Математические основы квантовой механики 2023

Листок 2. Гармонический осциллятор, одномерные квантовые системы.

срок сдачи 15 ноября 2023г.

---

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:

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

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

б) Определите, как эволюционирует когерентное состояние $|\phi_\lambda(t)\rangle$ в картине Шредингера. Убедитесь, что эволюция не нарушает когерентности, выразите $|\phi_\lambda(t)\rangle$ в терминах когерентных состояний.

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

г) 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.

д) 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.

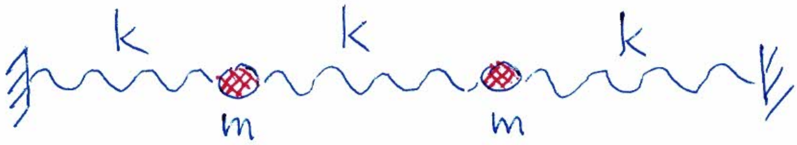
е) **(необязательный)** Докажите полноту набора когерентных состояний:

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

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.



а) Составьте гамильтониан системы, используя в качестве обобщенных координат отклонения x_i, $i \in \{1,2\}$, 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. Постройте соответствующее каноническое преобразование координат фазового пространства

$$\{x_i, p_j\} \;\mapsto\; \{x_i', p_j'\}, \quad i,j \in \{1,2\}$$

и запишите ее гамильтониан в новых координатах.

б) Проведите каноническое квантование системы в новых переменных x_i', p_i', постройте две пары операторов рождения-уничтожения $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^\dagger$:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}1,$$

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

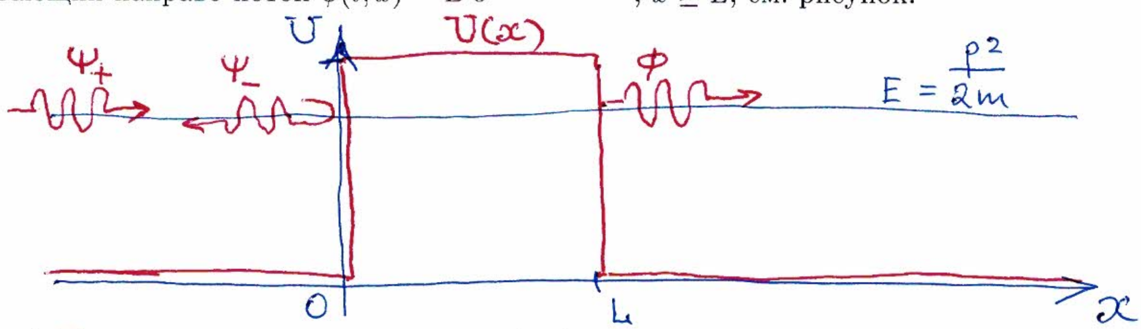
$$j_\pm(t,x) := \frac{i\hbar}{2m}(\psi_\pm\,\partial_x\overline{\psi}_\pm - \overline{\psi}_\pm\,\partial_x\psi_\pm) \;=\; \pm\frac{p}{m}\,|A_\pm|^2$$

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 $x = 0, L$.

б) Посчитайте в первом приближении коэффициент пропускания $\Gamma_{\mapsto}$ 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:

$$0 < \frac{U - E}{U} = \delta \ll 1; \;\; L = n\lambda; \;\; \lambda = \tfrac{2\pi\hbar}{p}, \text{ где } n \text{ невелико (считаем } n\sqrt{\delta} \ll 1).$$

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

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

Рассмотрим состояния дискретного энергетического спектра этой системы. На лекциях было показано, что эти состояния имеют определенную четность относительно отражения $x \mapsto -x$. Значения энергии $-U_0 \leq E < 0$ четных/нечетных состояний системы являются, соответственно, решениями уравнений

$$r = k\,\mathrm{tg}(kL/2) \;\;/\;\; r = -k\,\mathrm{ctg}(kL/2), \tag{2}$$

$$\text{где} \quad r(E) := \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \quad k(E) := \sqrt{\frac{2m(U_0 - |E|)}{\hbar^2}}.$$

а) Убедитесь, что общее число состояний дискретного спектра в прямоугольной яме N дается формулой

$$N = \lceil \frac{RL}{2\pi} \rceil, \quad \text{где} \quad R := \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}.$$

б) Рассмотрим случай, когда число состояний дискретного спектра достаточно велико: $N \gg 1$, так что в задаче имеется малый параметр [3]

$$\varepsilon := \frac{2\pi}{RL} = \frac{\pi\hbar}{L}\sqrt{\frac{2}{mU_0}} \simeq \frac{1}{N} \ll 1.$$

Посчитайте приближенно значения низших уровней энергии $E_0, E_1, \ldots, E_i, \ldots$ квантовой частицы в окрестности дна потенциальной ямы, а именно: вычислите два первых нетривиальных члена разложения малой величины

$$\delta_i(\varepsilon) := \frac{U_0 - |E_i|}{U_0} = \left(\frac{k(E_i)}{R}\right)^2, \quad 0 < \delta_i(\varepsilon) \ll 1.$$

в ряд по степеням ε.

Указание. При решении пункта б) удобно воспользоваться преобразованными условиями (2) квантования уровней энергии

$$\frac{k}{R} = \begin{cases} |\cos kL/2| & \text{при условии } \mathrm{tg}(kL/2) > 0 \;\; \text{для четных волновых функций,} \\ |\sin kL/2| & \text{при условии } \mathrm{tg}(kL/2) < 0 \;\; \text{для нечетных волновых функций/} \end{cases}$$

[3] Заметим, что ε можно также интерпретировать как отношение длины волны $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ волновой функции квантовой частицы в яме вблизи ее края $\lambda|_{E=0} = \frac{2\pi}{R}$ к ширине потенциальной ямы L. При $\varepsilon \ll 1$ из состояний дискретного спектра квантовой частицы с энергией, находящейся вблизи нуля, можно составить волновой пакет, ведущий себя подобно классической частице.