1 Гармонический осциллятор

1.1 Нет усреднения

Рассмотрим динамику Гауссовых волновых пакетов в гармоническом потенциале:

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

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

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

Для удобства проведем замену переменных:

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

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

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

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

Получим явный вид некоторых матричных элементов:

1. элементы матрицы перекрывания:

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

$$= \int\exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega\left[x - \frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega}\right]^2 + \frac{(\xi_m^* + \xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k\right)\right)dx =$$

$$= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(\frac{(\xi_m^* + \xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k\right)\right)\int\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}y^2\right)dy =$$

$$= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(\frac{(\xi_m^* + \xi_k)^2}{4m\omega} + \eta_m^* + \eta_k\right)\right)\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}$$

$$\mathbb{S}_{kk} = N^2\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} = 1 \ \Rightarrow\ N = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

2. элементы матрицы M_1 — первых моментов:

$$\langle g_m |x| g_k\rangle = \int x \cdot \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k\right)\right) dx =$$

$$= \hbar \int \frac{\partial}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)} \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k\right)\right) dx$$

$$= \hbar \frac{\partial \mathbb{S}_{mk}}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)} = \frac{(\xi_m^* + \xi_k)}{2m\omega}\mathbb{S}_{mk}$$

3. элементы матрицы M_2 — вторых моментов:

$$\left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle = \int x^2 \cdot \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + (\xi_m^* + \xi_k)x + \eta_m^* + \eta_k\right)\right) dx =$$

$$= \hbar^2 \frac{\partial^2 \mathbb{S}_{mk}}{\partial(\xi_m^* + \xi_k)^2} = \frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{\xi_m^* + \xi_k}{2m\omega}\right)^2$$

4. элементы матрицы τ:

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

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega q_k p_k - \frac{i\xi_k^2}{2m} - \frac{i\xi_m^*\xi_k}{2m}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(-\omega q_k p_k - \frac{i}{2m}(m^2\omega^2 q_k^2 - p_k^2 + 2im\omega q_k p_k) - \frac{i\xi_m^*\xi_k}{2m}\right) =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\mathbb{S}_{mk}\left(iL_k - \frac{i\xi_m^*\xi_k}{2m}\right)$$

5. элементы матрицы Гамильтониана:

$$\mathbb{H}_{mk} = \left\langle g_m \left|\hat{T}\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\langle g_m \left|\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\langle g_m \left|\frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial x}(-m\omega x + \xi_k)\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\langle g_m|g_k\rangle - \frac{1}{2m}\left\langle g_m \left|(-m\omega x + \xi_k)^2\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= \left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m}\right)\langle g_m|g_k\rangle + \omega\xi_k \langle g_m |x| g_k\rangle - \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2 \left\langle g_m \left|x^2\right| g_k\right\rangle =$$

$$= \left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m}\right) + \omega\xi_k \frac{(\xi_m^* + \xi_k)}{2m\omega}\right)\langle g_m|g_k\rangle = \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\xi_m^*\xi_k}{2m}\right)\langle g_m|g_k\rangle$$

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

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

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

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

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

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:

$$L = \vec{D}^\dagger\left(\mathbb{T} - \mathbb{V}\right)\vec{D} = \sum_{m,k}D^*_m D_k\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left\langle g_m\left|\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right|g_k\right\rangle - \frac{1}{2}m\omega^2\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle\right) =$$

$$= \sum_{m,k}D^*_m D_k\left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m}\right)\mathbb{S}_{mk} + \omega\xi_k\left\langle g_m\left|x\right|g_k\right\rangle - \right.$$

$$\left.-\frac{1}{2}m\omega^2\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle - \frac{1}{2}m\omega^2\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle\right)$$

$$= \sum_{m,k}D^*_m D_k\left(\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m}\right)\mathbb{S}_{mk} + \omega\xi_k\left\langle g_m\left|x\right|g_k\right\rangle - m\omega^2\left\langle g_m\left|x^2\right|g_k\right\rangle\right) =$$

$$= \sum_{m,k}D^*_m D_k\left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\xi_k^2}{2m} + \frac{\omega\xi_k(\xi^*_m + \xi_k)}{2m\omega} - m\omega^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{\xi^*_m + \xi_k}{2m\omega}\right)^2\right)\right)\mathbb{S}_{mk}$$

$$= \sum_{m,k}D^*_m D_k\mathbb{S}_{mk}\left(\frac{2\xi_k\xi^*_m - (\xi^*_m + \xi_k)^2}{4m}\right) = -\sum_{m,k}D^*_m D_k\mathbb{S}_{mk}\frac{(\xi^*_m)^2 + \xi_k^2}{4m} =$$

$$= -\frac{1}{4m}\left(\sum_{m,k}D^*_m D_k\mathbb{S}_{mk}\xi_k^2 + \sum_{m,k}D^*_m D_k\mathbb{S}_{mk}(\xi_m^2)^*\right) =$$

$$= -\frac{1}{4m}\left(\sum_{m,k}D^*_m D_k\mathbb{S}_{mk}\xi_k^2 + \sum_{m,k}(D_m D^*_k\mathbb{S}_{km}\xi_m^2)^*\right) =$$

$$= -\frac{1}{2m}\sum_{m,k} Re(D_m^* D_k \$_{mk}\xi_k^2) = -\frac{1}{2m}\sum_{m,k}\left(m^2\omega^2 q_k^2 - p_k^2\right) Re(D_m^* \$_{mk} D_k) =$$

$$= \sum_{m,k}\left(\frac{p_k^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q_k^2\right) Re(D_m^* \$_{mk} D_k) =$$

$$= \sum_{m,k} L_k Re\left(D_m^*(0) D_k(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t (L_m - L_k)\, dt'\right) \$_{mk}\right) =$$

$$= \sum_{m,k} L_k \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^t (L_m - L_k)\, dt'\right) Re(D_m^*(0) \$_{mk} D_k(0))$$

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

$$D(t) = D(0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right) dt\right)$$

$$\begin{cases}\dot{q} = p/m \\ \dot{p} = -m\omega^2 q\end{cases}$$

$$\ddot{q} = \frac{\dot{p}}{m} = -\omega^2 q$$

$$q(t) = A_1 e^{i\omega t} + A_2 e^{-i\omega t}$$

$$\begin{cases}q(0) = A_1 + A_2 \\ \dot{q}(0) = p(0)/m = i\omega(A_1 - A_2)\end{cases}$$

$$\begin{cases}A_1 = \frac{1}{2}\left(q(0) - \frac{ip(0)}{m\omega}\right) \\ A_2 = \frac{1}{2}\left(q(0) + \frac{ip(0)}{m\omega}\right)\end{cases}$$

$$q(t) = \frac{1}{2}\left(\left(q(0) - \frac{ip(0)}{m\omega}\right)e^{i\omega t} + \left(q(0) + \frac{ip(0)}{m\omega}\right)e^{-i\omega t}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(q(0)\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) - \frac{ip(0)}{m\omega}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right)\right) =$$

$$= q(0)\cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega}\sin(\omega t)$$

$$p(t) = m\dot{q}(t) = -m\omega q(0)\sin(\omega t) + p(0)\cos(\omega t)$$

$$\int_0^t \frac{p(t')^2}{2m}\, dt' = \frac{1}{2m}\left(p(0)^2\int_0^t \cos^2(\omega t')\, dt' + m^2\omega^2 q(0)^2\int_0^t \sin^2(\omega t')\, dt' -\right.$$

$$\left. - m\omega q(0)p(0)\int_0^t 2\sin(\omega t)\cos(\omega t')\, dt'\right) =$$

$$= \frac{p(0)^2}{4m}\int_0^t (1+\cos(2\omega t'))\,dt' + \frac{m\omega^2 q(0)^2}{4}\int_0^t (1-\cos(2\omega t'))\,dt' -$$

$$-q(0)p(0)\int_0^t \sin(\omega t')\,d\sin(\omega t') =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{p(0)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right)t + \frac{1}{4\omega}\left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right)\sin(2\omega t) -$$

$$-\frac{q(0)p(0)}{2}\sin^2(\omega t)$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2\int_0^t q(t')^2\,dt' = \frac{1}{2}m\omega^2\left(q(0)^2\int_0^t \cos^2(\omega t')\,dt' + \frac{p(0)^2}{m^2\omega^2}\int_0^t \sin^2(\omega t')\,dt' +\right.$$

$$\left.+\frac{q(0)p(0)}{m\omega}\int_0^t 2\sin(\omega t')\cos(\omega t')\,dt'\right) =$$

$$= \frac{1}{4}m\omega^2 q(0)^2\int_0^t (1+\cos(2\omega t'))\,dt' + \frac{p(0)^2}{4m}\int_0^t (1-\cos(2\omega t'))\,dt' +$$

$$+q(0)p(0)\int_0^t \sin(\omega t')\,d\sin(\omega t') =$$

$$= \frac{t}{2}\left(\frac{p(0)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right) - \frac{1}{4\omega}\left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right)\sin(2\omega t) +$$

$$+\frac{q(0)p(0)}{2}\sin^2(\omega t)$$

$$\int_0^t \left(\frac{p(t')^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q(t')^2\right)\,dt' = \left(\frac{p(0)^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q(0)^2\right)\frac{\sin(2\omega t)}{2\omega} - q(0)p(0)\sin^2(\omega t)$$

$$D(t) = D(0)\mathrm{exp}\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar\omega t}{2} + L(0)\frac{\sin(2\omega t)}{2\omega} - q(0)p(0)\sin^2(\omega t)\right)\right) \qquad (1)$$

Проверим, что при данном способе задания динамики сохраняется норма:

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

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

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

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

$$= \left(\sum_{m,k} D_m D_k^* \langle g_k|\dot{g}_m\rangle\right)^* + \sum_{m,k} D_m^* D_k \langle g_m|\dot{g}_k\rangle =$$

$$= 2Re\left(\sum_{m,k} D_m^* D_k \tau_{mk}\right)$$

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

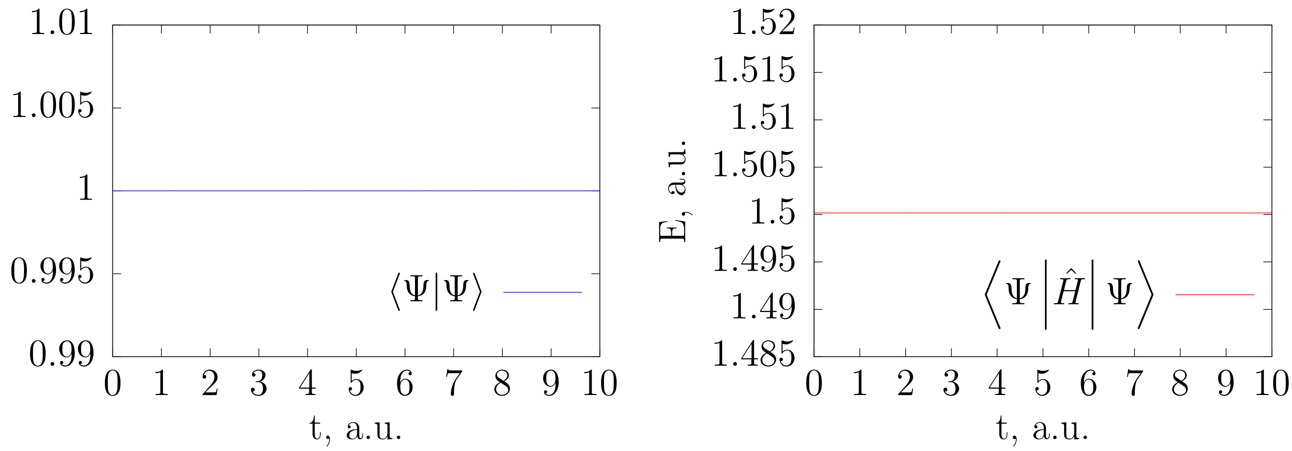

Рис. 1: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

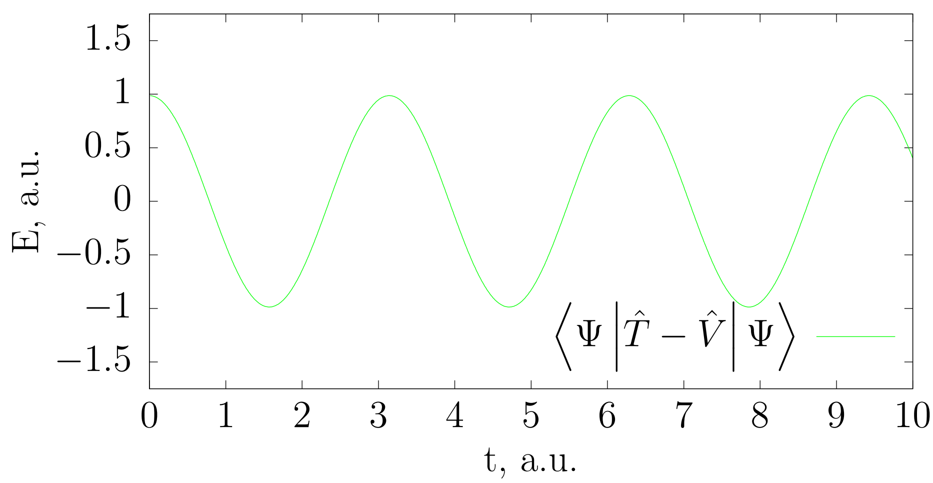

Рис. 2: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

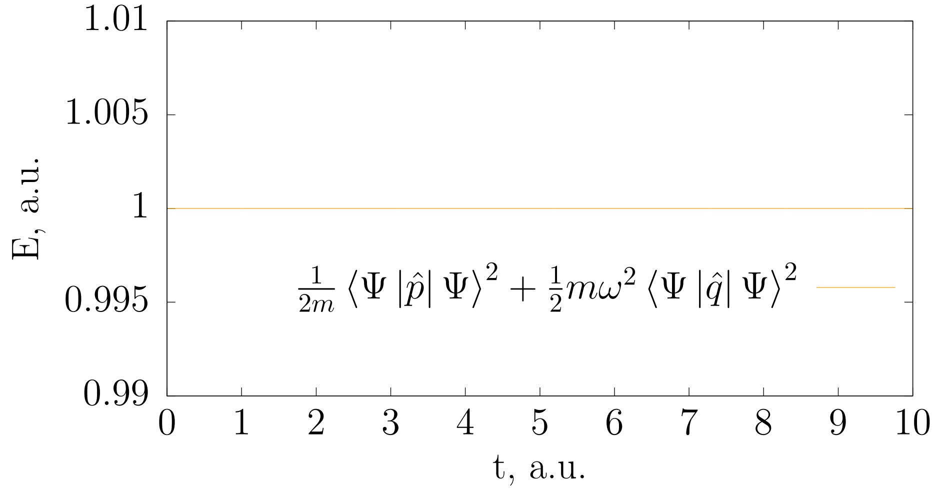

Рис. 3: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

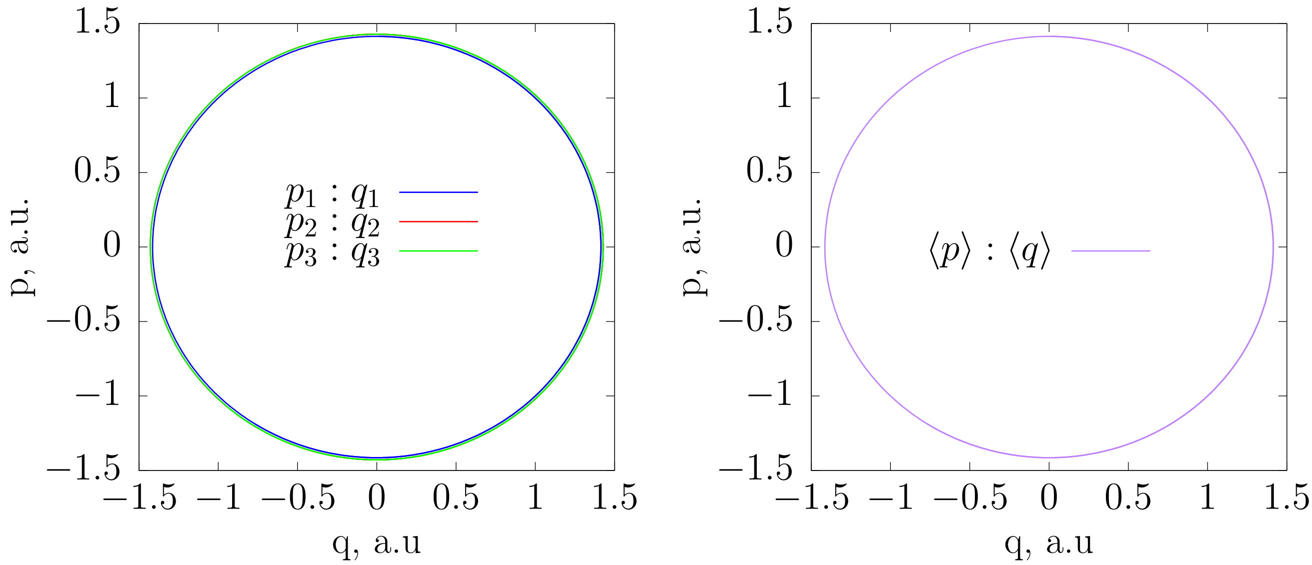

Рис. 4: Фазовый портрет базисных функций

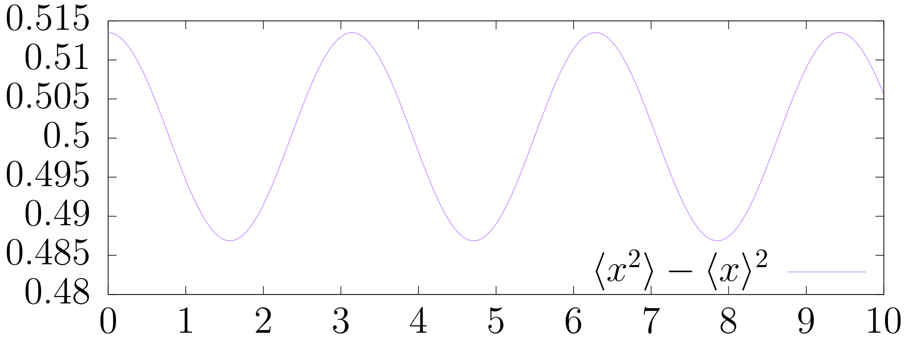

Рис. 5: Зависимость дисперсии ВФ от времени

1.2 Усреднение импульса — полное усреднение градиента

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

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

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

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

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

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

Матричные элементы примут вид:

1. матрица перекрывания:

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

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

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

2. матрица первых моментов:

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

3. матрица вторых моментов:

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

4. матрица τ:

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

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

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

5. матрица оператора Гамильтона:

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

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

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.

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

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

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

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

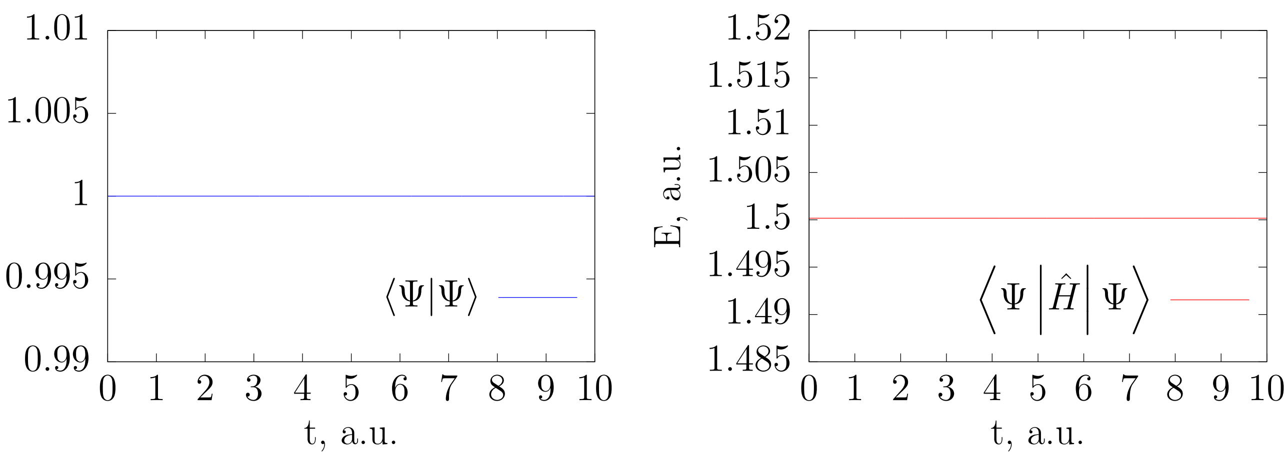

Рис. 6: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

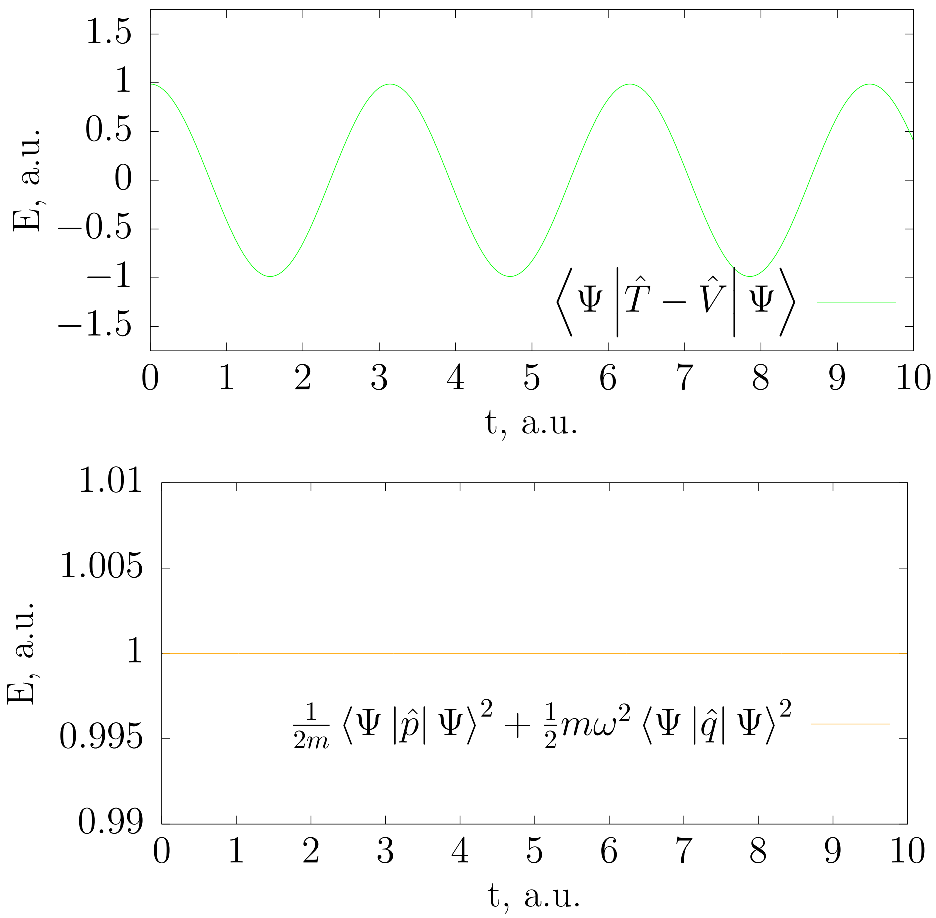

Рис. 7: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа и классической энергии полной ВФ от времени

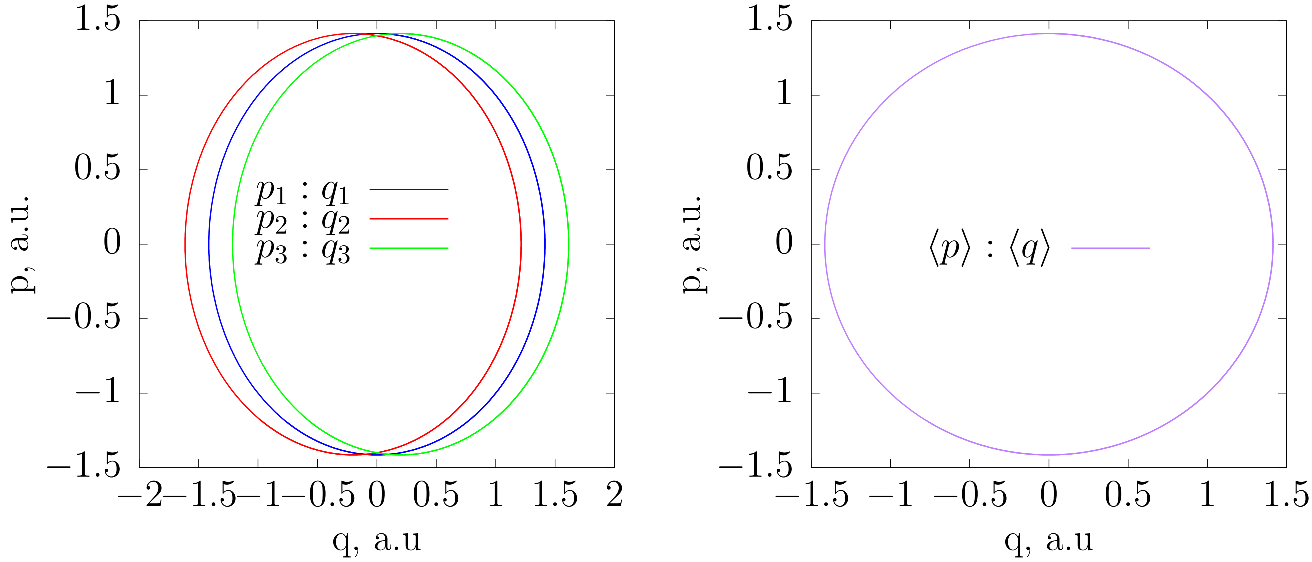

Рис. 8: Фазовый портрет базисных функций

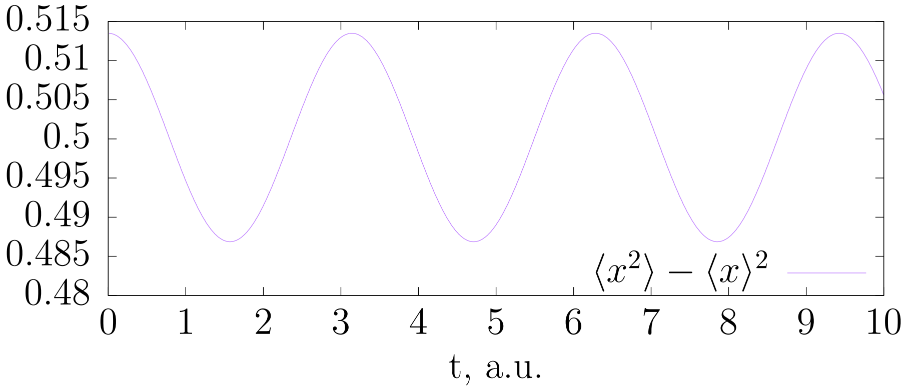

Рис. 9: Зависимость дисперсии ВФ от времени

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 пудет браться в центрах базисных функций:

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

При объединении видим, что выражении по форме совпадает 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.

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

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

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

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

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

Таким образом, данная динамика сохраняет норму.

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

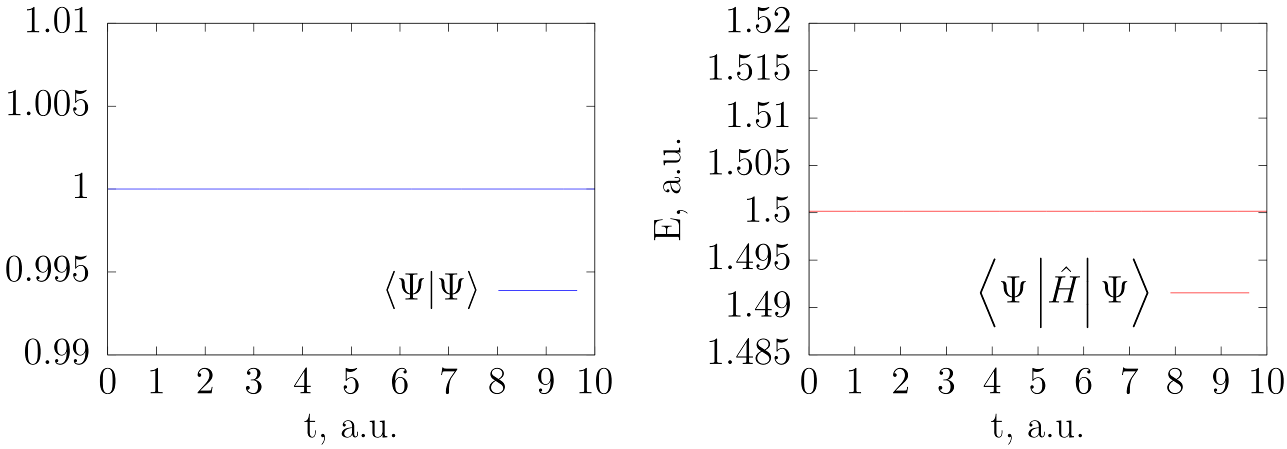

Рис. 10: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

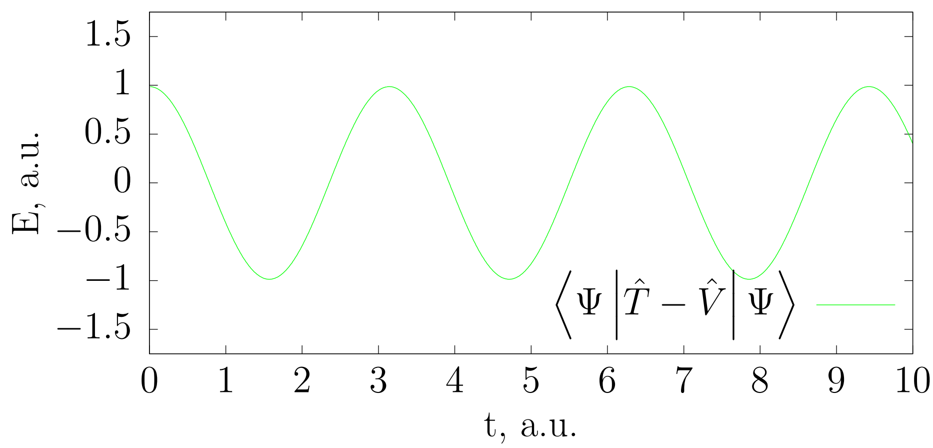

Рис. 11: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

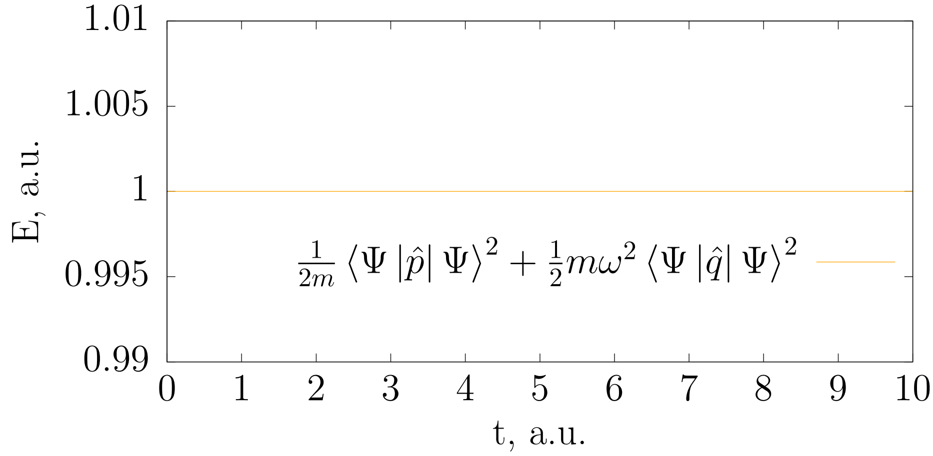

Рис. 12: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

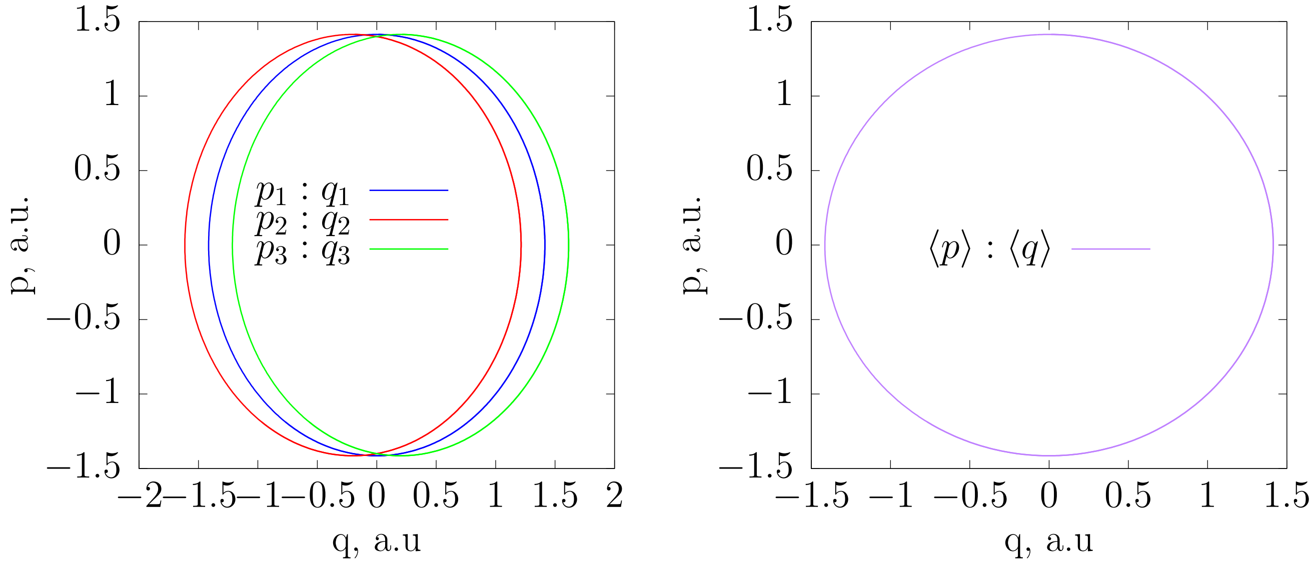

Рис. 13: Фазовый портрет базисных функций

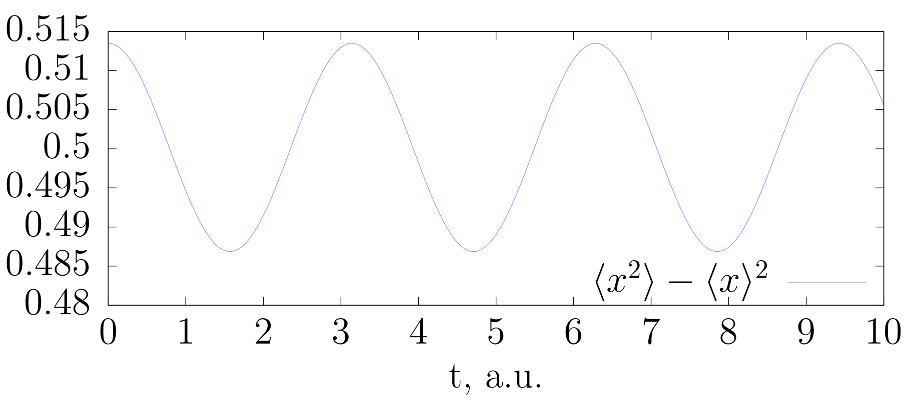

Рис. 14: Зависимость дисперсии ВФ от времени

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

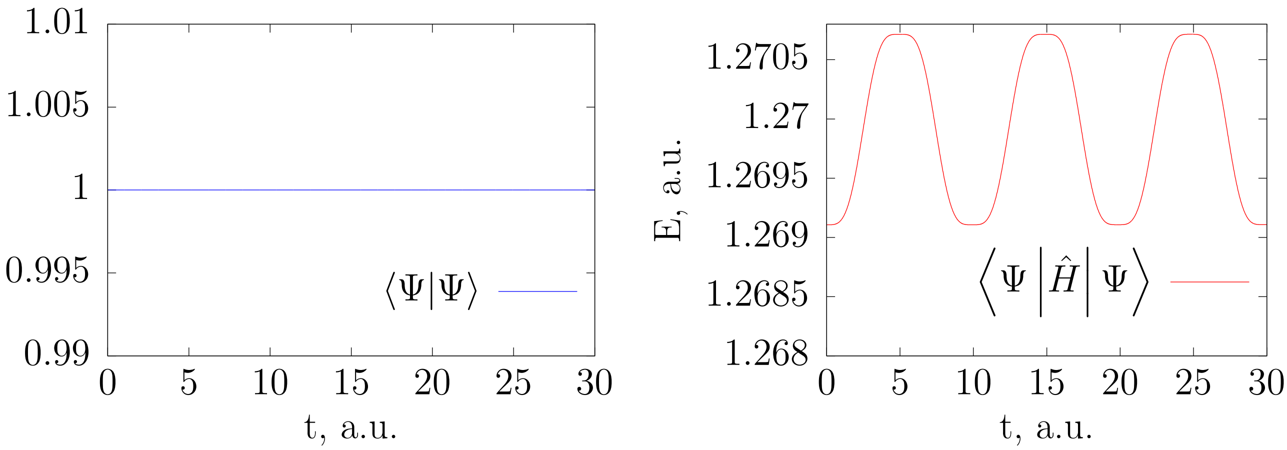

Рис. 15: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

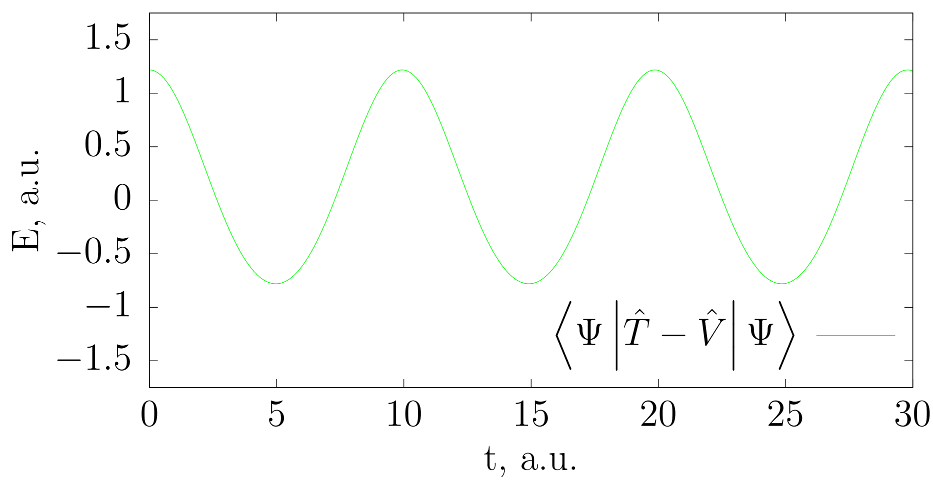

Рис. 16: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

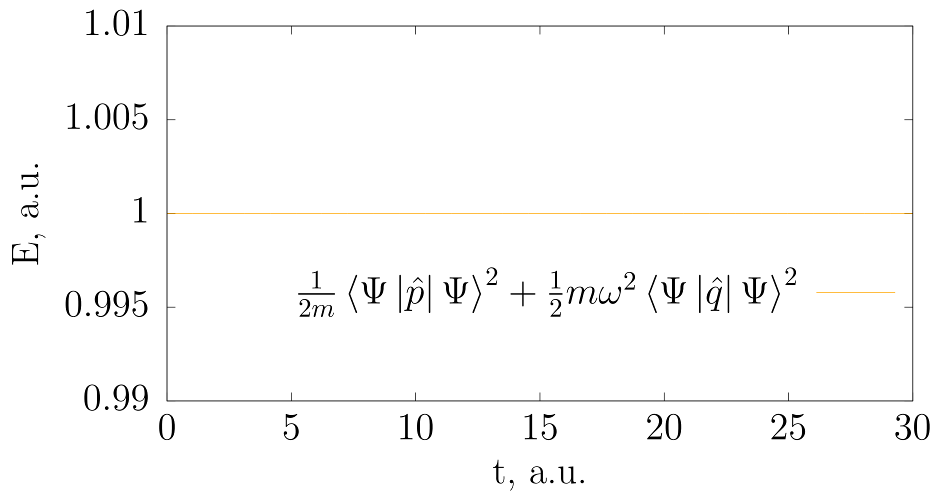

Рис. 17: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

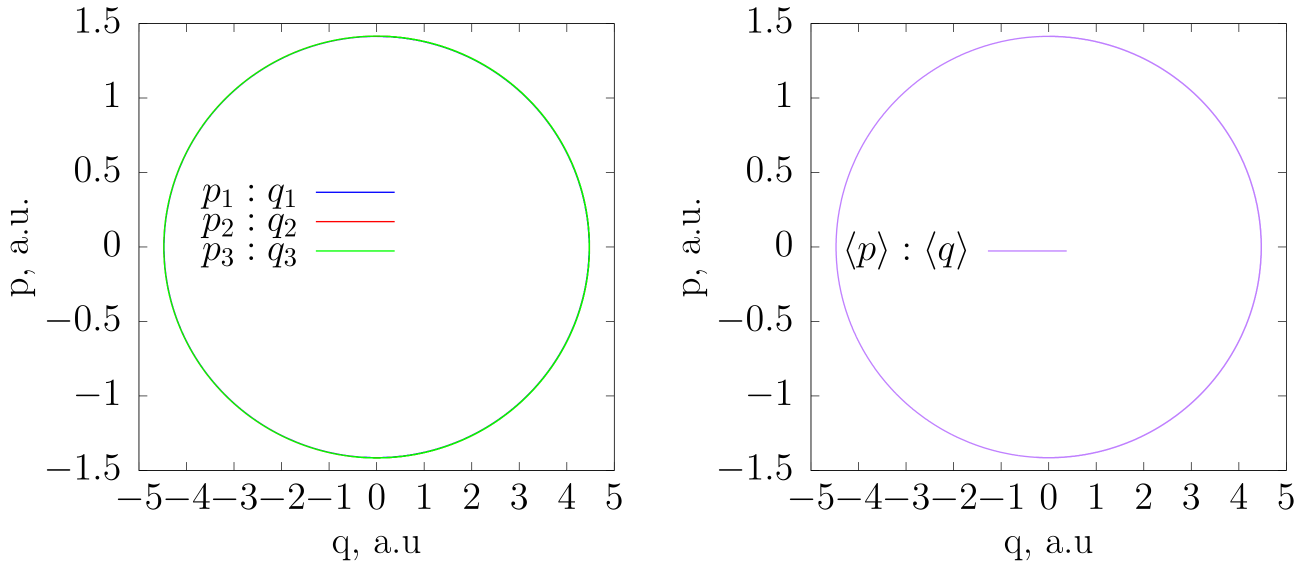

Рис. 18: Фазовый портрет базисных функций

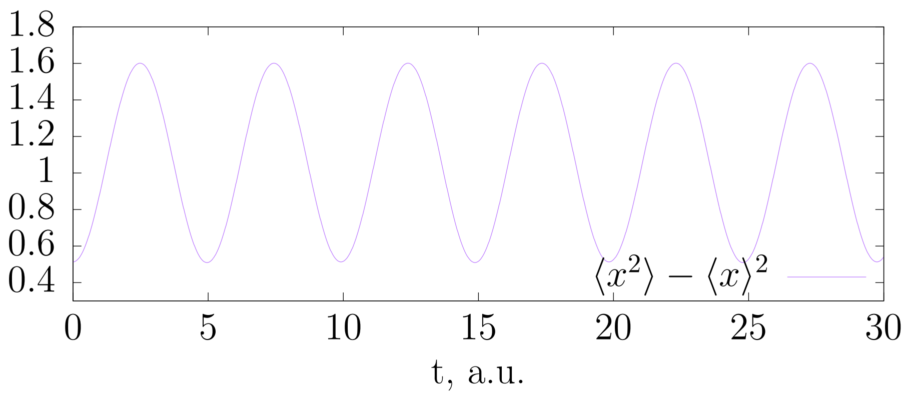

Рис. 19: Зависимость дисперсии ВФ от времени

2.2 Усреднение импульса — полное усреднение градиента

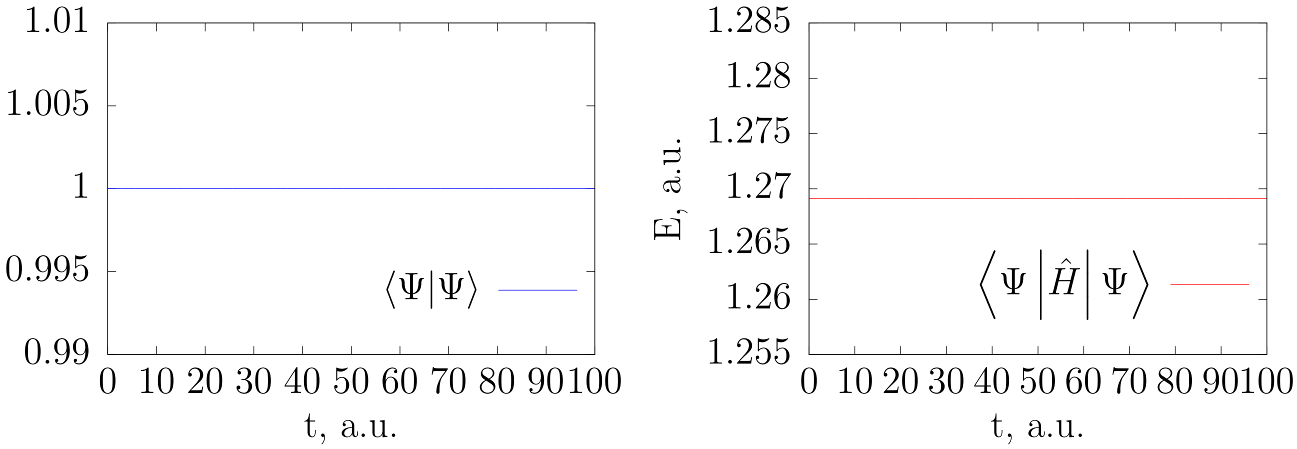

Рис. 20: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

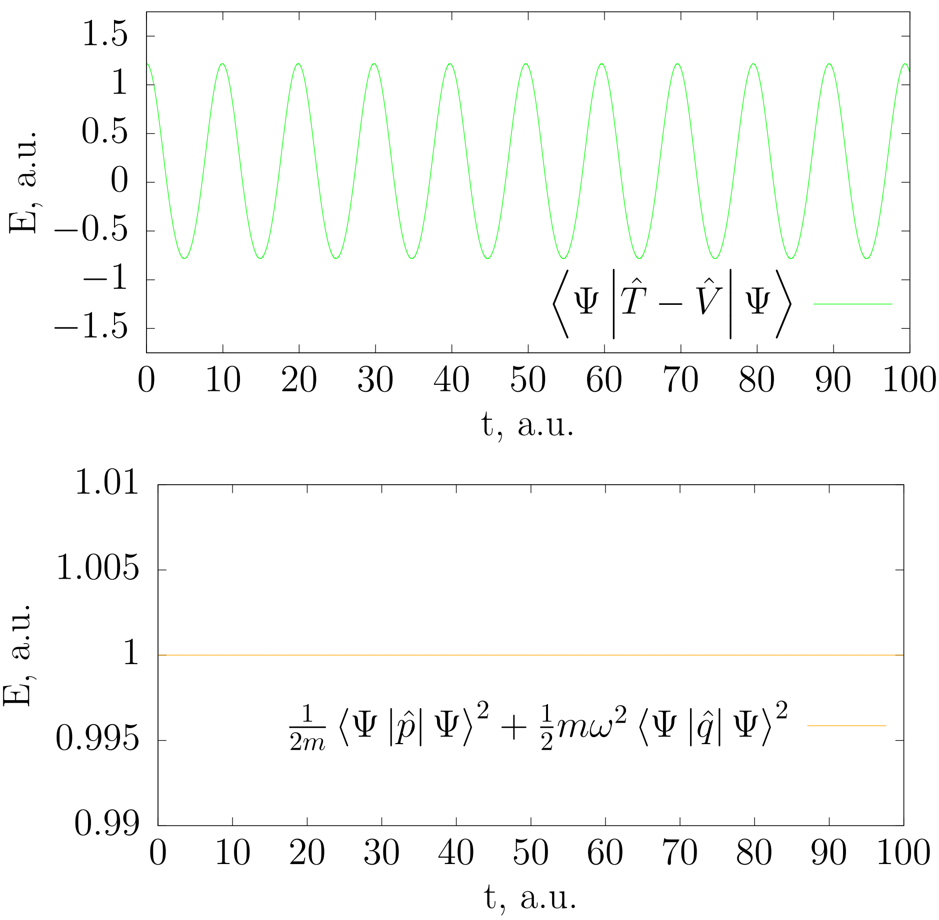

Рис. 21: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа и классической энергии полной ВФ от времени

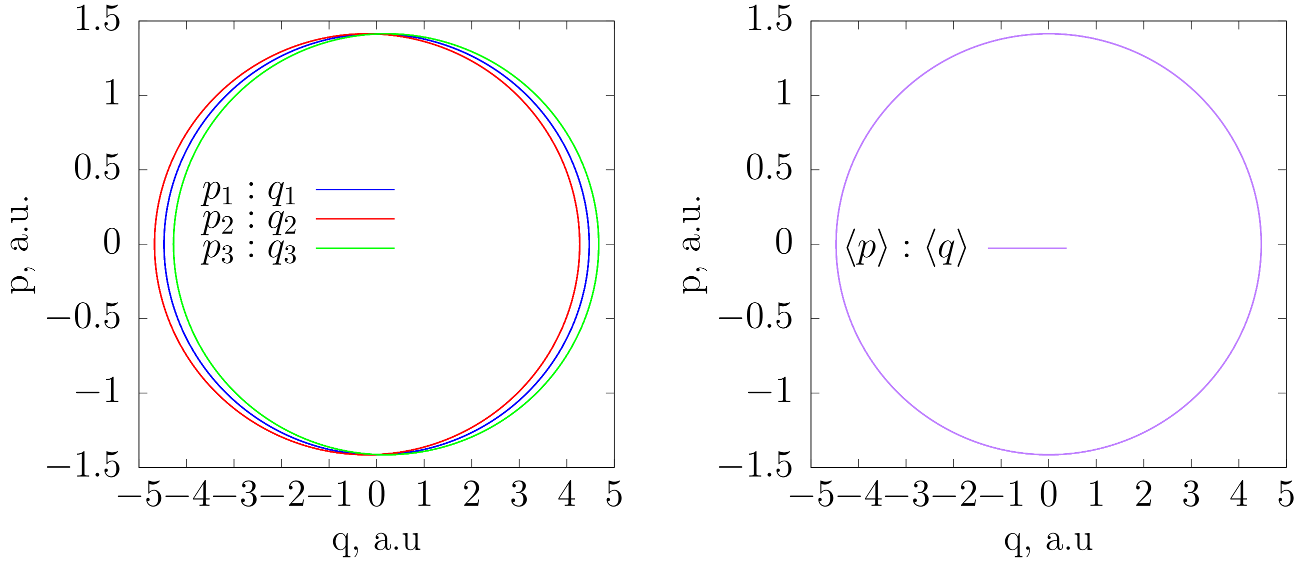

Рис. 22: Фазовый портрет базисных функций

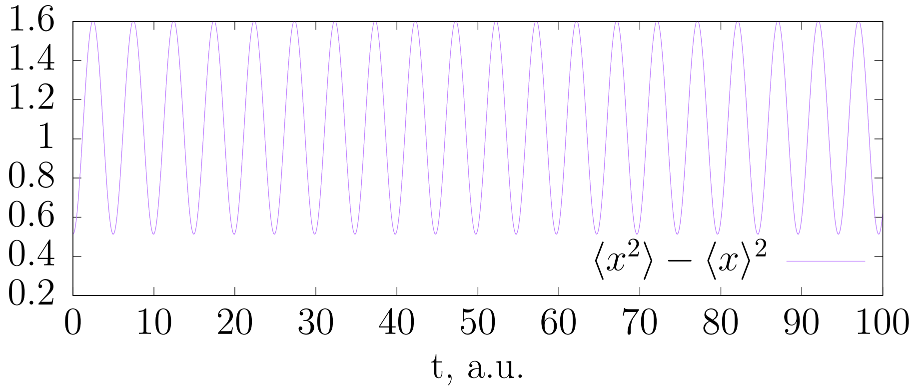

Рис. 23: Зависимость дисперсии ВФ от времени

2.3 Средний импульс — локальное усреднение градиента

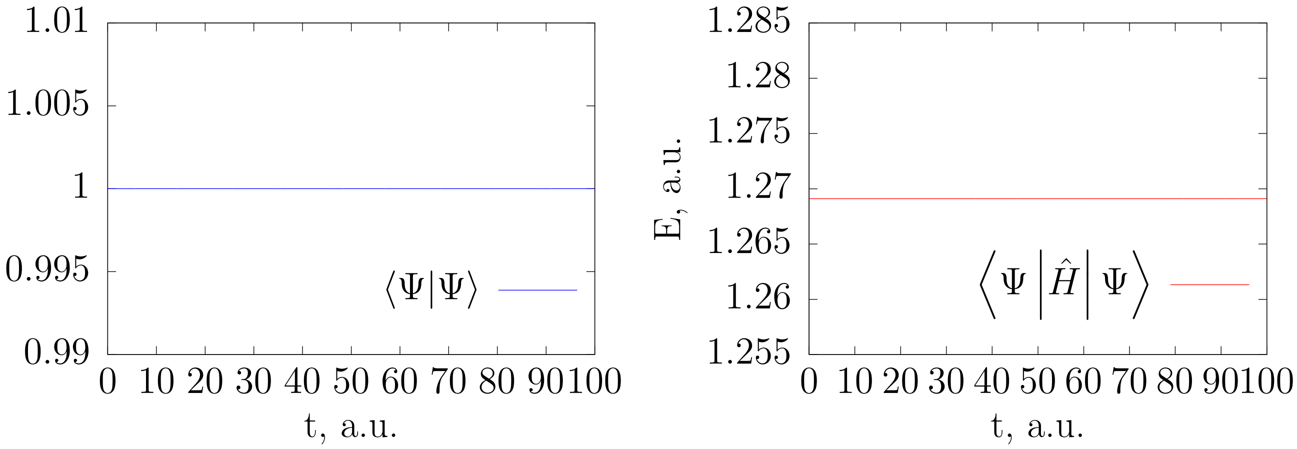

Рис. 24: Зависимость нормы и среднего значения оператора Гамильтона от времени

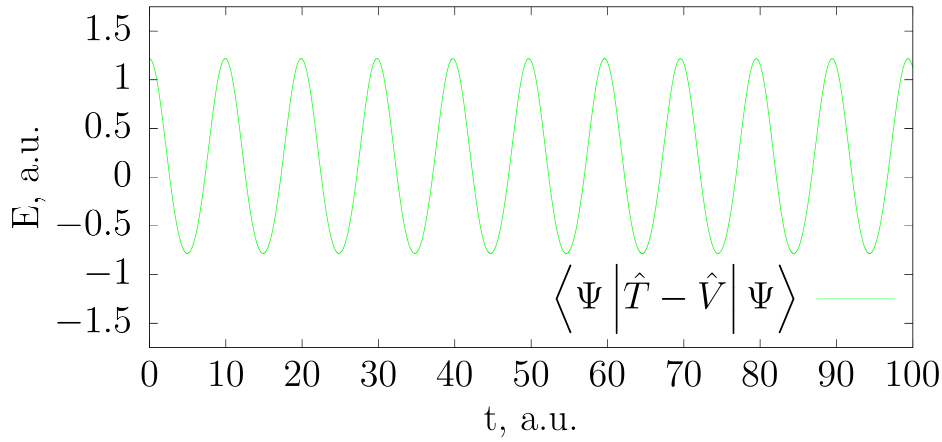

Рис. 25: Зависимость среднего значения оператора Лагранжа от времени

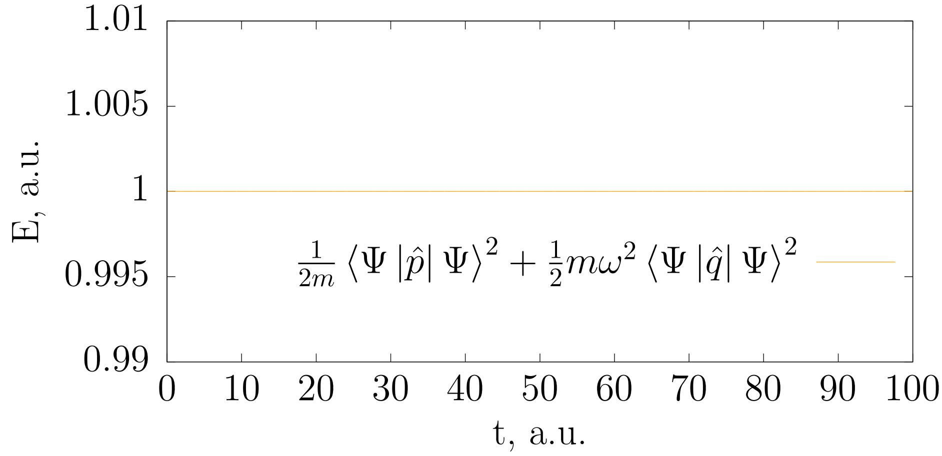

Рис. 26: Зависимость классической энергии полной ВФ от времени

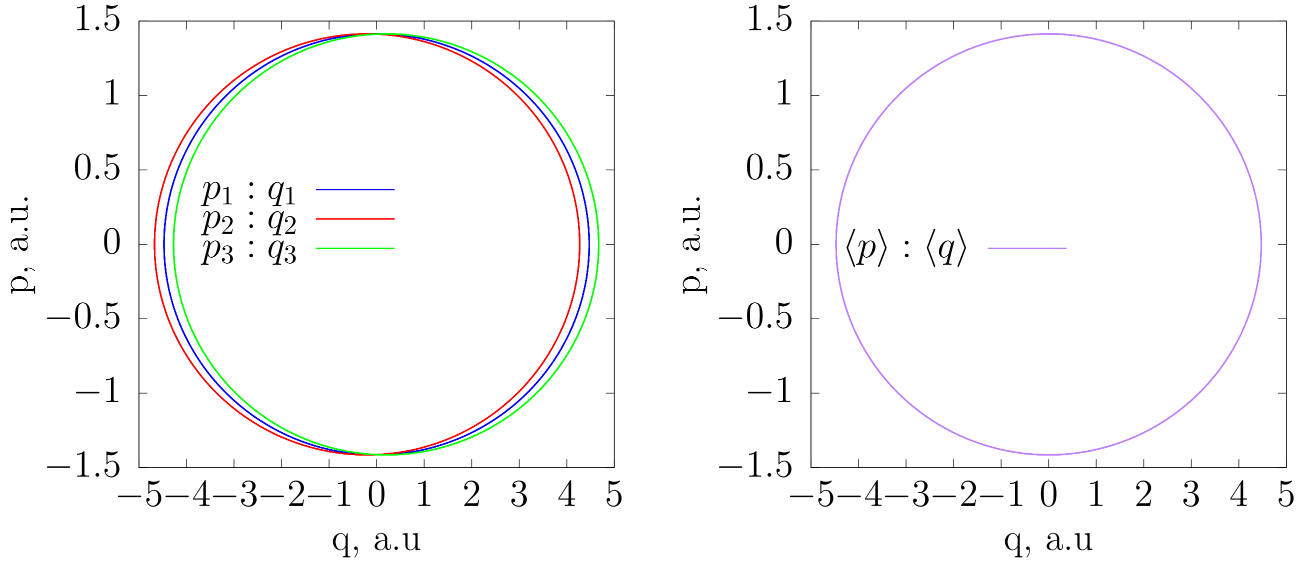

Рис. 27: Фазовый портрет базисных функций

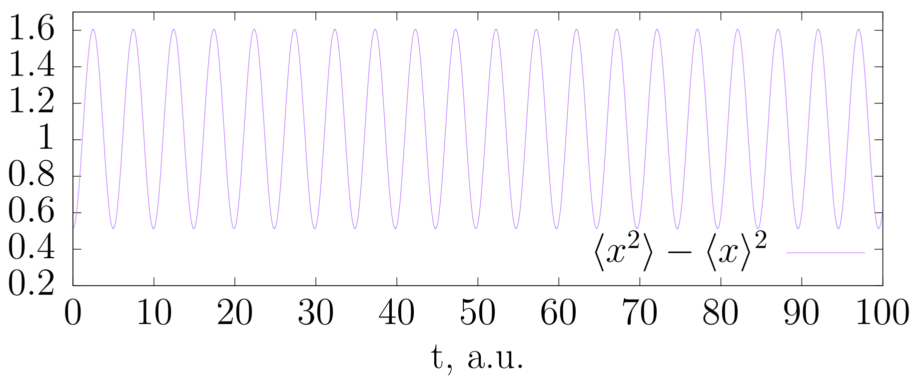

Рис. 28: Зависимость дисперсии ВФ от времени

3 Потенциал — спадающая экспонента

Начнем с рассмотрения базиса из одного волнового пакета. Изучим вопрос сохранения энергии:

$$< V >= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \int \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + \left(2Re(\xi) - \frac{\hbar}{l}\right) x + 2Re(\eta)\right)\right) dx =$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \int \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left(-m\omega x^2 + \left(2m\omega q - \frac{\hbar}{l}\right) x - m\omega q^2\right)\right) dx =$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} q^2\right) \int \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x^2 - 2\left(q - \frac{\hbar}{2ml\omega}\right) x\right)\right) dx =$$

$$= \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\left(q^2 - \left(q - \frac{\hbar}{2ml\omega}\right)^2\right)\right) =$$

$$= \exp\left(-\frac{q}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right)$$

$$< T >= \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{|\xi|^2}{2m} - \frac{1}{2} m\omega^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} + \left(\frac{Re(\xi)}{m\omega}\right)^2\right) =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{m^2\omega^2 q^2 + p^2}{2m} - \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{p^2}{2m}$$

$$< H >'_t = < V >'_t + < T >'_t = \frac{p\dot{p}}{m} - \frac{\dot{q}}{l} \exp\left(-\frac{q}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right) =$$

$$= \frac{p}{m}\left(\dot{p} - \frac{1}{l} \exp\left(-\frac{q}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right)\right)$$

Если принять, что $\dot{p} = -V'_x(q)$, то получим

$$< H >'_t = \frac{p}{lm} \exp\left(-\frac{q}{l}\right)\left(1 - \exp\left(\frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right)\right)$$

Если же принять, что $\dot{p} = -< V'_x > = < V > /l$, то получим $< H >'_t = 0$

Базис из двух функций:

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{q_1}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right) & V_{12} \\ V_{12}^* & \exp\left(-\frac{q_2}{l} + \frac{\hbar}{4ml^2\omega}\right) \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{p_1^2}{2m} & T_{12} \\ T_{12}^* & \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{p_2^2}{2m} \end{pmatrix}$$

Обобщая предыдущие рассуждения, предполагаем, что среднее значение энергии теперь сохраняться не будет. Однако, след марицы оператора Гамильтона все еще представляет собой сумму классических функций Гамильтона отдельных пакетов и поправки. Таким образом, след матрицы оператора Гамильтона будет сохраняться с течением времени.

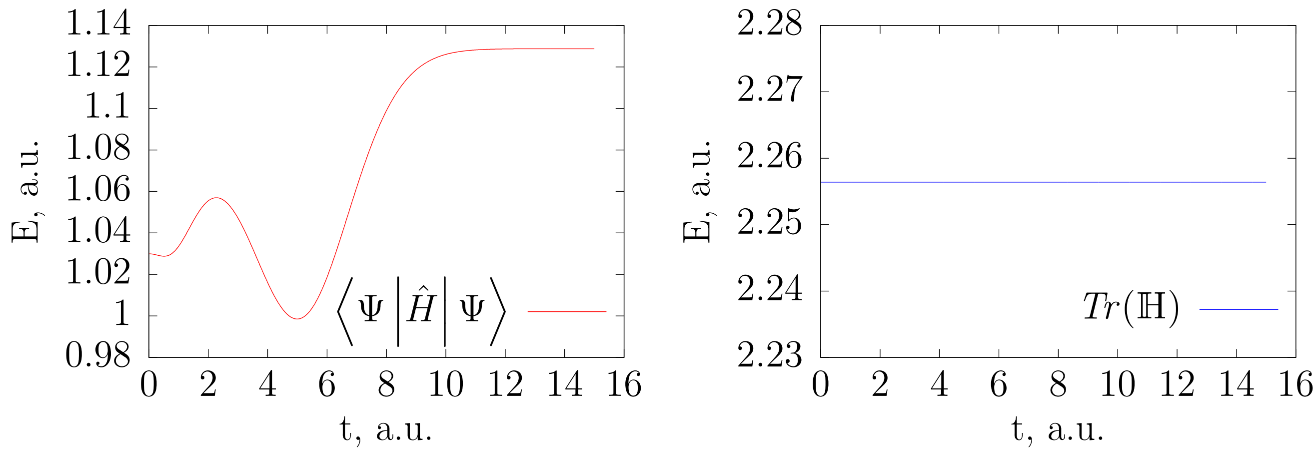

Рис. 29: Зависимость среднего значения оператора Гамильтона и следа матрицы оператора Гамильтона от времени