Данная серия методичек посвящается
лучшему семинаристу по квантовой теории
Андрею Владимировичу Толоконникову

Автор выражает благодарность Даниилу Змееву за предоставленный конспект
Milles voies conduisent en erreur, mais seul induit à vérité

Студент1 указывает на неточность.
Толоконников: Фу таким быть.
Студент1: Почему?
Толоконников: Будете таким – лет через пять вас будут называть душнилой.
Студент2: Зачем ждать 5 лет? Уже!
Толоконников: Пусть вас утешает, что душнилы – лучшие люди. Всяко лучше хипстеров, хиппи, барист… а особенно басистов ☺

Этот семинар – такое введение в тему «спин», отталкиваясь от привычных нам гармонических осцилляторов.

На этом семинаре будем искать СЗ и СФ гамильтонианов, похожие на гамильтониан гармонического осциллятора $\hat{H}_{\text{гарм}} = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})$.

Задача 1) $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}) + f^*\hat{a} + f\hat{a}^+$

f - const, f^* - сопряжённая к ней.

Если бы не f-ки, был бы в точности $\hat{H}_{\text{гарм}}$. Можно ли свести заменой задачу к нему? Да:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega\hat{a}^+\hat{a} + f^*\hat{a} + f\hat{a}^+ = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega\underset{\hat{b}^+}{\underbrace{\left(\hat{a}^+ + \frac{f^*}{\hbar\omega}\right)}}\underset{\hat{b}}{\underbrace{\left(\hat{a} + \frac{f}{\hbar\omega}\right)}} - \frac{|f|^2}{\hbar\omega}.$$

Мы ввели два новых оператора: $\hat{b}^+$ и $\hat{b}$. Через них гамильтониан запишется как

$$\hat{H} = \underset{\hat{H}_1}{\underbrace{\hbar\omega(b^+b + \frac{1}{2})}} - \frac{|f|^2}{\hbar\omega}$$

Где $\hat{H}_1$ - гамильтониан обычного гармонического осциллятора.

Можно легко убедиться, что $[\hat{b}, \hat{b}^+] = [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$.
Доказательство:

$$[\hat{b}, \hat{b}^+] = [\hat{a}^+ + \frac{f^*}{\hbar\omega}, \hat{a} + \frac{f}{\hbar\omega}] =$$

$$= [\hat{a}^+, \hat{a}] + \underbrace{[\frac{f^*}{\hbar\omega}, \hat{a}]}_{=0} + \underbrace{[\hat{a}^+, \frac{f}{\hbar\omega}]}_{=0}, \underbrace{[\frac{f^*}{\hbar\omega}, \frac{f}{\hbar\omega}]}_{=0},$$

т.к. если хотя бы 1 аргумент коммутатора = const, то сам коммутатор = 0).

Тогда операторы $\hat{a}^+, \hat{a}$ и $\hat{b}, \hat{b}^+$ как бы неразличимы (теоретики скажут термином: у них одна и та же алгебра), и у $\hat{H}_1 = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega\hat{b}^+\hat{b}$ будет те же СЗ и СФ, что и у обычного гармонического осциллятора.

У нас, однако, не H_1, а $\hat{H} = \hat{H}_1 - \frac{|f|^2}{\hbar\omega}$. Поэтому СФ у $\hat{H}$ будут те же, а вот СЗ уменьшатся на $\frac{|f|^2}{\hbar\omega}$

Ответ: СФ как у гарм. осциллятора

СЗ: $\hbar\omega(n + \frac{1}{2}) - \frac{|f|^2}{\hbar\omega}$.

Задача 2) $\hat{H} = \hbar\omega\hat{a}^+\hat{a} + \frac{\hbar\omega}{2}\hat{\sigma}_3 + h\gamma(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^+\hat{\sigma}_-)$,

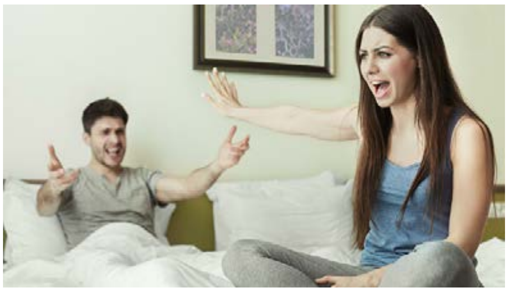
где $\hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

Обратите внимание на появление матричных операторов. Если раньше ВФ была в виде Ψ(x,y,z), то раз появились матричные операторы, искать ВФ надо будет уже в виде $\Psi(x,y,z)\cdot\begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \end{pmatrix}$.

Привычные нам операторы (координаты, импульса, гамильтониан, момента импульса, $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$) действуют только на пространственную составляющую, оставляя спиновый столбец неизменным.

Матричные операторы, напротив, считают Ψ(x,y,z) постоянным множителем, а меняют числа в столбце (мы увидим в дальнейшем, как они работают).

Аналогия: когда Петрович посрался со своей женой Сидоровной



Они договорились, что Петрович ничего не будет трогать в косметичке Сидоровны, а Сидоровна – в ящике с инструментами Петровича ☺

Решения (n-тую СФ нашего упоротого гамильтониана) будем искать в виде

$$|n\rangle = \sum_k \begin{pmatrix} a_{nk} \\ b_{nk} \end{pmatrix} |k\rangle$$

(Такое представление удобно в т.ч. потому, что позволяет так записать не только ВФ вида $\Psi(x,y,z)\cdot\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$, но и более общего вида $\begin{pmatrix} \Psi_1(x,y,z) \\ \Psi_2(x,y,z) \end{pmatrix}$).

Т.е. разложения по k-тым СФ гамильтониана гармонического осциллятора.
Теперь считаем, как упоротый гамильтониан действует на наше решение.

1-е слагаемое: $\hbar\omega \sum k \begin{pmatrix} a_{nk} \\ b_{nk} \end{pmatrix} |k\rangle$.Тут всё просто: $\hat{a}^+\hat{a}$ родили коэф k ($\hat{a}$ сначала сделал $\sqrt{k}|k-1\rangle$, $\hat{a}^+$ вернул до |k>, ещё раз домножив на $\sqrt{k}$). Столбец, как и обещалось, они оставили нетронутым.
2-е слагаемое: глядим на матрицу σ_3. Первый столбец – это то, что она делает с a_{nk} ($1*a_{nk}+0*b_{nk}$, т.е. a_{nk}), второй – что она делает с b_{nk} ($0*a_{nk}-1*b_{nk}$, т.е. $-b_{nk}$). Т.е. она из столбца $\begin{pmatrix} a_{nk} \\ b_{nk} \end{pmatrix}$ делает $\begin{pmatrix} a_{nk} \\ -b_{nk} \end{pmatrix}$. Второе слагаемое будет $\frac{\hbar\omega}{2} \sum_k \begin{pmatrix} a_{nk} \\ -b_{nk} \end{pmatrix} |k\rangle$.

Осталось третье, тут самая веселуха. Матричные операторы в обеих частях издеваются над столбцом, а операторы рождения и уничтожения апгрейдят и даунгрейдят ВФ:

$$\hbar\gamma\sum_k \begin{pmatrix} b_{nk} \\ 0 \end{pmatrix}\sqrt{k}\,|k-1\rangle + \hbar\gamma\sum_k \sqrt{k+1}\,|k+1\rangle \begin{pmatrix} 0 \\ a_{nk} \end{pmatrix})$$

И сумма всех трёх слагаемых равна EΨ, т.е. $E_n\cdot\sum_k \begin{pmatrix} a_{nk} \\ b_{nk} \end{pmatrix}|k\rangle$.

Приравниваем, попутно смещая у третьего слагаемого индекс:

$$\hbar\omega\sum_k \begin{pmatrix} a_{nk} \\ b_{nk} \end{pmatrix} k|k\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}\sum_k \begin{pmatrix} a_{nk} \\ -b_{nk} \end{pmatrix}|k\rangle + \hbar\gamma\sum_k \begin{pmatrix} b_{n,k+1}\cdot\sqrt{k+1} \\ a_{n,k-1}\cdot\sqrt{k} \end{pmatrix}|k\rangle = E_n\cdot\sum_k \begin{pmatrix} a_{nk} \\ b_{nk} \end{pmatrix}|k\rangle$$

Приравниваем коэфы при |k>:

$$\hbar\omega k\begin{pmatrix} a_{nk} \\ b_{nk} \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} a_{nk} \\ -b_{nk} \end{pmatrix} + \hbar\gamma\begin{pmatrix} b_{n,k+1}\cdot\sqrt{k+1} \\ a_{n,k-1}\cdot\sqrt{k} \end{pmatrix} = E_n\begin{pmatrix} a_{nk} \\ b_{nk} \end{pmatrix}$$

Приравниваем числа в верхнем и нижнем столбце:

$$\begin{cases} \hbar\omega k a_{nk} + \frac{\hbar\omega}{2}a_{nk} + \hbar\gamma\sqrt{k+1}\,b_{n,k+1} = E_n a_{nk} \\ \hbar\omega k b_{nk} - \frac{\hbar\omega}{2}b_{nk} + \hbar\gamma\sqrt{k}\,a_{nk-1} = E_n b_{nk} \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{nk}\left(E_n - \hbar\omega\left(k+\frac{1}{2}\right)\right) = \hbar\gamma\sqrt{k+1}\,b_{n,k+1} \\ b_{nk+1}\left(E_n - \hbar\omega\left(k+\frac{1}{2}\right)\right) = \hbar\gamma\sqrt{k+1}\,a_{n,k} \end{cases}$$

А далее надо решить эту систему. Тут Толоконников начинает какую-то ересь, которую я объяснить не могу.

Замечу, что Толоконников ищет решение немного в другой форме записи:

$$\sum_k a_{nk}|k\rangle\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sum b_{nk}|k\rangle\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Но легко видеть, что она эквивалентна моей, просто моя короче. (Вообще все семинаристы любят раскладывать всё по собственным столбцам матричных операторов, но это просто удлиняет запись, не внося ничего нового. А так $\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + b\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, но выражение в левой части банально проще ☺

Задача 3:

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \alpha\hat{x}\hat{y}$$

Где

$$\hat{H}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega_x^2 \hat{x}^2}{2}, \quad \hat{H}_y = \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega_y^2 y^2}{2}$$

Если бы α=0, то было бы всё охренительно. А если α не равно 0?
Вспомним, как такая задача решалась на теормехе. Там от пары переменных x, y мы переходили к другим, где всё разделялось и смешанное произведение исчезало. А теперь давайте и здесь так же:
Перейдём к новым переменным (штриховым), где гамильтониан будет

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x'^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y'^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 \hat{x}'^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 \hat{y}'^2}{2}$$

Старые переменные выразим через новые матрицей поворота

$$\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

, получится вот так:

$$p_x = p_x' \cos\alpha - p_y' \sin\alpha \qquad x = x'\cos\alpha - y'\sin\alpha$$
$$p_y = p_x' \sin\alpha + p_y' \cos\alpha \qquad y = x'\sin\alpha + y'\cos\alpha$$

(было лень писать крышечки, но в уме их держим!)
Теперь подставляем в старый гамильтониан и упрощаем. Однако если подставить «в лоб» нам будут постоянно мешаться всякие константы: масса, частоты. Поэтому Толоконников вводит k_x=sqrt(mω_x), k_y=sqrt(mω_y) (они имеют физический смысл коэффициента жёсткости пружинки) для упрощения записи. Тогда

$$\hat{H}_x = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + k_x \hat{x}^2\right), \quad \hat{H}_y = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_y^2 + k_y \hat{y}^2\right)$$

(штрихованный гамильтониан аналогично)
Далее начинаются выкладки, которые мне лень комментировать:

$$k_x x^2 + k_y y^2 + 2xy = k_x\left(x'^2\cos^2\alpha + y'^2\sin^2\alpha - x'y'\sin 2\alpha\right) +$$

$$+k_y\left(x'^2\sin^2\alpha+y'^2\cos^2\alpha+x'y'\sin 2\alpha\right)+\alpha\left(x'^2\sin 2\alpha-y'^2\sin 2\alpha+2x'y'\cos 2\alpha\right)=$$

$$=m\omega_x^2x'^2+m\omega_y^2y'^2$$

$$\begin{cases}-k_x\sin 2\alpha+k_y\sin 2\alpha+2\alpha\cos 2\alpha=0\\ k_x^2\cos^2\alpha+k_y^2\sin^2\alpha+\alpha\sin 2\alpha=m\omega_x^2\\ k_x\sin^2\alpha+k_y\cos^2\alpha-\alpha\sin 2\alpha=m\omega_y^2\end{cases};$$

$$\Downarrow\begin{cases}\operatorname{tg}2\alpha=-\dfrac{2\alpha}{k_y-k_x}\\ k_x+k_y=m(\omega_x^2+\omega_y^2)\\ (k_x-k_y)\cos 2\alpha+2\alpha\sin 2\alpha=m(\omega_x^2-\omega_y^2)\end{cases}$$

$$\cos 2\alpha=\pm\frac{|k_x-k_y|}{\sqrt{4\alpha^2+(k_x-k_y)^2}},\quad \sin 2\alpha=\pm\frac{2|\alpha|\,\mathrm{sign}(\alpha)\,\mathrm{sign}(k_x-k_y)}{\sqrt{4\alpha^2+(k_x-k_y)^2}}$$

$$\omega_x^2-\omega_y^2=\pm\frac{\mathrm{sign}(k_x-k_y)}{m}\sqrt{4\alpha^2+(k_x-k_y)^2}$$

$$\omega_x^2+\omega_y^2=\frac{k_x+k_y}{m},\quad \omega_{x,y}^2=\frac{1}{2m}\left(k_x+k_y\pm\mathrm{sign}(k_x-k_y)\sqrt{4\alpha^2+(k_x-k_y)^2}\right)$$

$$E_n=\hbar\omega_x\left(n_x+\frac12\right)+\hbar\omega_y\left(n_y+\frac12\right)$$

$$a'=\left(\frac{x'}{x'_{0x}}+i\frac{p_x'}{p'_{0x}}\right)$$

$$x'_{0x}=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}},\quad y'_{0y}=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_y}}$$

$$p'_{0x}=\sqrt{\hbar m\omega_x},\quad p'_{0y}=\sqrt{\hbar m\omega_y}$$

Замечу, что если бы от нас потребовали ТОЛЬКО СЗ, то мы могли бы сразу сказать ответ: да, существует искомое преобразование координат, а там-то это обычный двумерный гармонический осциллятор с известным спектором. Но от нас потребовали ещё СФ, а тут уже необходимо знать преобразование координат для пересчёта.