1 Гармонический осциллятор

1.1 Усреднение импульса — полное усреднение градиента

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

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

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

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

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

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

$$= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(\frac{1}{4}m\omega(q_m+q_k)^2 - \frac{1}{2}m\omega(q_m^2+q_k^2)\right)\right) =$$

$$= \exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}(q_m-q_k)^2\right)$$

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

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

$$\tau_{mk} = \langle g_m|\dot{g}_k\rangle = \frac{1}{\hbar}\left(\dot{\eta}_k + \dot{\xi}_k\frac{(q_k+q_m)}{2}\right)\$_{mk} =$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\dot{\mathbb{S}}_{mk} = \langle\dot{g}_m|g_k\rangle + \langle g_m|\dot{g}_k\rangle =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(\dot{\eta}_m^* + \dot{\eta}_k + \frac{1}{2}(\dot{\xi}_m^* + \dot{\xi}_k)(q_m+q_k)\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega\langle p\rangle(q_m+q_k) + \omega\langle p\rangle(q_m+q_k)\right) = 0$$

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

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

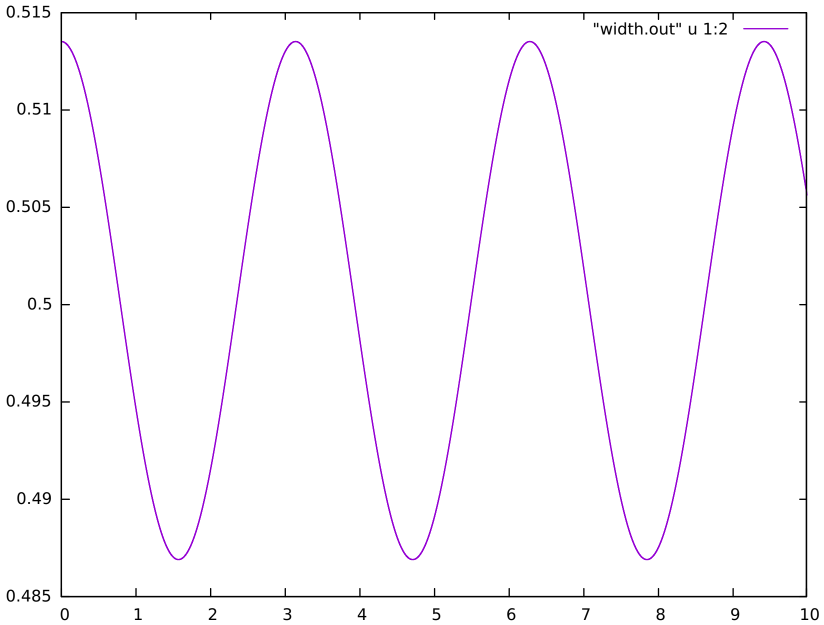

Рис. 1: Зависимость дисперсии кординаты $(\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2)$ от времени

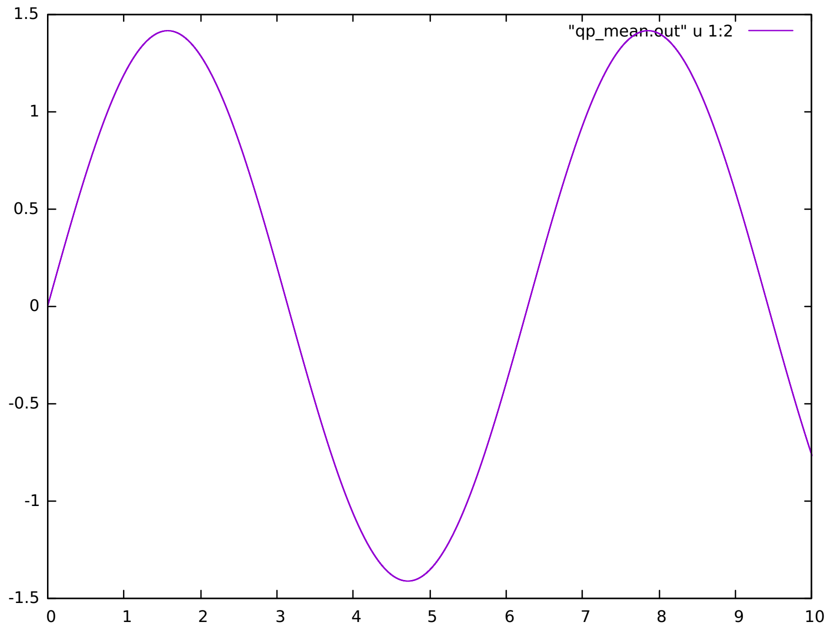

Рис. 2: Зависимость математического ожидания координаты ($\langle x \rangle$) от времени

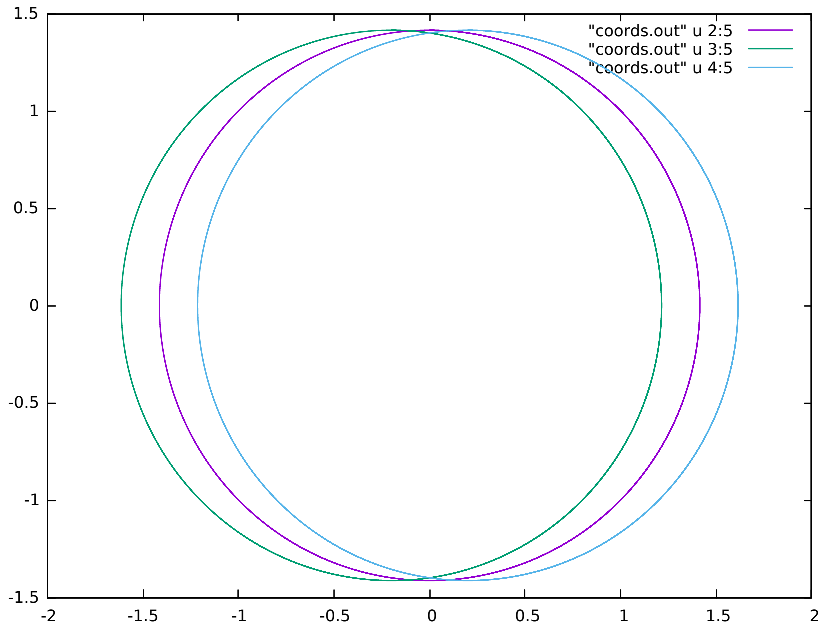

Рис. 3: Фазовые профили базисных функций

1.2 Средний импульс — локальное усреднение градиента

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

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

$$\dot{\xi}_k = m\omega\dot{q}_k + i\langle\dot{p}\rangle = \omega\langle p\rangle - i\left\langle \left.\frac{dV}{dx}\right|_q\right\rangle = \omega\langle p\rangle - i\sum_{m,k} D_m^* D_k \left\langle g_m \left| \left.\frac{dV}{dx}\right|_{q_k} \right| g_k\right\rangle =$$

$$= \omega\langle p\rangle - im\omega^2\sum_{m.k} D_m^* D_k \mathbb{S}_{mk} q_k = \omega\langle p\rangle - im\omega^2\{x\}$$

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

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

$$\tau_{mk} = \langle g_m|\dot{g}_k\rangle = \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(\dot{\eta}_k + \dot{\xi}_k\frac{q_k+q_m}{2}\right) =$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega\langle p\rangle(q_m+q_k) + \omega\langle p\rangle(q_m+q_k)\right) = 0$$

Таким образом, данная динамика сохраняет норму.

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

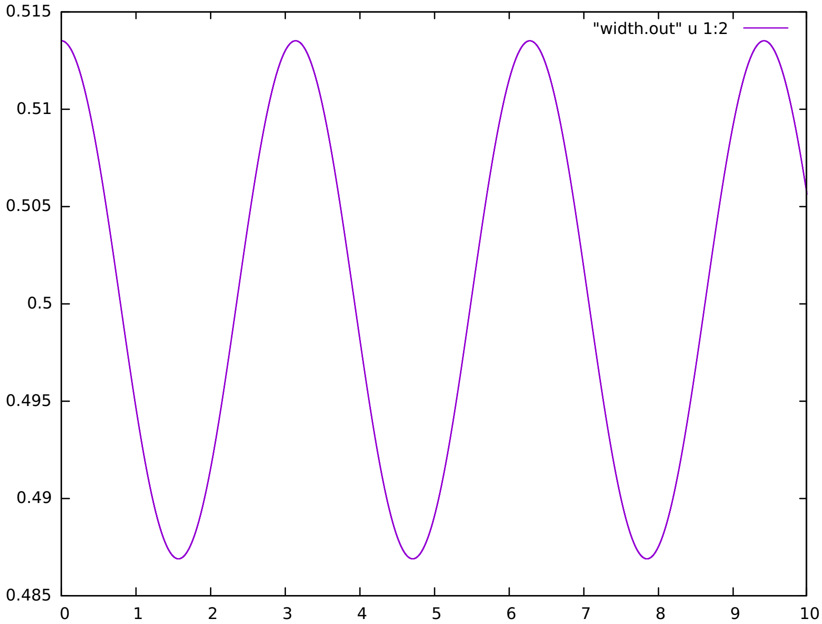

Рис. 4: Зависимость дисперсии кординаты $(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)$ от времени

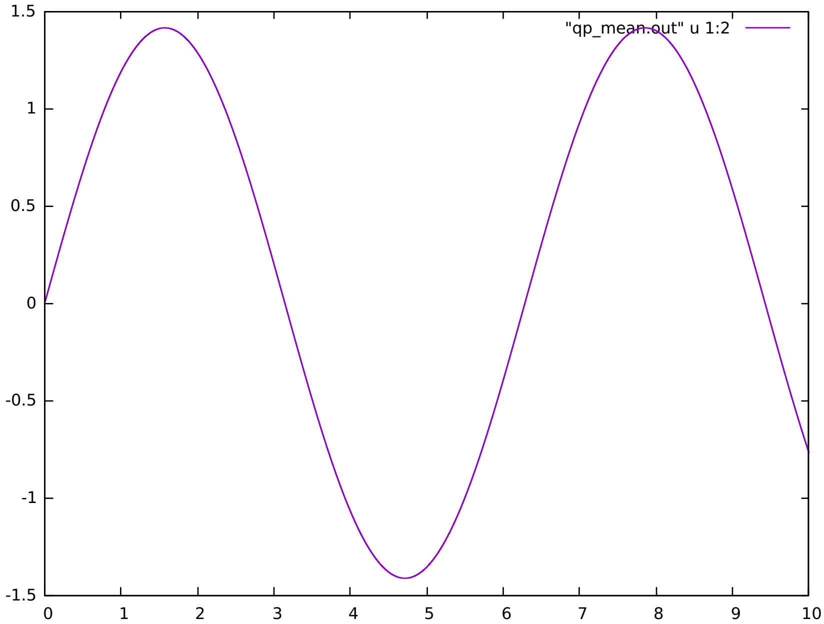

Рис. 5: Зависимость математического ожидания координаты $(\langle x \rangle)$ от времени

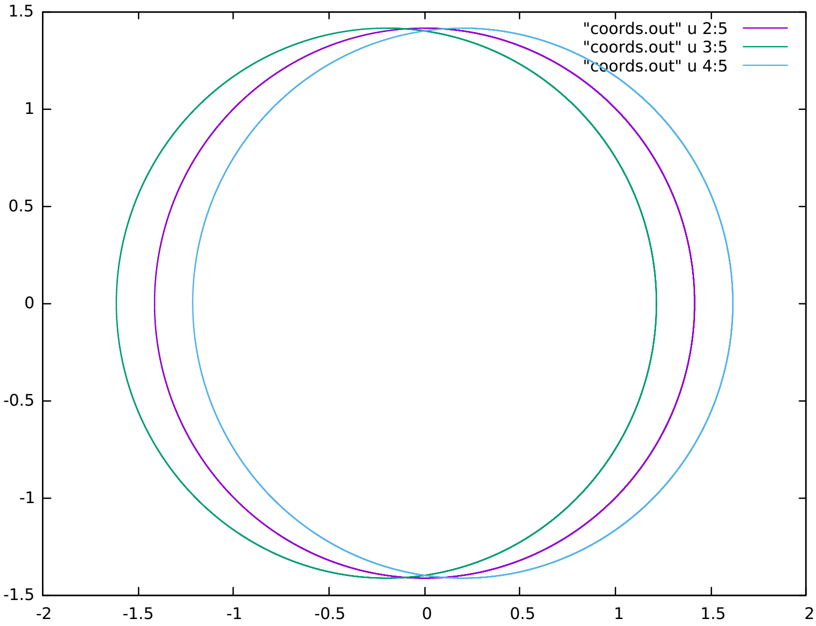

Рис. 6: Фазовые профили базисных функций