

1 Гармонический осциллятор

1.1 Нет усреднения

Рассмотрим динамику Гауссовых волновых пакетов в гармоническом потенциале:

$$|\Psi\rangle = \sum_k D_k |g_k\rangle$$

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad \dot{q}_k = \frac{p_k}{m}, \quad \dot{p}_k = - \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{q_k} = -m\omega^2 q_k$$

$$\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar} \mathbb{S}(\mathbb{H} - i\hbar\tau) \vec{D}$$

Для удобства проведем замену переменных:

$$g_k = N \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(-\frac{1}{2}m\omega(x - q_k)^2 + ip_k x \right) \right) = \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(-\frac{1}{2}m\omega x^2 + \xi_k x + \eta_k \right) \right)$$

$$\xi_k = m\omega q_k + ip_k, \quad \eta_k = \hbar \ln N - \frac{1}{2}m\omega q_k^2$$

$$\dot{\xi}_k = m\omega \dot{q}_k + i\dot{p}_k = \omega p_k - im\omega^2 q_k = -\omega(im\omega q_k - p_k) = -i\omega(m\omega q_k + ip_k) = -i\omega \xi_k$$

$$\dot{\eta}_k = -m\omega q_k \dot{q}_k = -\omega q_k p_k$$

Получим явный вид некоторых матричных элементов:

1. элементы матрицы перекрывания:

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{mk} &= \langle g_m | g_k \rangle = \int \exp \left(\frac{1}{\hbar} (-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k) \right) dx = \\ &= \int \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(-m\omega \left[x - \frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega} \right]^2 + \frac{(\xi_m^* + \xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k \right) \right) dx = \\ &= \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(\frac{(\xi_m^* + \xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k \right) \right) \int \exp \left(-\frac{m\omega}{\hbar} y^2 \right) dy = \\ &= \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(\frac{(\xi_m^* + \xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k \right) \right) \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \\ \mathbb{S}_{kk} &= N^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} = 1 \Rightarrow N = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \end{aligned}$$

2. элементы матрицы M_1 — первых моментов:

$$\begin{aligned}\langle g_m | x | g_k \rangle &= \int x \cdot \exp \left(\frac{1}{\hbar} (-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k) \right) dx = \\ &= \hbar \int \frac{\partial}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)} \exp \left(\frac{1}{\hbar} (-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k) \right) dx \\ &= \hbar \frac{\partial \mathbb{S}_{mk}}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)} = \frac{(\xi_m^* + \xi_k)}{2m\omega} \mathbb{S}_{mk}\end{aligned}$$

3. элементы матрицы M_2 — вторых моментов:

$$\begin{aligned}\langle g_m | x^2 | g_k \rangle &= \int x^2 \cdot \exp \left(\frac{1}{\hbar} (-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k) \right) dx = \\ &= \hbar^2 \frac{\partial^2 \mathbb{S}_{mk}}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)^2} = \frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega} \right)^2\end{aligned}$$

4. элементы матрицы τ :

$$\begin{aligned}\tau_{mk} = \langle g_m | \dot{g}_k \rangle &= \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(\dot{\eta}_k + \dot{\xi}_k \frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega} \right) = \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(-\omega q_k p_k - i\omega \xi_k \frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega} \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(-\omega q_k p_k - \frac{i\xi_k^2}{2m} - \frac{i\xi_m^* \xi_k}{2m} \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(-\omega q_k p_k - \frac{i}{2m} (m^2 \omega^2 q_k^2 - p_k^2 + 2im\omega q_k p_k) - \frac{i\xi_m^* \xi_k}{2m} \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(iL_k - \frac{i\xi_m^* \xi_k}{2m} \right)\end{aligned}$$

5. элементы матрицы Гамильтониана:

$$\begin{aligned}\mathbb{H}_{mk} &= \langle g_m | \hat{T} | g_k \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle g_m \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right| g_k \right\rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle g_m \left| \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x} (-m\omega x + \xi_k) \right| g_k \right\rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle = \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \langle g_m | g_k \rangle - \frac{1}{2m} \langle g_m | (-m\omega x + \xi_k)^2 | g_k \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle = \\ &= \left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m} \right) \langle g_m | g_k \rangle + \omega \xi_k \langle g_m | x | g_k \rangle - \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle = \\ &= \left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m} \right) + \omega \xi_k \frac{(\xi_m^* + \xi_k)}{2m\omega} \right) \langle g_m | g_k \rangle = \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\xi_m^* \xi_k}{2m} \right) \langle g_m | g_k \rangle\end{aligned}$$

Теперь соберем все это в выражение для \vec{D}

$$\mathbb{H}_{mk} - i\hbar\tau_{mk} = \mathbb{S}_{mk} \left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_k \right) \in \mathbb{R}$$

$$\dot{D}_n = -\frac{i}{\hbar} \sum_{m,k} \mathbb{S}_{nm}^{-1} \mathbb{S}_{mk} \left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_k \right) D_k = -\frac{i}{\hbar} \sum_k \left(\sum_m \mathbb{S}_{nm}^{-1} \mathbb{S}_{mk} \right) \left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_k \right) D_k$$

$$\dot{D}_n = -\frac{i}{\hbar} \sum_k \left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_k \right) \delta_{nk} D_k = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar\omega}{2} + L_n \right) D_n$$

$$L_n = \frac{p_n^2}{2m} - \frac{1}{2} m \omega^2 q_n^2$$

Таким образом получили следующий результат: в гармоническом осцилляторе задача факторизуется не только на уровне расчета траекторий, но и на стадии расчета коэффициента. Для расчета n -го коэффициента нужны только q_n и p_n .

При расчете коэффициентов возникает функция Лагранжа n -го волнового пакета. Рассмотрим среднее значение функции Лагранжа:

$$\begin{aligned} L = \vec{D}^\dagger (\mathbb{T} - \mathbb{V}) \vec{D} &= \sum_{m,k} D_m^* D_k \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle g_m \left| \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right| g_k \right\rangle - \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle \right) = \\ &= \sum_{m,k} D_m^* D_k \left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m} \right) \mathbb{S}_{mk} + \omega \xi_k \langle g_m | x | g_k \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle - \frac{1}{2} m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle \right) \\ &= \sum_{m,k} D_m^* D_k \left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m} \right) \mathbb{S}_{mk} + \omega \xi_k \langle g_m | x | g_k \rangle - m \omega^2 \langle g_m | x^2 | g_k \rangle \right) = \\ &= \sum_{m,k} D_m^* D_k \left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m} + \frac{\omega \xi_k (\xi_m^* + \xi_k)}{2m\omega} - m \omega^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega} \right)^2 \right) \right) \mathbb{S}_{mk} \\ &= \sum_{m,k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} \left(\frac{2\xi_k \xi_m^* - (\xi_m^* + \xi_k)^2}{4m} \right) = - \sum_{m,k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} \frac{(\xi_m^*)^2 + \xi_k^2}{4m} = \\ &= -\frac{1}{4m} \left(\sum_{m,k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} \xi_k^2 + \sum_{m,k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} (\xi_m^2)^* \right) = \\ &= -\frac{1}{4m} \left(\sum_{m,k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} \xi_k^2 + \sum_{m,k} (D_m D_k^* \mathbb{S}_{km} \xi_m^2)^* \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2m} \sum_{m,k} \text{Re}(D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} \xi_k^2) = -\frac{1}{2m} \sum_{m,k} (m^2 \omega^2 q_k^2 - p_k^2) \text{Re}(D_m^* \mathbb{S}_{mk} D_k) = \\
&= \sum_{m,k} \left(\frac{p_k^2}{2m} - \frac{1}{2} m \omega^2 q_k^2 \right) \text{Re}(D_m^* \mathbb{S}_{mk} D_k) = \\
&= \sum_{m,k} L_k \text{Re} \left(D_m^*(0) D_k(0) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t (L_m - L_k) dt' \right) \mathbb{S}_{mk} \right) = \\
&= \sum_{m,k} L_k \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_0^t (L_m - L_k) dt' \right) \text{Re}(D_m^*(0) \mathbb{S}_{mk} D_k(0))
\end{aligned}$$

Поскольку задача факторизовалась полностью, найдем явный вид зависимости коэффициента D от времени:

$$\begin{aligned}
D(t) &= D(0) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{\hbar \omega}{2} + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \right) dt \right) \\
&\begin{cases} \dot{q} = p/m \\ \dot{p} = -m \omega^2 q \end{cases} \\
&\ddot{q} = \frac{\dot{p}}{m} = -\omega^2 q \\
&q(t) = A_1 e^{i\omega t} + A_2 e^{-i\omega t} \\
&\begin{cases} q(0) = A_1 + A_2 \\ \dot{q}(0) = p(0)/m = i\omega(A_1 - A_2) \end{cases} \\
&\begin{cases} A_1 = \frac{1}{2} \left(q(0) - \frac{ip(0)}{m\omega} \right) \\ A_2 = \frac{1}{2} \left(q(0) + \frac{ip(0)}{m\omega} \right) \end{cases} \\
q(t) &= \frac{1}{2} \left(\left(q(0) - \frac{ip(0)}{m\omega} \right) e^{i\omega t} + \left(q(0) + \frac{ip(0)}{m\omega} \right) e^{-i\omega t} \right) = \\
&= \frac{1}{2} \left(q(0) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) - \frac{ip(0)}{m\omega} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \right) = \\
&= q(0) \cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega} \sin(\omega t) \\
p(t) &= m\dot{q}(t) = -m\omega q(0) \sin(\omega t) + p(0) \cos(\omega t) \\
\int_0^t \frac{p(t')^2}{2m} dt' &= \frac{1}{2m} \left(p(0)^2 \int_0^t \cos^2(\omega t') dt' + m^2 \omega^2 q(0)^2 \int_0^t \sin^2(\omega t') dt' - \right. \\
&\quad \left. - m\omega q(0) p(0) \int_0^t 2 \sin(\omega t) \cos(\omega t') dt' \right) =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{p(0)^2}{4m} \int_0^t (1 + \cos(2\omega t')) dt' + \frac{m\omega^2 q(0)^2}{4} \int_0^t (1 - \cos(2\omega t')) dt' - \\
&\quad - q(0)p(0) \int_0^t \sin(\omega t') d \sin(\omega t') = \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{p(0)^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q(0)^2 \right) t + \frac{1}{4\omega} \left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2} m\omega^2 q(0)^2 \right) \sin(2\omega t) - \\
&\quad - \frac{q(0)p(0)}{2} \sin^2(\omega t) \\
&\frac{1}{2} m\omega^2 \int_0^t q(t')^2 dt' = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(q(0)^2 \int_0^t \cos^2(\omega t') dt' + \frac{p(0)^2}{m^2 \omega^2} \int_0^t \sin^2(\omega t') dt' + \right. \\
&\quad \left. + \frac{q(0)p(0)}{m\omega} \int_0^t 2 \sin(\omega t') \cos(\omega t') dt' \right) = \\
&= \frac{1}{4} m\omega^2 q(0)^2 \int_0^t (1 + \cos(2\omega t')) dt' + \frac{p(0)^2}{4m} \int_0^t (1 - \cos(2\omega t')) dt' + \\
&\quad + q(0)p(0) \int_0^t \sin(\omega t') d \sin(\omega t') = \\
&= \frac{t}{2} \left(\frac{p(0)^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q(0)^2 \right) - \frac{1}{4\omega} \left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2} m\omega^2 q(0)^2 \right) \sin(2\omega t) + \\
&\quad + \frac{q(0)p(0)}{2} \sin^2(\omega t) \\
&\int_0^t \left(\frac{p(t')^2}{2m} - \frac{1}{2} m\omega^2 q(t')^2 \right) dt' = \left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2} m\omega^2 q(0)^2 \right) \frac{\sin(2\omega t)}{2\omega} - q(0)p(0) \sin^2(\omega t) \\
&D(t) = D(0) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar \omega t}{2} + L(0) \frac{\sin(2\omega t)}{2\omega} - q(0)p(0) \sin^2(\omega t) \right) \right) \quad (1)
\end{aligned}$$

Проверим, что при данном способе задания динамики сохраняется норма:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \vec{D}^\dagger \mathbb{S} \vec{D}, \quad \frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = 2 \operatorname{Re}(\vec{D}^\dagger \mathbb{S} \dot{\vec{D}}) + \vec{D}^\dagger \dot{\mathbb{S}} \vec{D}$$

$$\vec{D}^\dagger \mathbb{S} \dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar} \vec{D}^\dagger \mathbb{S} \mathbb{S}^{-1} (\mathbb{H} - i\hbar\tau) \vec{D} = -\frac{i}{\hbar} \vec{D}^\dagger (\mathbb{H} - i\hbar\tau) \vec{D}$$

Элемента матрицы $\mathbb{H} - i\hbar\tau \in \mathbb{R}$. Следовательно, $\vec{D} \mathbb{S} \dot{\vec{D}}$ чисто мнимое. Тогда первое слагаемое в выражении $\langle \Psi | \Psi \rangle'_t$ равно 0. Изучим второе слагаемое:

$$\vec{D}^\dagger \dot{\mathbb{S}} \vec{D} = \sum_{m,k} D_m^* D_k (\langle \dot{g}_m | g_k \rangle + \langle g_m | \dot{g}_k \rangle) = \sum_{m,k} D_m^* D_k \langle g_k | \dot{g}_m \rangle^* + \sum_{m,k} D_m^* D_k \langle g_m | \dot{g}_k \rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\sum_{m,k} D_m D_k^* \langle g_k | \dot{g}_m \rangle \right)^* + \sum_{m,k} D_m^* D_k \langle g_m | \dot{g}_k \rangle = \\
&= 2 \operatorname{Re} \left(\sum_{m,k} D_m^* D_k \tau_{mk} \right)
\end{aligned}$$

Матрица τ антисимметрична, ее диагональные элементы чисто мнимые. Поэтому и второе слагаемое равно нулю.

Базис — три волновых пакета: $\{q_k\}_{k=1}^3 = \{0, \pm 0.2\}$, $\langle p \rangle = \sqrt{2}$. Частота потенциала = частоте пакета = 1

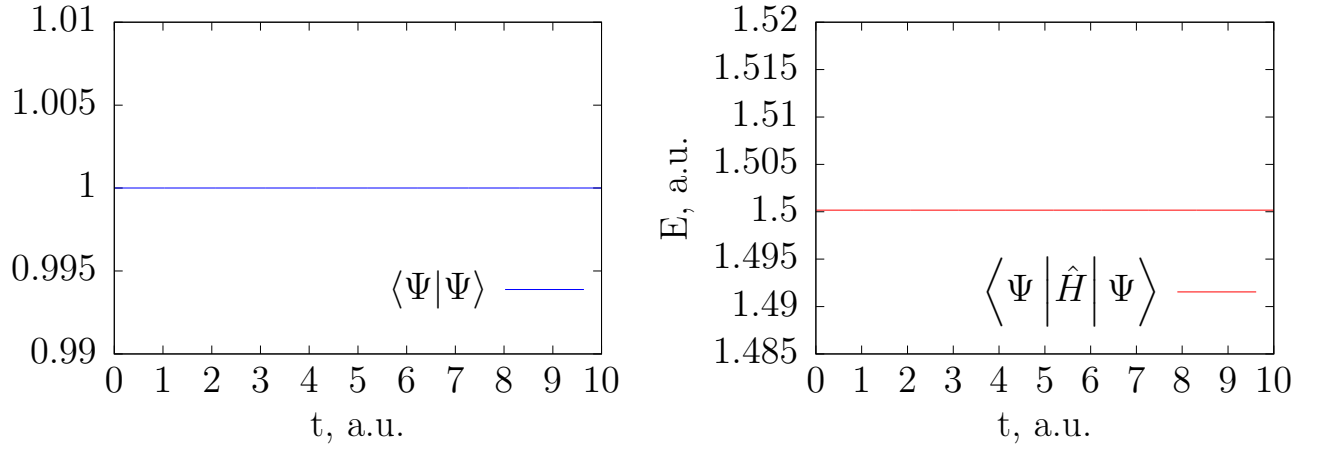


Рис. 1: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

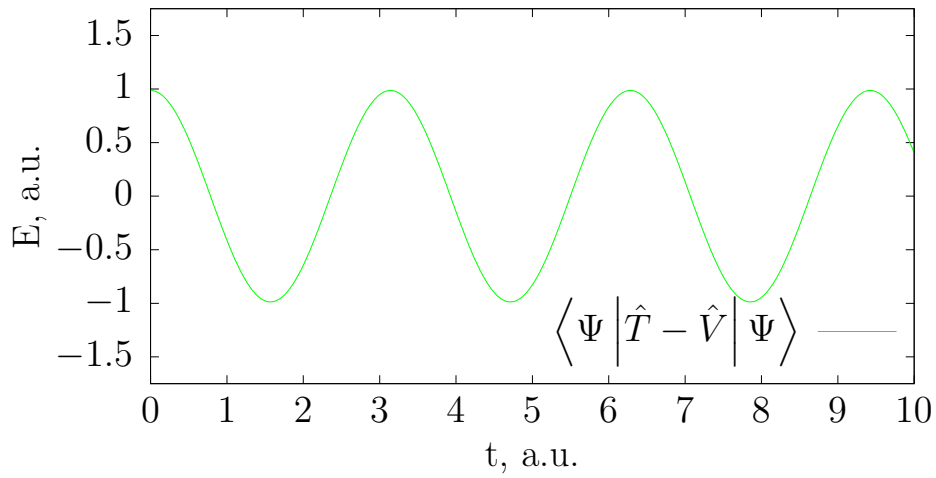


Рис. 2: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

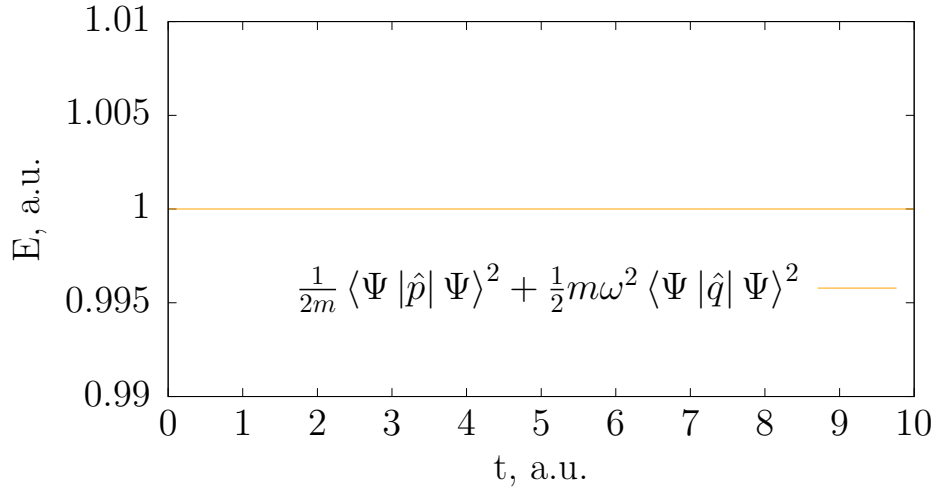


Рис. 3: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

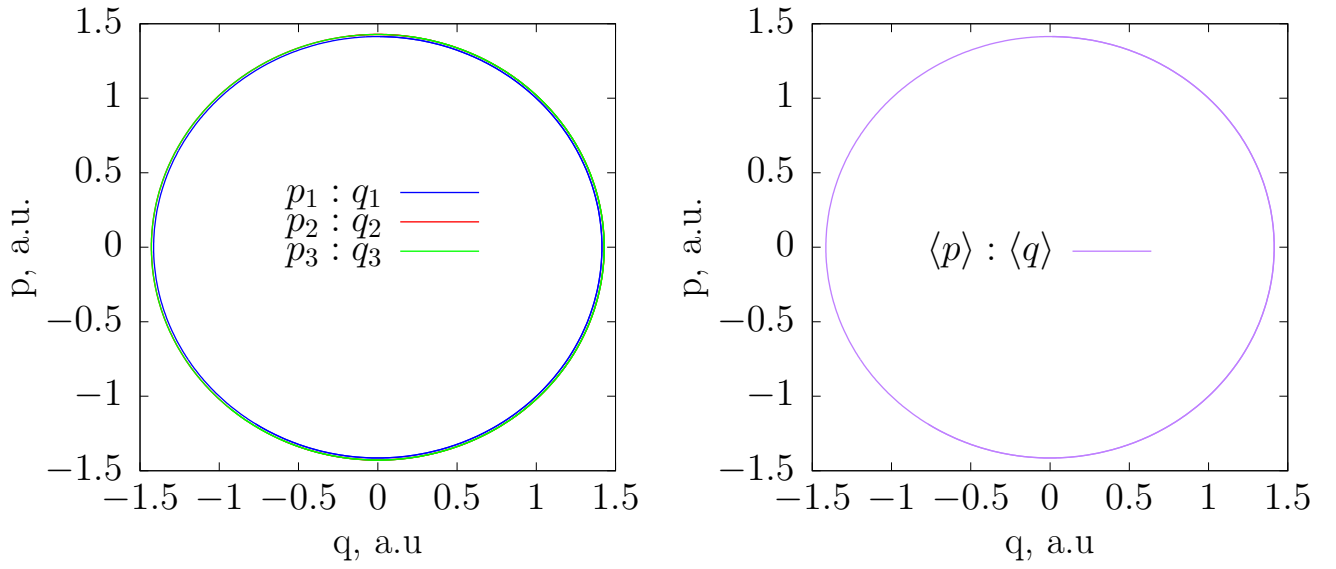


Рис. 4: Фазовый портрет базисных функций

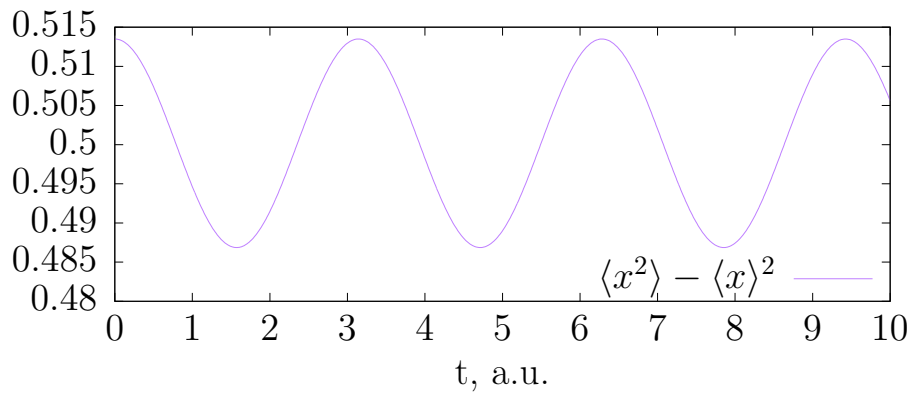


Рис. 5: Зависимость дисперсии ВФ от времени

1.2 Усреднение импульса — полное усреднение градиента

Пусть все волновые пакеты движутся с одинаковым импульсом, изменение которого рассчитывается в центре функции $|\Psi\rangle$

$$|g_k\rangle = N \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(-\frac{1}{2} m \omega (x - q_k)^2 + i \langle p \rangle x \right) \right) = \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(-\frac{1}{2} m \omega x^2 + \xi_k x + \eta_k \right) \right)$$

$$\xi_k = m \omega q_k + i \langle p \rangle, \eta_k = \hbar \ln N - \frac{1}{2} m \omega q_k^2$$

$$\dot{\xi}_k = m \omega \dot{q}_k + i \langle \dot{p} \rangle = \omega \langle p \rangle - i \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

$$\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle = m \omega^2 \langle x \rangle = \sum_{m,k} D_m^* D_k \langle g_m | x | g_k \rangle = \sum_{m,k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} \frac{q_m + q_k}{2}$$

$$\dot{\eta}_k = -m \omega q_k \dot{q}_k = -\omega q_k \langle p \rangle$$

Матричные элементы примут вид:

1. матрица перекрывания:

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{mk} &= \sqrt{\frac{\hbar \pi}{m \omega}} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(\frac{(m \omega q_k + m \omega q_m)^2}{4 m \omega} + 2 \hbar \ln N - \frac{1}{2} m \omega (q_k^2 + q_m^2) \right) \right) = \\ &= \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{4} m \omega (q_m + q_k)^2 - \frac{1}{2} m \omega (q_m^2 + q_k^2) \right) \right) = \\ &= \exp \left(-\frac{m \omega}{4 \hbar} (q_m - q_k)^2 \right) \end{aligned}$$

2. матрица первых моментов:

$$\langle g_m | x | g_k \rangle = \frac{q_m + q_k}{2} \mathbb{S}_{mk}$$

3. матрица вторых моментов:

$$\langle g_m | x^2 | g_k \rangle = \left(\frac{\hbar}{2 m \omega} + \left(\frac{q_m + q_k}{2} \right)^2 \right) \mathbb{S}_{mk}$$

4. матрица τ :

$$\begin{aligned} \tau_{mk} &= \langle g_m | \dot{g}_k \rangle = \frac{1}{\hbar} \left(\dot{\eta}_k + \dot{\xi}_k \frac{(q_k + q_m)}{2} \right) \mathbb{S}_{mk} = \\ &= \frac{1}{\hbar} \left(-\omega q_k \langle p \rangle + \frac{1}{2} (\omega \langle p \rangle - i m \omega^2 \langle x \rangle) (q_m + q_k) \right) \mathbb{S}_{mk} = \\ &= \frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{2} \omega \langle p \rangle (q_m - q_k) - \frac{i}{2} m \omega^2 \langle x \rangle (q_m + q_k) \right) \mathbb{S}_{mk} \end{aligned}$$

5. матрица оператора Гамильтона:

$$\begin{aligned}\mathbb{H}_{mk} &= \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{(m\omega q_m - i\langle p \rangle)(m\omega q_k + i\langle p \rangle)}{2m} \right) \mathbb{S}_{mk} = \\ &= \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q_m q_k + \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + \frac{i}{2}\omega\langle p \rangle(q_m - q_k) \right) \mathbb{S}_{mk}\end{aligned}$$

Соберем матричные элементы:

$$\mathbb{H}_{mk} - i\hbar\tau_{mk} = \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2(q_m q_k - \langle x \rangle(q_m + q_k)) + \frac{\langle p \rangle^2}{2m} \right) \mathbb{S}_{mk}$$

Таким образом, матрица $\mathbb{H} - i\hbar\tau$ действительна.

$$\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar}\mathbb{S}^{-1}(\mathbb{H} - i\hbar\tau)\vec{D}$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \vec{D}^\dagger \mathbb{S} \vec{D}, \quad \frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = 2\text{Re}(\vec{D}^\dagger \dot{\mathbb{S}} \vec{D}) + \vec{D}^\dagger \dot{\mathbb{S}} \vec{D}$$

$$\vec{D}^\dagger \dot{\mathbb{S}} \vec{D} = -\frac{i}{\hbar} \vec{D}^\dagger \mathbb{S} \mathbb{S}^{-1}(\mathbb{H} - i\hbar\tau) \vec{D} = -\frac{i}{\hbar} \vec{D}^\dagger (\mathbb{H} - i\hbar\tau) \vec{D}$$

Так как $(\mathbb{H} - i\hbar\tau)$ действительна, то $\vec{D}^\dagger \dot{\mathbb{S}} \vec{D}$ — чисто мнимое число, а его действительная часть = 0.

$$\begin{aligned}\dot{\mathbb{S}}_{mk} &= \langle \dot{g}_m | g_k \rangle + \langle g_m | \dot{g}_k \rangle = \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(\dot{\eta}_m^* + \dot{\eta}_k + \frac{1}{2}(\dot{\xi}_m^* + \dot{\xi}_k)(q_m + q_k) \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} (-\omega\langle p \rangle(q_m + q_k) + \omega\langle p \rangle(q_m + q_k)) = 0\end{aligned}$$

Тогда $\frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = 0$

Базис — три волновых пакета: $\{q_k\}_{k=1}^3 = \{0, \pm 0.2\}$, $\langle p \rangle = \sqrt{2}$. Частота потенциала = частоте пакета = 1

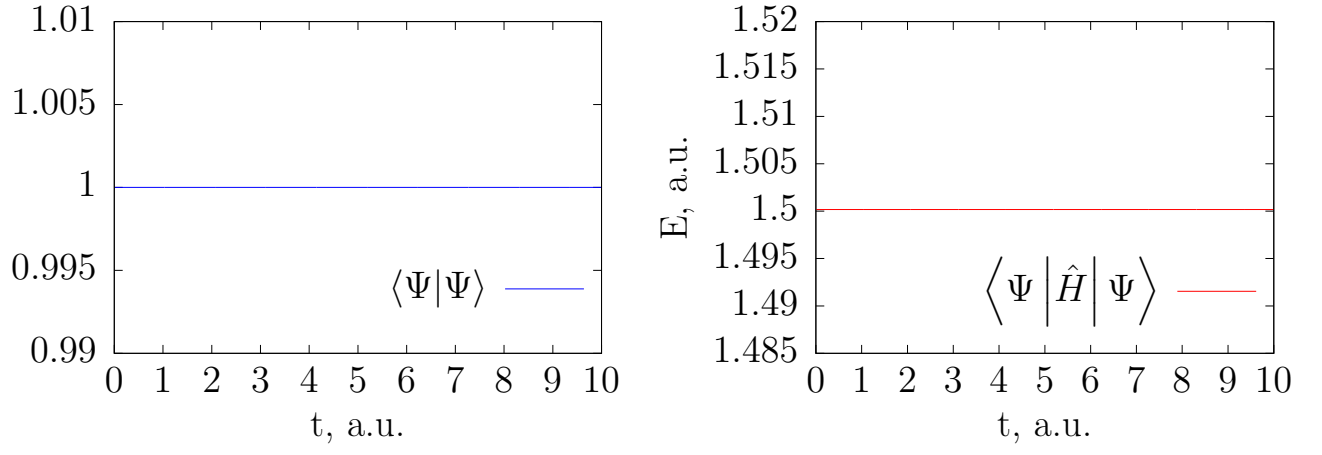


Рис. 6: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

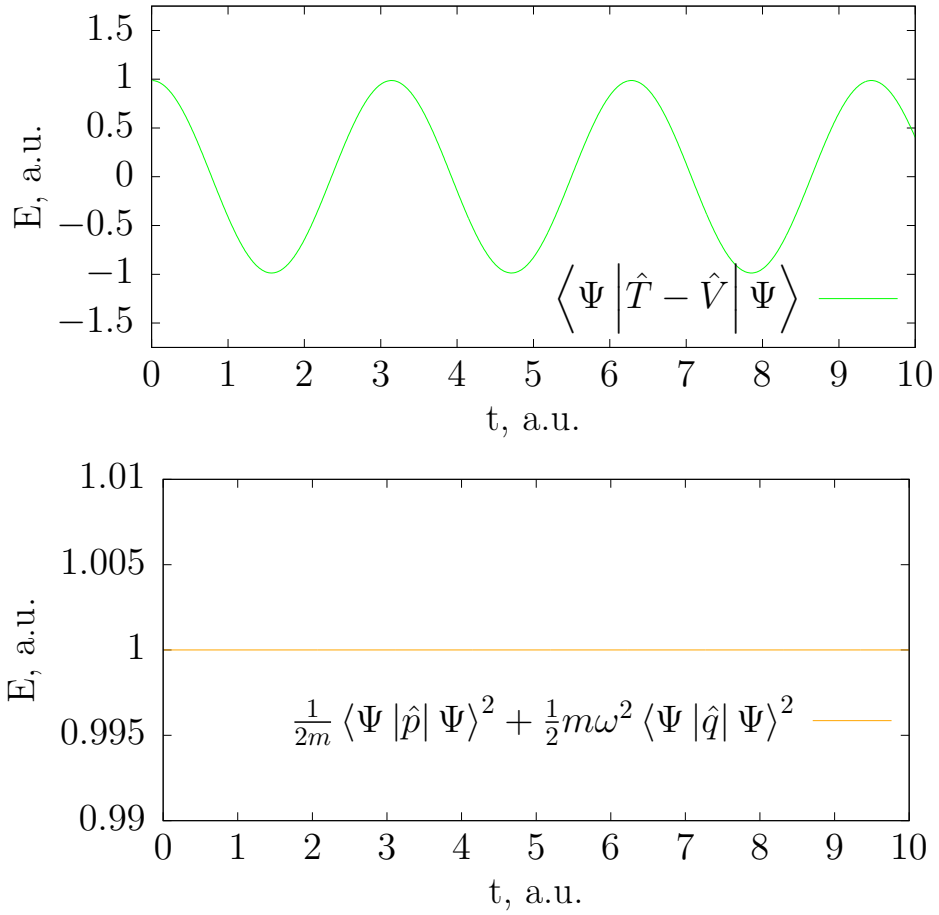


Рис. 7: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа и классической энергии полной ВФ от времени

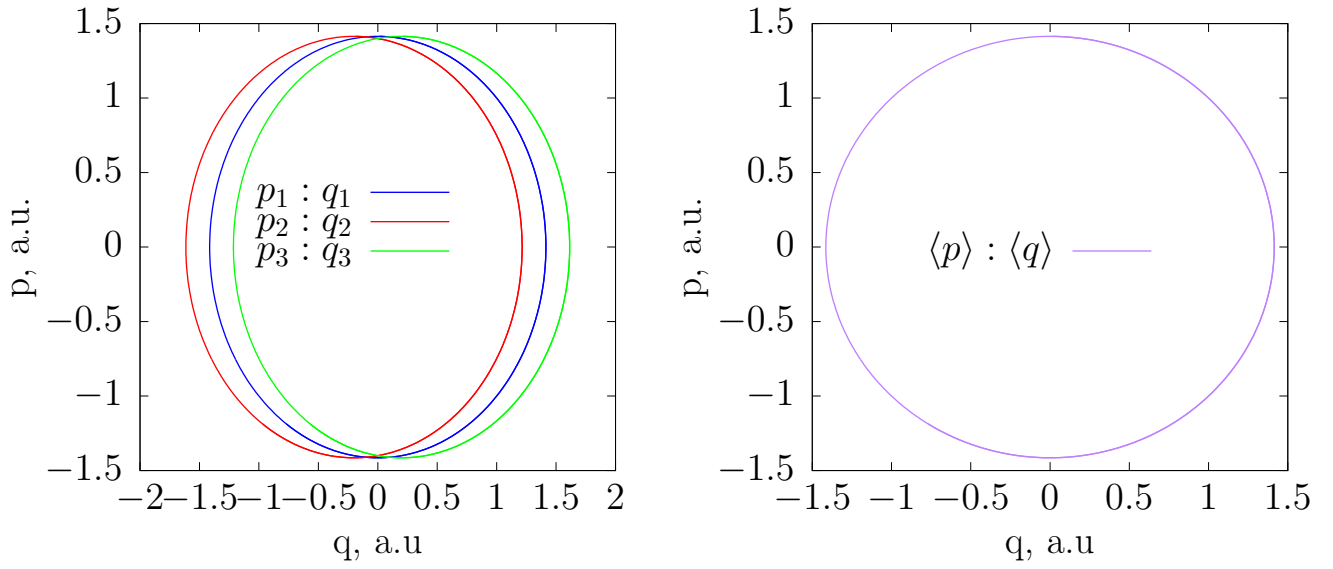


Рис. 8: Фазовый портрет базисных функций

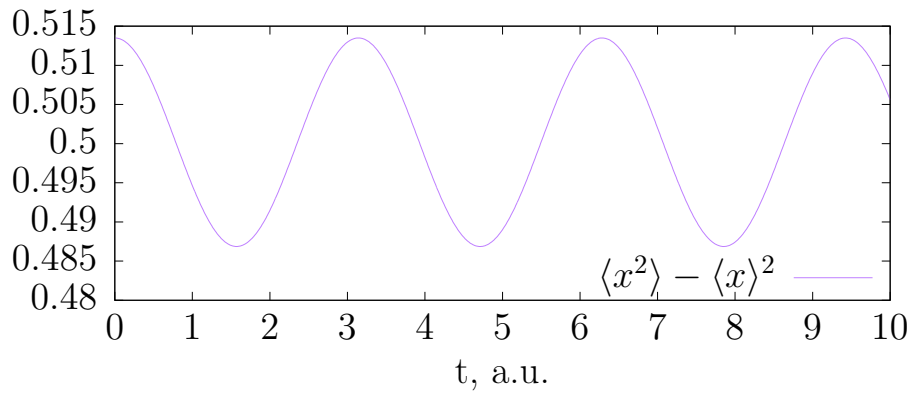


Рис. 9: Зависимость дисперсии ВФ от времени

1.3 Средний импульс — локальное усреднение градиента

В качестве третьей альтернативы попробуем использовать одинаковый импульс, изменение которого будем рассчитывать с помощью локально усредненного градиента: при усреднении градиент будет браться в центрах базисных функций:

$$|g_k\rangle = N \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(-\frac{1}{2} m \omega (x - q_k)^2 + i \langle p \rangle x \right) \right) = \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left(-\frac{1}{2} m \omega x^2 + \xi_k x + \eta_k \right) \right)$$

$$\xi_k = m \omega x + i \langle p \rangle, \quad \eta_k = \hbar \ln N - \frac{1}{2} m \omega q_k^2$$

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_k &= m \omega \dot{q}_k + i \langle \dot{p} \rangle = \omega \langle p \rangle - i \left\langle \frac{dV}{dx} \right|_q \rangle = \omega \langle p \rangle - i \sum_{m,k} D_m^* D_k \left\langle g_m \left| \frac{dV}{dx} \right|_{q_k} \right| g_k \rangle = \\ &= \omega \langle p \rangle - i m \omega^2 \sum_{m,k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} q_k = \omega \langle p \rangle - i m \omega^2 \{x\} \\ \dot{\eta}_k &= -m \omega q_k \dot{q}_k = -\omega q_k \langle p \rangle \end{aligned}$$

При этом элементы матрицы Гамильтониана не изменятся:

$$\mathbb{H}_{mk} = \left(\frac{\hbar \omega}{2} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_m q_k + \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + \frac{i}{2} \omega \langle p \rangle (q_m - q_k) \right) \mathbb{S}_{mk}$$

А в матрице τ изменится только форма расчета среднего значения координаты:

$$\begin{aligned} \tau_{mk} &= \langle g_m | \dot{g}_k \rangle = \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(\dot{\eta}_k + \dot{\xi}_k \frac{q_k + q_m}{2} \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(-\omega q_k \langle p \rangle + (\omega \langle p \rangle - i m \omega^2 \{x\}) \frac{q_k + q_m}{2} \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathbb{S}_{mk} \left(\omega \langle p \rangle \frac{q_m - q_k}{2} - i m \omega^2 \{x\} \frac{q_m + q_k}{2} \right) \end{aligned}$$

При объединении видим, что выражения по форме совпадают с таковым, полученным при полном усреднении:

$$\mathbb{H}_{mk} - i \hbar \tau_{mk} = \left(\frac{\hbar \omega}{2} + \frac{1}{2} m \omega^2 (q_m q_k - \{x\} (q_m + q_k)) + \frac{\langle p \rangle^2}{2m} \right)$$

Снова видим, что $\mathbb{H} - i \hbar \tau$ действительна.

$$\dot{\vec{D}} = -\frac{i}{\hbar} \mathbb{S}^{-1} (\mathbb{H} - i \hbar \tau) \vec{D}$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \vec{D}^\dagger \dot{\mathcal{S}} \vec{D}, \quad \frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = 2 \text{Re}(\vec{D}^\dagger \dot{\mathcal{S}} \dot{\vec{D}}) + \vec{D}^\dagger \dot{\mathcal{S}} \dot{\vec{D}}$$

Первое слагаемое снова равно 0, изучим $\dot{\mathcal{S}}$:

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{S}}_{mk} &= \langle \dot{g}_m | g_k \rangle + \langle g_m | \dot{g}_k \rangle = \frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_{mk} \left(\dot{\eta}_m^* + \dot{\eta}_k + (\dot{\xi}_m^* + \dot{\xi}_k) \frac{q_m + q_k}{2} \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_{mk} (-\omega \langle p \rangle (q_m + q_k) + \omega \langle p \rangle (q_m + q_k)) = 0 \end{aligned}$$

Таким образом, данная динамика сохраняет норму.

Базис — три волновых пакета: $\{q_k\}_{k=1}^3 = \{0, \pm 0.2\}$, $\langle p \rangle = \sqrt{2}$. Частота потенциала = частоте пакета = 1

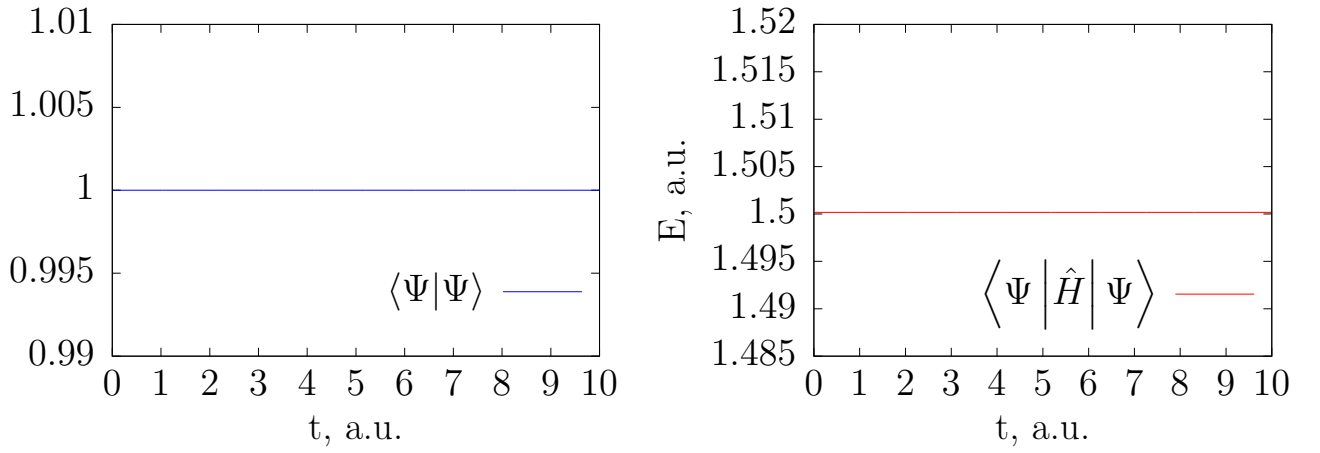


Рис. 10: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

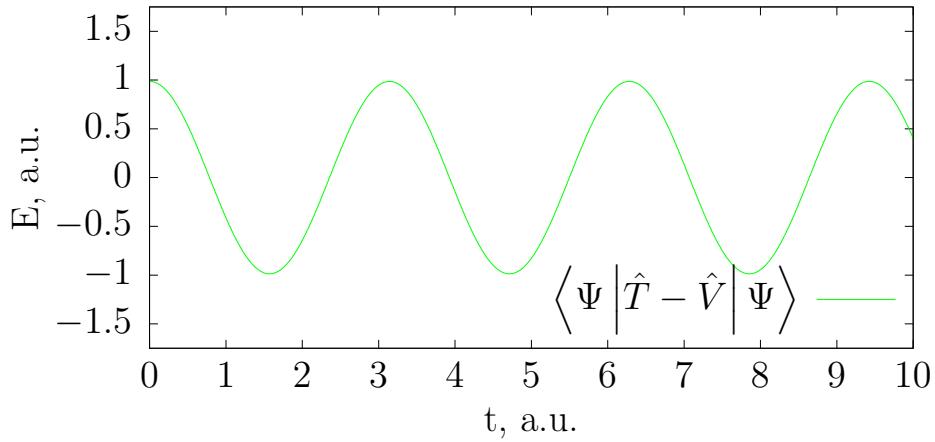


Рис. 11: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

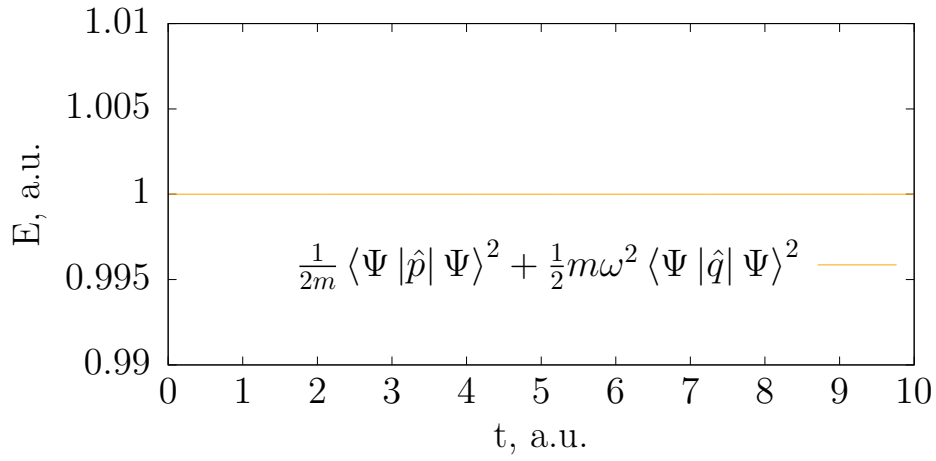


Рис. 12: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

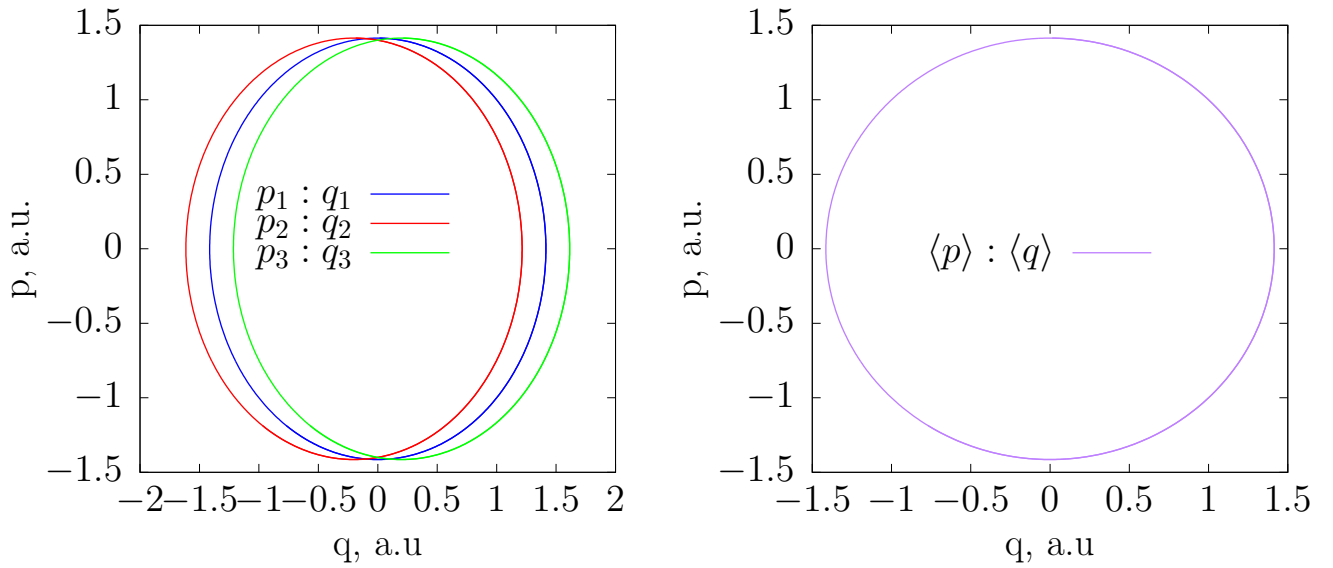


Рис. 13: Фазовый портрет базисных функций

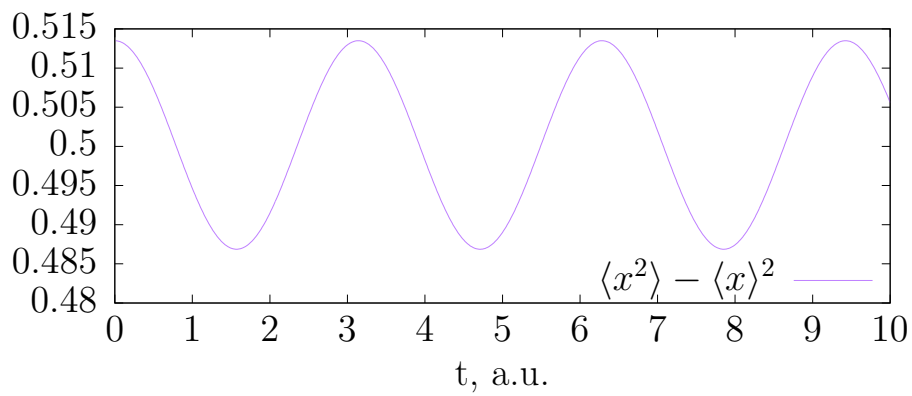


Рис. 14: Зависимость дисперсии ВФ от времени

2 Эксперименты с частотой потенциала

Пусть частота потенциала \neq частота пакета. При сохранении параметров базисных функций возьмем частоту гармонического осциллятора равной 0.1

2.1 Нет усреднения

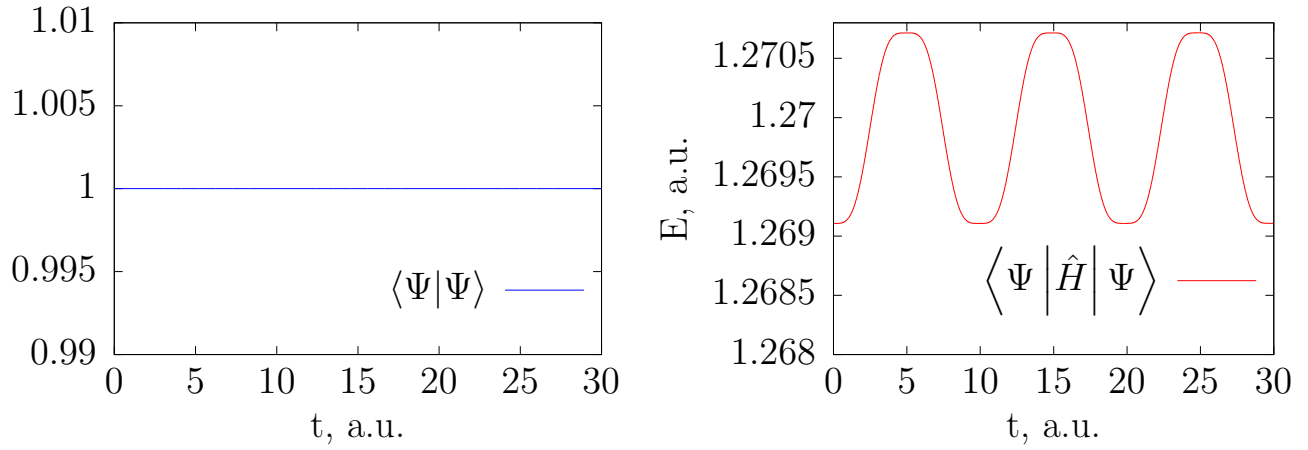


Рис. 15: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

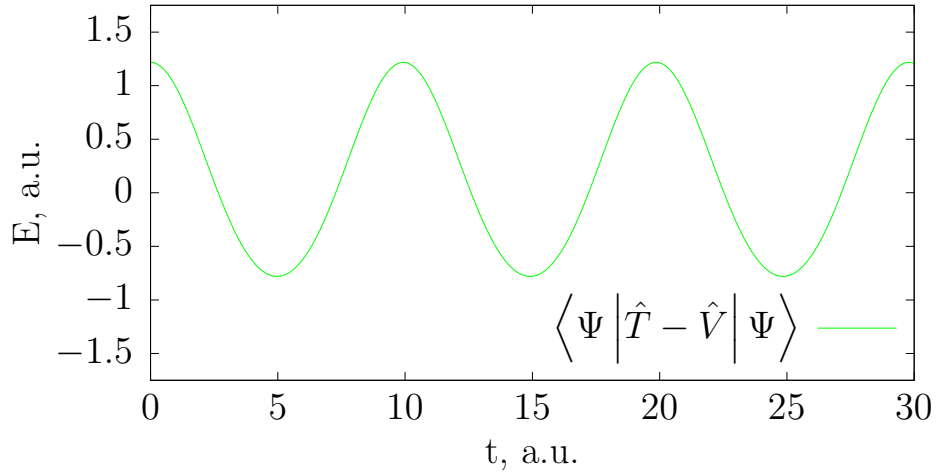


Рис. 16: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

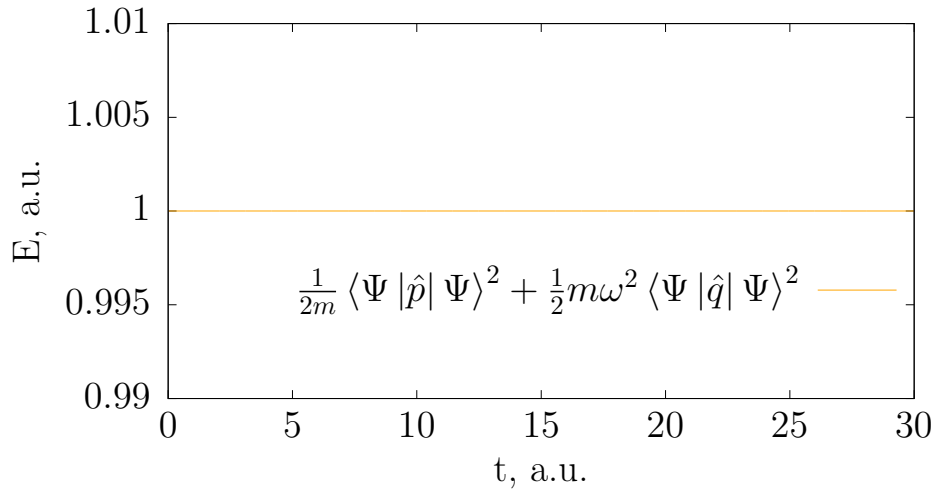


Рис. 17: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

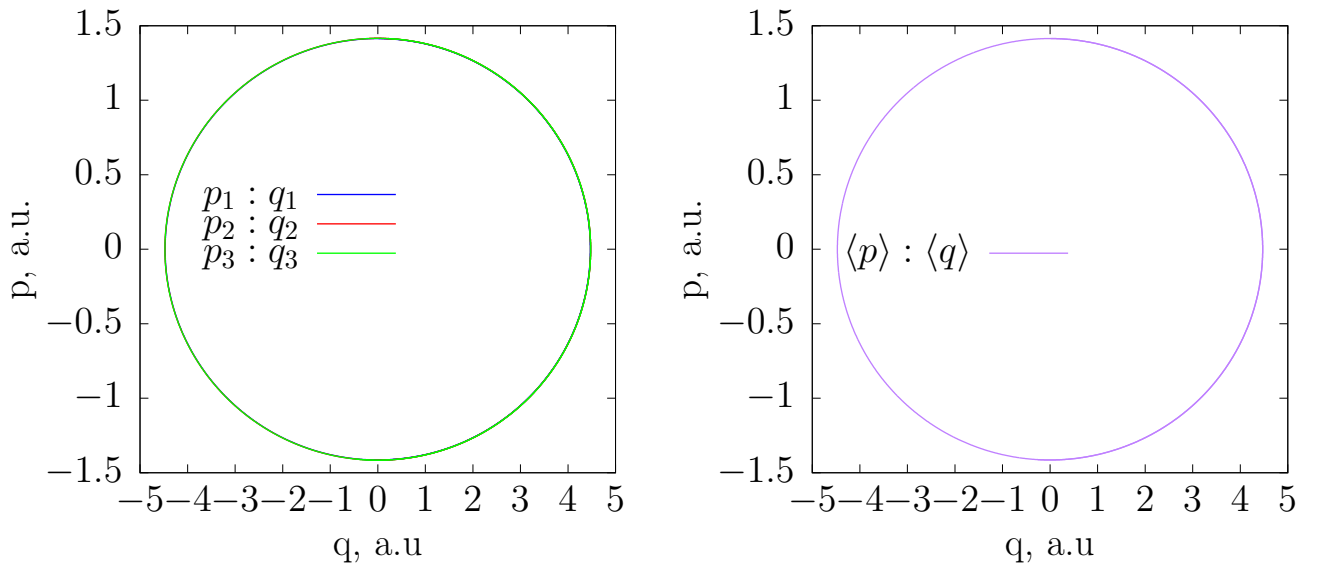


Рис. 18: Фазовый портрет базисных функций

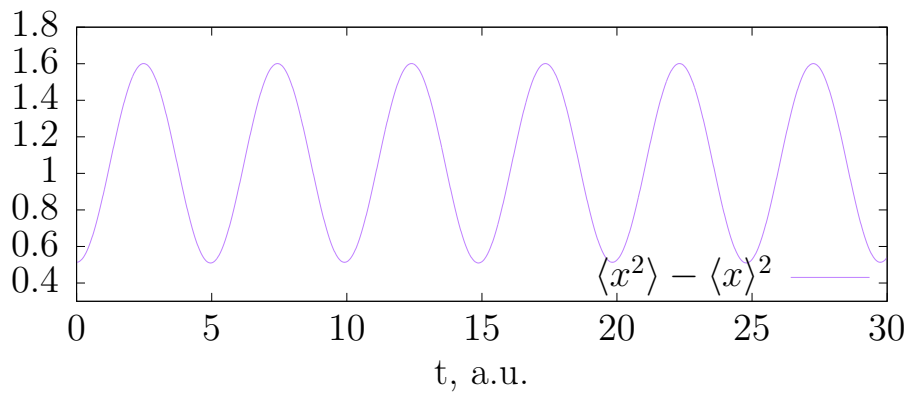


Рис. 19: Зависимость дисперсии ВФ от времени

2.2 Усреднение импульса — полное усреднение градиента

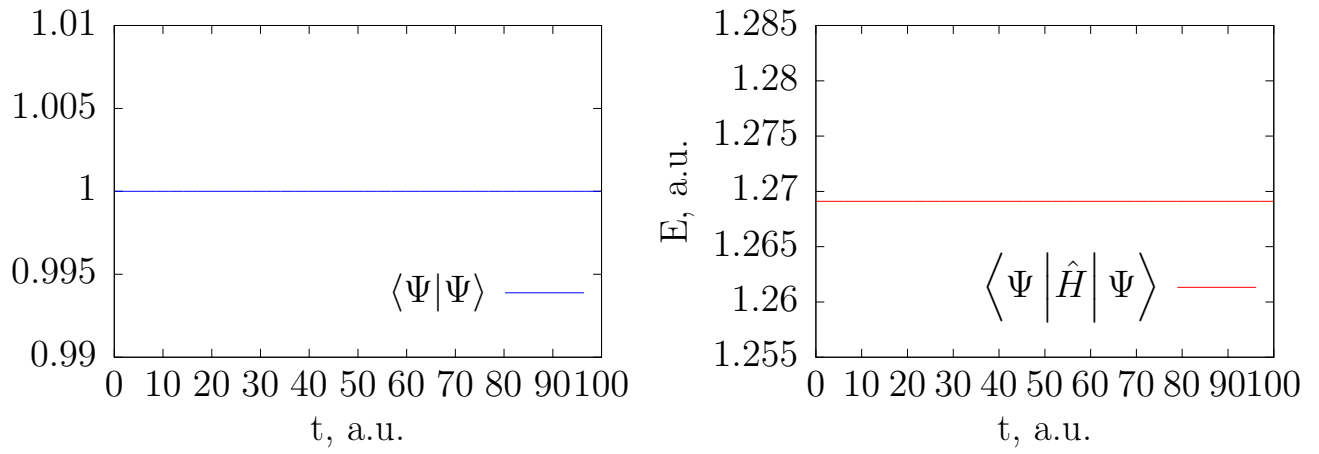


Рис. 20: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

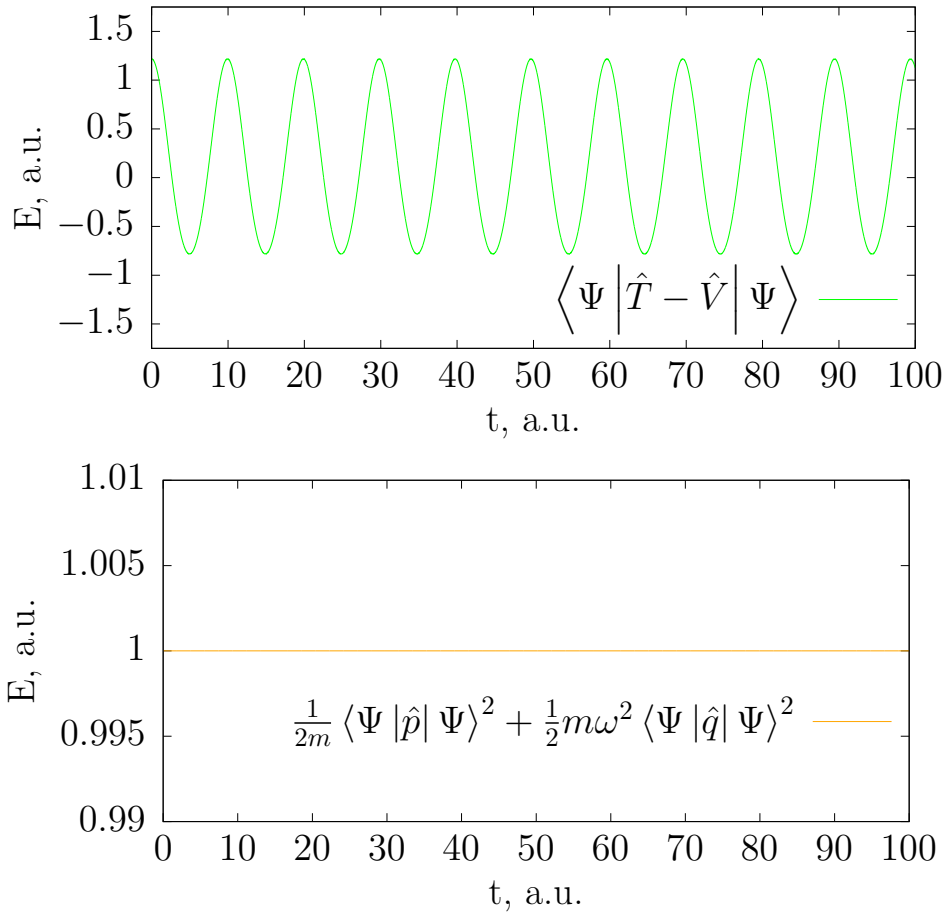


Рис. 21: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа и классической энергии полной ВФ от времени

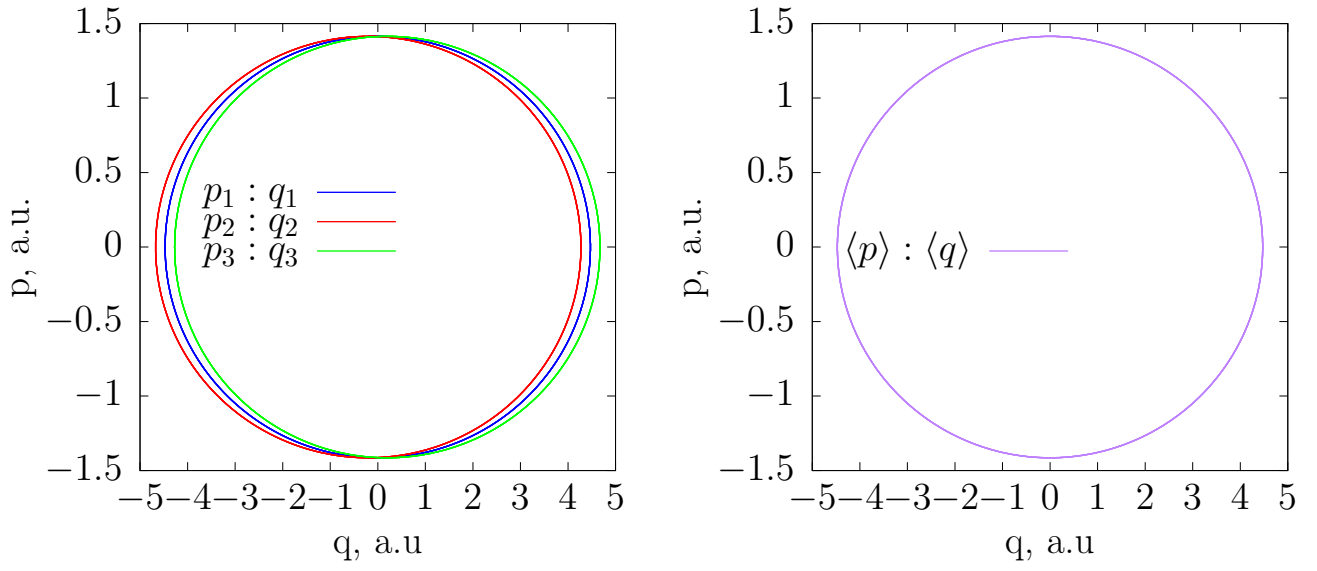


Рис. 22: Фазовый портрет базисных функций

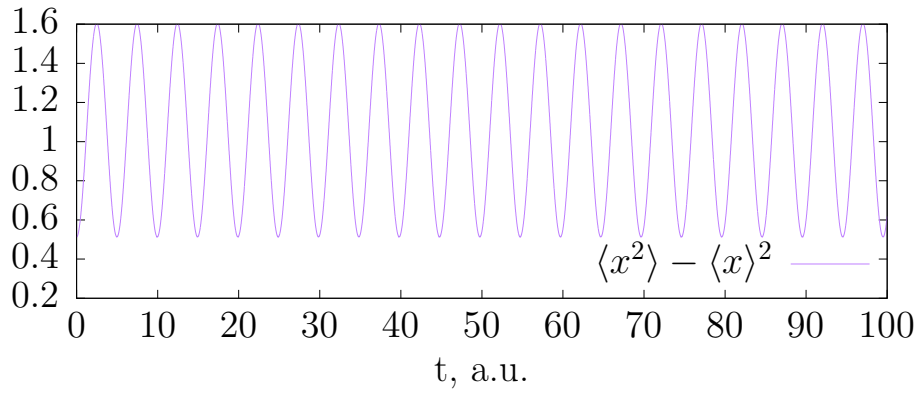


Рис. 23: Зависимость дисперсии ВФ от времени

2.3 Средний импульс — локальное усреднение градиента

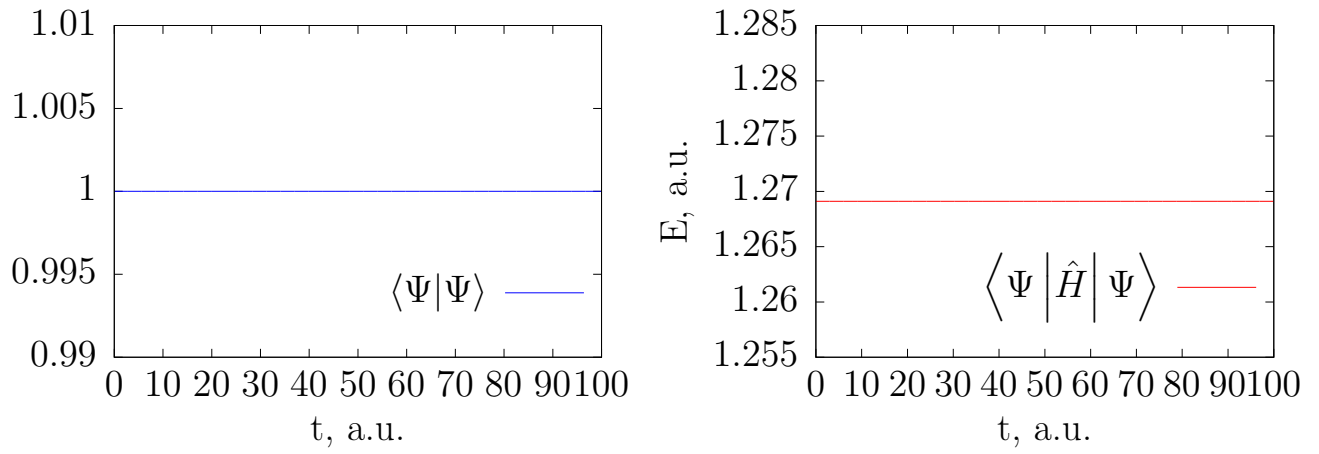


Рис. 24: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

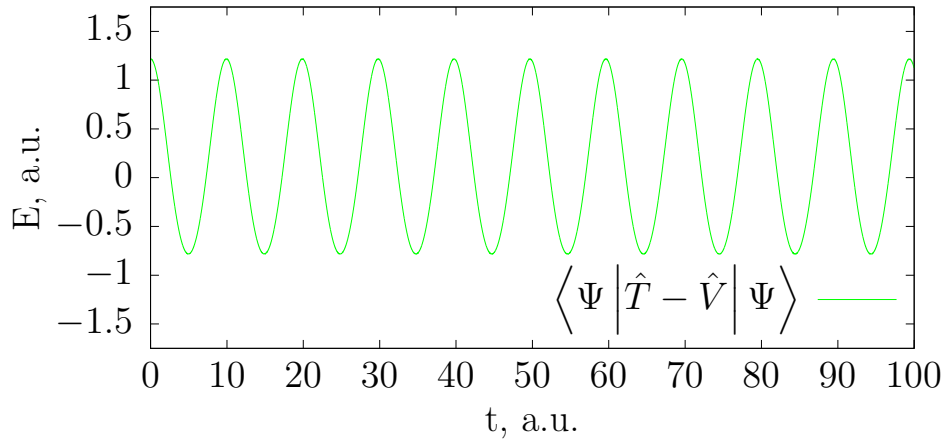


Рис. 25: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

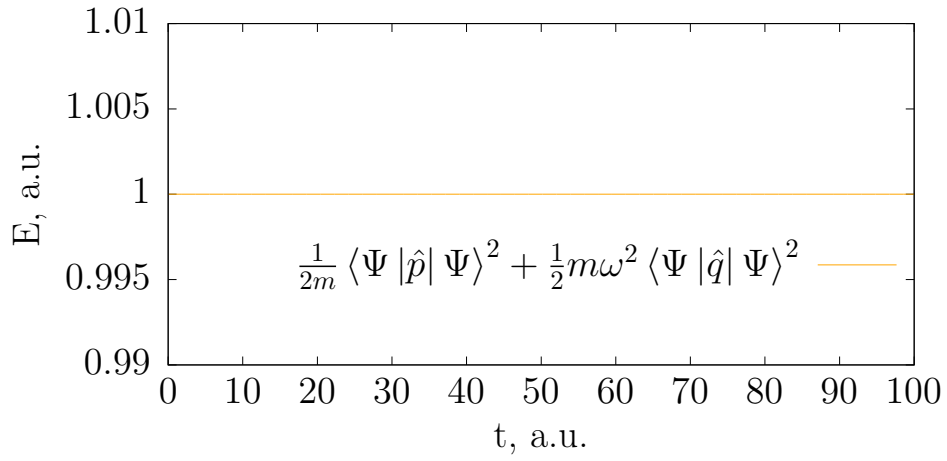


Рис. 26: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

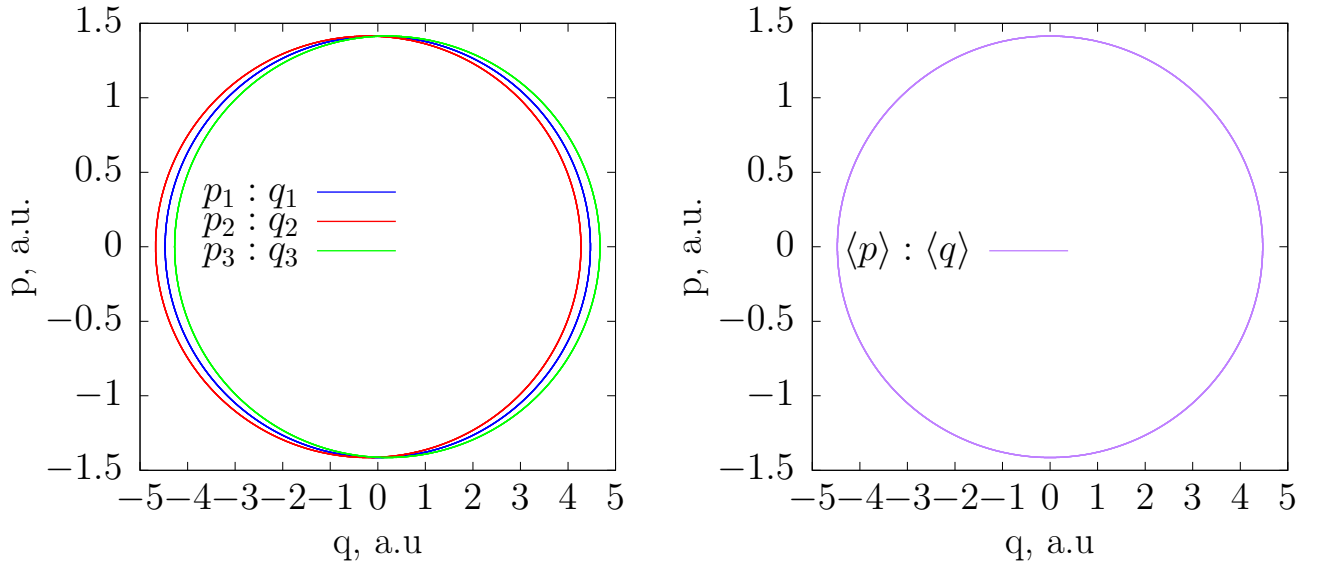


Рис. 27: Фазовый портрет базисных функций

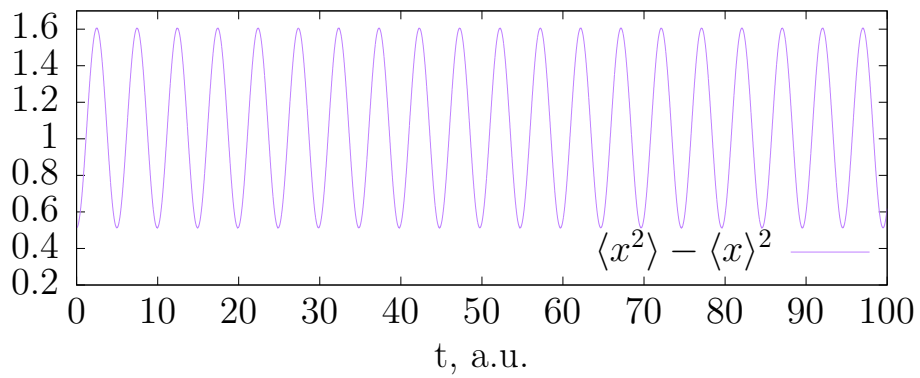


Рис. 28: Зависимость дисперсии ВФ от времени