Дальше вспоминаем, что $\psi(r \leq r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geq r_0)|_{r=r_0}$, также $\psi(r \leq r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geq r_0)'|_{r=r_0}$, 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 $F'' + f(r)F' + F = 0$:

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

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

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

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:

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

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

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

это трансцендентное уравнение на E имеет решения, соответственно 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

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

тогда условие нормировки:

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

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

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

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

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

Для благоприятного разделения переменных⁹ представим $\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, и $E = E_x + E_y + E_z$:

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

Нетрудно получить

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

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 посчитать¹⁰, что

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

что и является кратностью вырождения.

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

$$\begin{aligned} 2 \cdot (\#(0)) &= 2, \\ 2 \cdot (\#(0) + \#(1)) &= 8, \\ 2 \cdot (\#(0) + \#(1) + \#(2)) &= 20, \end{aligned}$$

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

T10

В нашем гармоническом осцилляторе посмотрим на коммутатор оператора уничтожения с гамильтонианом

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

⁹Здесь и далее $\mathbf{Q} = (x, y, z)^T$ – безразмерные для удобства переменные.

¹⁰ $n \geq 0$.

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 значения¹¹. 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

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

То есть получили рекуррентную формулу с помощью которой C_n уже вычисляется

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

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

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

Окончательно получили

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

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 $\langle N \rangle$.

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