Математические основы квантовой механики 2022

Листок 2. Гармонический осциллятор, одномерные квантовые системы.

срок сдачи 16 ноября 2022г.

---

1. **Принцип неопределенности Гейзенберга.** Пусть $\hat{A}$ и $\hat{B}$ — самосопряженные операторы[1], действующие в гильбертовом пространстве, $|\psi\rangle$ — вектор из этого пространства, принадлежащий области определения операторов $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$. Докажите неравенство, именуемое *соотношением Робертсона-Шредингера*:

$$\Delta_\psi A \, \Delta_\psi B \ \geq \ \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi \right| .$$

Здесь $\langle A \rangle_\psi := \langle \psi | \, \hat{A} \, | \psi \rangle, \quad \Delta_\psi A := \sqrt{\langle \psi | \, (\hat{A} - \langle A \rangle_\psi 1)^2 \, | \psi \rangle}\,.$

Указание. Соотношение следует из неравенства Коши-Буняковского-Шварца. Вывод его можно провести самостоятельно, или разобрать по учебникам.

2. В модели гармонического квантового осциллятора с одной степенью свободы, задаваемой гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \qquad \hat{a} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \, \hat{q} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m \omega}} \, \hat{p},$$

когерентными называются состояния, являющиеся собственными векторами оператора уничтожения:

$$\hat{a} \, |\phi_\lambda\rangle = \lambda \, |\phi_\lambda\rangle \,, \quad |\phi_\lambda|^2 = \langle \phi_\lambda | \phi_\lambda \rangle = 1, \quad \lambda \in \mathbb{C}.$$

(a) Получите выражение для когерентного состояния $|\phi_\lambda\rangle$ в виде разложения по *n-частичным состояниям*[2] $|n\rangle$ — собственным состояниям гамильтониана с энергией $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

(b) Определите, как эволюционирует когерентное состояние $|\phi_\lambda(t)\rangle$ в картине Шредингера. Результат выразите в терминах когерентных состояний.

(c) Вычислите среднее значение энергии осциллятора в состоянии $|\phi_\lambda\rangle$. Определите вероятность того, что энергия квантового осциллятора в состоянии $|\phi_\lambda\rangle$ принимает значение $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

(d) Найдите средние значения и дисперсии наблюдаемых q и p в состоянии $|\phi_\lambda(t)\rangle$. Как изменяются все эти величины с течением времени? Убедитесь, что величина $\Delta_{\phi_\lambda} q \, \Delta_{\phi_\lambda} p$ достигает минимального разрешенного соотношением неопределенности Гейзенберга значения.

Замечание. В более широком смысле когерентными называются состояния квантовой системы, в которых соотношение Робертсона-Шредингера для операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$ становится равенством.

(e) Постройте волновую функцию когерентного состояния $\phi_\lambda(x)$, то есть вектор в координатном представлении, отвечающий состоянию $|\phi_\lambda\rangle$. Убедитесь, что $|\phi_\lambda(x)|^2$ — плотность распределения координаты осциллятора в

---

[1] Достаточно, чтобы они были симметрическими.

[2] Здесь под частицей понимается нечто несущее "квант"энергии $\hbar\omega$.

когерентном состоянии — с течением времени не меняет своей формы (в отличие от того, что происходит со свободной квантовой частицей).
Найдите плотность распределения вероятности того, что квантовый осциллятор находится в точке с координатой x.

Указание. Воспользуйтесь координатным представлением n-частичных состояний.

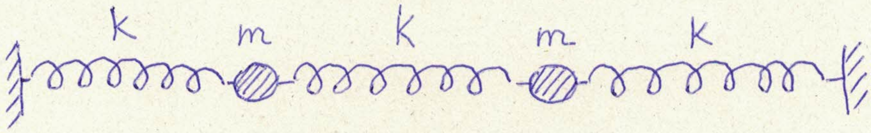
(f) **(необязательный)** Докажите полноту набора когерентных состояний:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \langle\phi_\lambda|\psi\rangle\,|\phi_\lambda\rangle\, d^2\lambda,$$

где $|\psi\rangle$ – произвольное состояние квантового осциллятора.

Указание. Используйте разложение $|\psi\rangle$ и $|\phi_\lambda\rangle$ по n-частичным состояниям.

3. **Модель колебаний атомов в кристалле.** На рисунке изображена система двух грузиков массы m на упругих пружинах жесткости k.



(a) Составьте гамильтониан системы, используя в качестве обобщенных координат отклонения x_i, $i = 1, 2$, грузиков от положения равновесия. Подберите ортогональное преобразование

$$x_i' = \sum_{j=1,2} O_{ij} x_j, \qquad O^T = O^{-1},$$

так, чтобы квадратичная форма потенциальной энергии системы в новых координатах x_i' была диагональной. Запишите гамильтониан системы в новых координатах.

(b) Проведите каноническое квантование системы в новых переменных x_i', p_i', постройте две пары операторов рождения-уничтожения $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^\dagger$ и выразите через них гамильтониан $\hat{H}$. Постройте фоковское пространство состояний квантовой системы, предполагая наличие в нем единственного вакуумного состояния $|0\rangle$:

$$\hat{a}_i\,|0\rangle = 0, \quad i = 1, 2.$$

Определите возможные значения энергии квантовой системы и постройте ортонормированный базис собственных векторов гамильтониана $\hat{H}$.

4. Докажите, что дискретный спектр энергии одномерной квантовомеханической системы всегда *невырожден*, то есть каждому значению энергии из дискретного спектра гамильтониана отвечает единственная (с точностью до фазового множителя $e^{i\alpha}$, $\alpha \in \mathbb{R}$) нормированная собственная функция.

Указание. Исследуйте асимптотические свойства вронскиана стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении.

5. **Туннельный эффект.** Ненормируемые решения уравнения Шредингера для свободной частицы — плоские волны

$$\psi_\pm(t, x) = A_\pm\, e^{\frac{i}{\hbar}(\pm px - Et)}, \quad E = \frac{p^2}{2m},$$

можно интерпретировать как постоянный поток квантовых частиц, движущихся направо/налево вдоль оси $O\vec{x}$. Плотность вероятности распределения частиц $\rho_\pm(t,x) := |\psi_\pm|^2 = |A_\pm|^2$ на оси $O\vec{x}$ постоянна. Плотность их тока вероятности

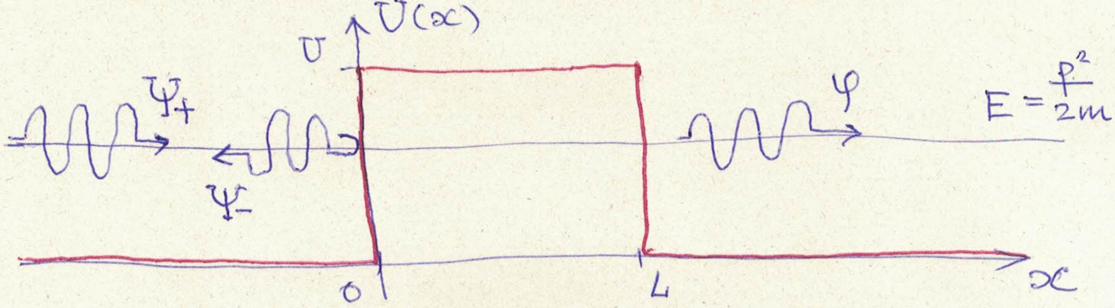
$$j_\pm(t,x) := \frac{i\hbar}{2m}(\psi_\pm\,\partial_x\overline{\psi}_\pm - \overline{\psi}_\pm\,\partial_x\psi_\pm) \;=\; \pm\frac{p}{m}\,|A_\pm|^2$$

тоже постоянна. Наблюдаемые величины ρ и j связаны между собой уравнением непрерывности $\partial_t\rho + \partial_x j = 0$, следующим из уравнения Шредингера.

Рассмотрим поток частиц $\psi_+(t,x) = A_+\,e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$, $x \le 0$, налетающих слева на потенциальный барьер

$$U(x) \;=\; \begin{cases} 0, & \text{если } x<0, \text{ либо } x>L, \\ U > E = \frac{p^2}{2m}, & \text{если } 0 \le x \le L. \end{cases} \tag{1}$$

Часть этого потока отражается от барьера, порождая бегущий налево поток $\psi_-(t,x) = A_-\,e^{\frac{i}{\hbar}(-px-Et)}$, $x \le 0$. Часть проникает сквозь барьер, порождая убегающий направо поток $\phi(t,x) = B\,e^{\frac{i}{\hbar}(p(x-L)-Et)}$, $x \ge L$, см. рисунок:



(a) Постройте волновую функцию $\Psi(t,x)$, описывающую проникновение и отражение потока частиц с импульсом p и массой m на потенциальном барьере $U(x)$ (1), то есть такую, что $\Psi(t,x) = \psi_+(t,x) + \psi_-(t,x)$ при $x \le 0$, и $\Psi(t,x) = \phi(t,x)$ при $x \ge L$.

Вычислите коэффициенты отражения и пропускания барьера:

$$\Gamma_{\hookleftarrow} := |A_-|^2/|A_+|^2, \qquad \Gamma_{\hookrightarrow} := |B|^2/|A_+|^2.$$

Убедитесь, что $\Gamma_{\hookleftarrow} + \Gamma_{\hookrightarrow} = 1$.

Указание. Используйте условия непрерывности Ψ и $\partial_x\Psi$ на границах барьера $x = 0, L$.

(b) Посчитайте в первом приближении коэффициент пропускания $\Gamma_{\hookrightarrow}$ для потока квантовых частиц, кинетическая энергия $E = \frac{p^2}{2m}$ которых мало отличается от высоты потенциального барьера, а длина волны соответствующей волновой функции λ сравнима с шириной барьера:

$$0 < \frac{U-E}{U} = \delta \ll 1; \quad L = n\lambda, \;\; \text{где } \lambda = \tfrac{2\pi\hbar}{p},\, n \sim 1.$$

6. **(необязательная)** Одномерная квантовая частица массы m находится в потенциальной яме

$$U(x) \;=\; \begin{cases} 0, & \text{если } |x| \ge L/2, \\ -U_0 < 0, & \text{если } |x| < L/2. \end{cases}$$

Рассмотрим состояния дискретного энергетического спектра этой системы. В предположении, что $U_0 \gg \frac{\hbar^2}{mL^2}$ (скажем, ширина потенциальной ямы L фиксирована, а глубина $U_0 \to +\infty$) вычислите уровни энергии связанных состояний частицы в окрестности дня потенциальной ямы: $0 < \Delta E = U_0 - |E| \ll U_0$. Посчитайте $\delta := \Delta E/U_0$ в 1-м и 2-м порядках по малому параметру

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{2\hbar^2}{mU_0L^2}} \ll 1.$$

Указание. Удобно воспользоваться модифицированным условием квантования энергии

$$\frac{k}{R} = \begin{cases} \pm\cos kL/2 & \text{для четных собственных функций,} \\ \pm\sin kL/2 & \text{для нечетных собственных функций,} \end{cases}$$

где $k := \sqrt{\frac{2m\Delta E}{\hbar^2}}$, $R := \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$ (сравните с записками лекции №7 2020г., стр. 30-34).