

Выберем базис гауссовых волновых пакетов, центрированных в фазовом пространстве в точках  $(a, 0)$ ,  $(-a, 0)$ ,  $(0, a)$ ,  $(0, -a)$ , где  $a$  — варьируемый параметр. Данные функции имеют вид:

$$\psi_1(x|a) = e^{-0.5\omega(x-a)^2}$$

$$\psi_2(x|a) = e^{-0.5\omega(x+a)^2}$$

$$\psi_3(x|a) = e^{-0.5\omega x^2 + iax}$$

$$\psi_4(x|a) = e^{-0.5\omega x^2 - iax}$$

Изучим, как выглядят вариации функций  $\psi_i$ . Для этого запишем выражения для  $\psi_i(x|a + \delta a)$ :

$$\begin{aligned}\psi_1(x|a + \delta a) &= e^{-0.5\omega(x-a-\delta a)^2} = e^{-0.5\omega(x-a)^2 + \omega(x-a)\delta a} = \\ &= e^{-0.5\omega(x-a)^2} e^{\omega(x-a)\delta a} = \psi_1(1 + \omega(x-a)\delta a) = \psi_1 + \omega(x-a)\psi_1\delta a\end{aligned}$$

Получили, что первая вариация функции  $\psi_1$  равна  $\omega(x-a)\psi_1$ . Аналогично, получим и значения первых вариаций остальных функций:

$$\delta\psi_2 = -\omega(x+a)\psi_2\delta a$$

$$\delta\psi_3 = ix\psi_3\delta a$$

$$\delta\psi_4 = -ix\psi_4\delta a$$

В общем виде:

$$\psi_i = e^{f_i}, \quad \delta\psi_i = \frac{df_i}{da}\psi_i\delta a$$

Запишем стационарное уравнение Шредингера:

$$\hat{H}\tilde{\psi}_m = E_m\tilde{\psi}_m$$

Пусть собственные функции  $\tilde{\psi}_m$  могут быть разложены по выбранному базису следующим образом:

$$\tilde{\psi}_m = \sum_{i=1}^4 \psi_i D_{im}$$

Подставим разложение в стационарную задачу, умножим слева на  $\psi_j^*$  и проинтегрируем. Получим:

$$\sum_{i=1}^4 D_{im} \langle \psi_j | \hat{H} | \psi_i \rangle = \sum_{i=1}^4 E_m D_{im} \langle \psi_j | \psi_i \rangle$$

Изучим поведение решения при замене параметра  $a$  на  $a + \delta a$  в базисных функциях:

$$\sum_{i=1}^4 D_{im} \langle \psi_j + \delta \psi_j | \hat{H} | \psi_i + \delta \psi_i \rangle = \sum_{i=1}^4 E_m D_{im} \langle \psi_j + \delta \psi_j | \psi_i + \delta \psi_i \rangle$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 D_{im} \left( \langle \psi_j | \hat{H} | \psi_i \rangle + \langle \delta \psi_j | \hat{H} | \psi_i \rangle + \langle \psi_j | \hat{H} | \delta \psi_i \rangle \right) = \\ = \sum_{i=1}^4 E_m D_{im} (\langle \psi_j | \psi_i \rangle + \langle \delta \psi_j | \psi_i \rangle + \langle \psi_j | \delta \psi_i \rangle) \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^4 D_{im} \left( \langle \psi_i | \hat{H} | \delta \psi_j \rangle^* + \langle \psi_j | \hat{H} | \delta \psi_i \rangle \right) = \sum_{i=1}^4 E_m D_{im} (\langle \psi_i | \delta \psi_j \rangle^* + \langle \psi_j | \delta \psi_i \rangle)$$

$$\sum_{i=1}^4 D_{im} \left( \langle \psi_i | \hat{H} \frac{d f_j}{d a} | \psi_j \rangle^* + \langle \psi_j | \hat{H} \frac{d f_i}{d a} | \psi_i \rangle \right) = \sum_{i=1}^4 E_m D_{im} \left( \langle \psi_i | \frac{d f_j}{d a} | \psi_j \rangle^* + \langle \psi_j | \frac{d f_i}{d a} | \psi_i \rangle \right)$$

$$\sum_{i=1}^4 D_{im} (\mathbb{A}_{ij}^* + \mathbb{A}_{ji}) = \sum_{i=1}^4 E_m D_{im} (\mathbb{B}_{ij}^* + \mathbb{B}_{ji})$$

$$\sum_{i=1}^4 D_{im} (\mathbb{A}^\dagger + \mathbb{A})_{ji} = \sum_{i=1}^4 E_m D_{im} (\mathbb{B}^\dagger + \mathbb{B})_{ji}$$

$$((\mathbb{A}^\dagger + \mathbb{A}) \mathbb{D})_{jm} = E_m ((\mathbb{B}^\dagger + \mathbb{B}) \mathbb{D})_{jm}$$

$$(\mathbb{A}^\dagger + \mathbb{A}) \mathbb{D} = \mathbb{E} (\mathbb{B}^\dagger + \mathbb{B}) \mathbb{D}$$

где  $\mathbb{E}$  — диагональная матрица.