Задачи к семинару «Связанные состояния. Мелкая яма»

Упражнения (15 баллов)

Упражнение 1. Измерение (5 баллов)

Состояние трёхмерной частицы описывается нормированной волновой функцией $\psi(x, y, z)$. Какова вероятность того, что частица находится в интервале $z_1 < z < z_2$, а её импульс при этом — в интервале $p_1 < p_y < p_2$?

Упражнение 2. Прямоугольная яма (10 баллов)

В стандартном курсе квантовой механики вы наверняка сталкивались с задачей о частице в прямоугольной яме:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{1}$$

Продемонстрируйте, что в случае, когда эта яма — мелкая, точное решение совпадает с приближённой формулой для мелкой ямы.

Задачи (85 баллов)

Задача 1. Каноническое квантование (10 баллов)

Один из способов построения квантовой механики заключается в постулировании коммутационных соотношений, связанных с классической скобкой Пуассона: $[\hat{A}, \hat{B}] \mapsto i\hbar\{A, B\}$; для канонически сопряжённых операторов координаты и импульса это даёт $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

Пусть известно, что у оператора $\hat{x}$ имеется непрерывный спектр собственных значений $\mathbb{R}$, а также известны коммутационные соотношения $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Продемонстрируйте, что только этих знаний достаточно, чтобы вывести явный вид оператора импульса в координатном представлении $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

Дополнительно: покажите, что не существует конечномерных представлений этой алгебры: операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}$, определённые таким образом, не могут действовать в гильбертовом пространстве конечной размерности.

Указания:

1. Вычислите по индукции $[\hat{x}, \hat{p}^n]$.
2. Оператор трансляции определим стандартным образом как $\hat{T}_a = e^{i\hat{p}a/\hbar}$. Используя предыдущий пункт, вычислите коммутатор $[\hat{x}, \hat{T}_a]$.
3. Пусть $|x\rangle$ — базис собственных состояний оператора $\hat{x}$, так что $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$. Покажите, что построенный оператор $\hat{T}_a$ действительно является оператором трансляции: $\hat{T}_a\,|x\rangle = |x - a\rangle$.
4. Используя матричный элемент $\langle x|\,\hat{T}_a\,|\psi\rangle$ для инфинитезимальной трансляции $a \to 0$, найдите матричный элемент $\langle x|\,\hat{p}\,|\psi\rangle \equiv \hat{p}\psi(x)$.

Задача 2. Преобразование Галлилея (10 баллов)

Пусть частица находится в потенциале, который движется со скоростью v:

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x} - vt) \tag{2}$$

Придумайте унитарное преобразование $\hat{U}(t)$ («преобразование Галлилея»), которое приведёт Гамильтониан к аналогичному, но независящему от времени виду[1]:

$$\hat{H}'(t) \equiv \hat{U}(t)\hat{H}(t)\hat{U}^\dagger(t) - i\hbar\hat{U}(t)\partial_t\hat{U}^\dagger(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{3}$$

Запишите явно его действие на произвольную волновую функцию $\langle x|\,\hat{U}(t)\,|\psi(t)\rangle$.

[1] См. задачи к первому семинару

Задача 3. Туннельное расщепление (10 баллов)

Рассмотрите две мелкие ямы, моделируемые следующим потенциалом:

$$U(x) = -\frac{\hbar^2\kappa}{m}(\delta(x+L/2)+\delta(x-L/2)) \tag{4}$$

Такая задача включена в стандартный курс квантовой механики; предлагается провести её исследование.

1. Нарисуйте (схематично, но со всеми ключевыми особенностями) зависимость уровней энергии связанных состояний от расстояния между ямами L.

2. Пусть расстояние между ямами много больше характерного масштаба волновых функций для каждой из отдельных ям (туннельный режим), $L \gg \kappa^{-1}$. Определите расщепление между связанными состояниями.

3. Эта задача может быть рассмотрена как модель *ковалентной связи*. Считая теперь L классической динамической переменной, определите силу (в туннельном режиме) и характер взаимодействия между ямами, если частица находится в основном состоянии.

Задача 3.1. Модель сильной связи (15 баллов)

В туннельном режиме, данная задача может также служить иллюстрацией для модели сильной связи, которая описывает пару нижних уровней энергии. Все вычисления в этой задаче необходимо проводить в ведущем приближении по параметру $L \gg \kappa^{-1}$.

1. Спроецируйте гамильтониан на линейное подпространство, натянутое на собственные функции каждой из ям по отдельности: $\{\psi_0(x+\frac{L}{2}), \psi_0(x-\frac{L}{2})\}$. Выпишите соответствующую ему матрицу 2×2 в этом базисе

2. Обратите внимание, что базисные вектора не являются ортогональными. Вычислите матрицу Грама для этого базиса (матрица скалярных произведений $G_{ij} = \langle\psi_i|\psi_j\rangle$.

3. Характеристическое уравнение, определяющее собственные числа для неортонормированного базиса, имеет вид $\det(\hat{H} - E\cdot\hat{G}) = 0$. Найдите собственные уровни энергии в заданном приближении.

Уже исходя из ответа, выясните, какие величины (на самом деле) не было необходимости считать.

Задача 4. Глубокая мелкая яма (40 баллов)

Найдите энергию основного состояния в яме, описываемой потенциалом[2] $U(x) = -U_0\frac{a}{a+|x|}$, считая яму мелкой $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$.

[2] Заметьте, что если зафиксировать $U_0 a = \alpha = \text{const}$ и устремить $a \to 0$, то яма будет становиться всё «мельче» и «мельче», а потенциал примет стандартный Кулоновский вид $U(x) = -\alpha/|x|$. Более того, для сферически симметричных потенциалов и волновых функций, решение трёхмерного УШ сводится к решению аналогичного одномерного. А у трёхмерного Кулона основное состояние, казалось бы, известно — старый добрый Ридберг, $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2 = -13.6\text{eV}$. Казалось бы, задача решена.

Беда только в том, что сведение трёхмерного УШ к одномерному производится путём подстановки $\psi_{3\mathrm{D}}(r) = \psi_{1\mathrm{D}}(r)/r$, и *основное* состояние трёхмерного Кулона, $\psi_{3\mathrm{D}}(r) = \exp(-r/a_B)$, соответствует одномерной волновой функции $\psi_{1\mathrm{D}}(r) = r\exp(-r/a_B)$. У этой волновой функции имеется ровно один узел, $\psi_{1\mathrm{D}}(r=0) = 0$, поэтому по осцилляторной теореме она описывает *первое возбуждённое* состояние одномерного Кулона! А как же тогда устроено основное?

Оказывается, в одномерии буквально Кулоновский потенциал $U(x) = -\alpha/|x|$ соответствует «падению на центр» и нарушает унитарность — а его основное состояние имеет энергию $E_0 = -\infty$. И для того, чтобы это увидеть, предлагается ввести «обрезку» потенциала на самых маленьких расстояниях, $U(x) = -\begin{cases}\alpha/|x|, & x \gg a\\ \text{const}, & x \lesssim a\end{cases}$, и исследовать поведение энергии основного состояния при $a \to 0$. Что и приводит нас к этой задаче.