Ответы к вопросам по курсу “Квантовая теория”

4 января 2016 г.

1. **Соотношения неопределенностей (для операторов координаты и импульса, для компонент вектора момента). Когерентные состояния гармонического осциллятора. (L5, L17, L38)**

   а) Рассмотрим дисперсию величины A : $\quad \overline{\Delta A^2} = \langle\psi|\left(\hat{A}-\bar{A}\right)^2|\psi\rangle$

   Дисперсия значений величин x и y связана с коммутатором операторов: $[\hat{x},\hat{y}] = i\hat{A}$

   Пусть оператор $\hat{L} = (\hat{x}-\bar{x}) + i\gamma\,(\hat{y}-\bar{y})\,, \quad \gamma\in\mathbb{R}, \quad !\hat{x},\hat{y}$ – эрмитовы

   Собственные значения оператора $\hat{L}^+\hat{L}$ неотрицательны:

   $$\langle\psi|\left\{(\hat{x}-\bar{x}) - i\gamma\,(\hat{y}-\bar{y})\right\}\left\{(\hat{x}-\bar{x}) + i\gamma\,(\hat{y}-\bar{y})\right\}|\psi\rangle \geq 0$$
   $$\langle\psi|\,\overline{\Delta x^2} + \gamma^2\overline{\Delta y^2} - \gamma\bar{A}\,|\psi\rangle \geq 0$$

   Выполняется для $\forall\gamma \Rightarrow D \leq 0 : \quad \bar{A}^2 - 4\overline{\Delta x^2}\,\overline{\Delta y^2} \leq 0$

   $$\boxed{\overline{\Delta x^2}\,\overline{\Delta y^2} \geq \frac{\bar{A}^2}{4}}$$

   Таким образом $[\hat{p}_i,\hat{x}_i] = -i\hbar \quad \Rightarrow \quad \underline{\overline{\Delta p^2}\,\overline{\Delta x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}}$

   Аналогично для векторного оператора момента:

   $$\left[\hat{J}_i,\hat{J}_k\right] = i\mathcal{E}_{ijk}\hat{J}_j \Rightarrow \Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle\hat{J}_z\right\rangle\right|$$

   $$\hat{J}_x = \frac{1}{2}\begin{vmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{vmatrix}; \quad \hat{J}_y = \frac{-i}{2}\begin{vmatrix}0 & 1 & 0\\ -1 & 0 & 1\\ 0 & -1 & 0\end{vmatrix}; \quad \hat{J}_z = \begin{vmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{vmatrix}$$

   $\mathcal{E}_{ijk}$ – единичный антисимметричный тензор (Леви-Чивиты)

   б) В классической механике p и x определены одновременно $\Rightarrow$ состояния, наиболее близкие к классическим описываются минимальными неопределённостями, то есть

   $$D = 0 \quad \text{и} \quad \overline{\Delta p^2}\,\overline{\Delta x^2} = \frac{\hbar^2}{4}$$

Так как СЗ оператора $\hat{L}^{+}\hat{L}$ неотрицательны, то СФ оператора L^{+} будут соответствовать СЗ $= 0$. Получаем:

$$\left(x + \gamma\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = \lambda\psi, \quad \lambda = \bar{x} + i\gamma\bar{p}$$

Решение этого уравнения: $\psi(x) = \left(2\pi\overline{\Delta x^2}\right)^{-\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{(x-\bar{x})^2}{4\Delta x^2} + i\frac{\bar{p}x}{\hbar}\right]$
Если забить на размерности, то это уравнение эквивалентно

$$\hat{a}\psi = \lambda\psi; \quad \hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,; \quad \langle\alpha\,|\,\alpha\rangle = 1$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} + i\hat{p}\right) \text{ – оператор уничтожения}$$

Последнему уравнению удовлетворяют ВФ, называющиеся **когерентными состояниями гармонического осциллятора**

2. Динамика квантовых систем в картине Гейзенберга. Теоремы Эренфеста. Эволюция волновых пакетов свободной частицы. (L7)

а) Матричные элементы операторов $\hat{x}_i$ и $\hat{p}_k$, вычисленные между ВФ f и g удовлетворяют уравнениям Гамильтона классической механики:

$$\frac{d}{dt}\left\langle f\left|\hat{p}_i\right|g\right\rangle = -\left\langle f\left|\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{x}_i}\right|g\right\rangle$$
$$\frac{d}{dt}\left\langle f\left|\hat{x}_i\right|g\right\rangle = -\left\langle f\left|\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_i}\right|g\right\rangle$$

Картина Гейзенберга: от времени зависят лишь операторы, то есть

$$\dot{\widehat{p_i}} = -\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{x}_i} \qquad \dot{\widehat{x_i}} = -\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_i}$$

Учитывая, что $\hat{p}_i\hat{x}_i{}^n - \hat{x}_i{}^n\hat{p}_i = -i\hbar n\hat{x}_i{}^{n-1}$ для всех функций, разлагая в степенной ряд, получаем

$$\hat{p}_i f - f\hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial f}{\partial x_i} \Rightarrow \begin{cases} \dot{\hat{p}}_i = -\frac{i}{\hbar}\left[\widehat{p}_i, \widehat{H}\right] \\ \dot{\hat{x}}_i = -\frac{i}{\hbar}\left[\widehat{x}_i, \widehat{H}\right] \end{cases} \quad \leftarrow \quad \textbf{уравнения Гейзенберга}$$

б) 1)

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle Hx - xH\rangle\,, \qquad H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$$

Так как x и $V(x)$ коммутируют, то $\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{2m\hbar}\left\langle p_x^2 - xp_x^2\right\rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{2m\hbar}\langle p_x\left(p_x x - xp_x\right) + \left(p_x x - xp_x\right)p_x\rangle$$

Далее так как $p_x x - xp_x = -i\hbar$, то $\boxed{\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\langle p_x\rangle}$

2)

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle Vp_x - p_xV\rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = m\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle = \big\langle F(x)\big\rangle}$$

Формулы в коробочках – теорема Эренфеста

в) Свободная частица $\widehat{H} = \dfrac{\widehat{p}^2}{2m}$. Решение:

$$\widehat{p}(t) = \widehat{p}_0; \qquad \widehat{r}(t) = \widehat{r}_0 + \frac{1}{m}\widehat{p}_0 t$$

3. Динамика квантовых систем в картине Шредингера. Эволюция фиделити. Теорема Крылова – Фока. (L8)

а) Пусть теперь от времени зависят ВФ f, g:

$$\frac{d}{dt}\left\langle f\left|\widehat{p}_i\right|g\right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\left\langle f\left|\left[\widehat{p}_i, \widehat{H}\right]\right|g\right\rangle$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}, \widehat{p}_i g\right) + \left(\widehat{p}_i f, \frac{\partial g}{\partial t}\right) = \frac{i}{\hbar}\left(f, \widehat{p}_i\widehat{H}g\right) + \frac{i}{\hbar}\left(f, \widehat{H}\widehat{p}_i g\right)$$

$$\widehat{H}, \widehat{p} \text{ – эрмитовы} \quad \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}, \widehat{p}_i g\right) + \left(\widehat{p}_i f, \frac{\partial g}{\partial t}\right) = -\frac{i}{\hbar}\left(\widehat{p}_i f, \widehat{H}g\right) + \frac{i}{\hbar}\left(\widehat{H}f, \widehat{p}_i g\right)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\widehat{H}f, \widehat{p}_i g\right) + \left(\widehat{p}_i f, \frac{\partial g}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\widehat{H}g\right) = 0$$

Выполняется для ВФ, удовлетворяющих $\boxed{i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = \widehat{H}\psi}$ ← УШ

б) Суперпозиция двух стационарных состояний:

$$\psi(t) = \alpha\left|\psi_k\right\rangle \exp\left(-i\omega_k t\right) + \beta\left|\psi_n\right\rangle \exp\left(-i\omega_n t\right)$$

Фиделити текущего и начального состояний:

$$\mathcal{F}(t) = \left|\left\langle \psi(t)\,\middle|\,\psi(0)\right\rangle\right|^2 = |\alpha|^4 + 2|\alpha|^2|\beta|^2\cos\omega_{nk}t + |\beta|^4$$

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar} = \omega_n - \omega_k \quad \text{– “частота перехода”}$$

Для непрерывного спектра E суперпозиция состояний:

$$\psi(\xi, 0) = \int C(E)\psi_E(\xi)dE$$

Фиделити текущего и начального состояний:

$$\boxed{\mathcal{F}(t) = \left|\left\langle \psi(\xi,0)\,\middle|\,\psi(\xi,t)\right\rangle\right|^2 = \left|\int \left|C(E)\right|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)dE\right|^2} \leftarrow \text{теорема Крылова-Фока}$$

4. Матричные элементы операторов координаты и импульса. Их связь, теоремы о суммах. Теорема соответствия для матричных элементов. (L8, L9, L15)

а) Общий вид уравнения Гейзенберга: $\dot{\hat{z}} = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \hat{z}\right]$

$$\Rightarrow \boxed{\left(\dot{Z}\right)_{nk} = i\omega_{nk} z_{nk}} \qquad p_{nk} = im\omega_{nk} x_{nl}$$

б) Теорема о матричных элементах: из а) следует, что

$$A_m = \sum_k |z_{nk}|^2 \, \omega_{kn}^{2m+1} = -\frac{i}{2}\left\langle n \left| \left[\frac{d^m \hat{z}}{dt^m}, \frac{d^{m+1}\hat{z}}{dt^{m+1}} \right] \right| n \right\rangle$$
$$B_m = \sum_k |z_{kn}|^2 \, \omega_{kn}^{2m} = \left\langle n \left| \left(\frac{d^m \hat{z}}{dt^m} \right)^2 \right| n \right\rangle$$

Ещё можно почитать в L9

в) **Теорема о соответствии матричных элементов:**
Матричный элемент координаты $x_{n+p,n}$ между стационарными состояниями ≈ фурье-амплитуде X_p p-й гармоники закона классического движения при энергии, равной среднему значению от энергий начального и конечного состояний перехода – с точностью до $\hbar$

$$x_{n+p,n} \approx X_p + \hbar \frac{p}{2} \Omega \frac{dX_p}{dE}, \qquad \Omega \text{ – частота движения классической системы}$$