1.5. Потенциальная яма в импульсном представлении

Импульсное представление.
Распределение по импульсам.
Возврат в координатное представление

Импульсное представление

- Спектр квантовой задачи является инвариантом, не зависящим от выбора базиса
- *Импульсное представление* – фурье-преобразование координатного пространства
- Базис в импульсном представлении

$$\Phi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$$

- L – ширина ямы или ширина области, в которой локализован потенциал или волновые функции частицы
- Формально базис при построении гамильтоновой матрицы можно представить в виде

$$\Phi_{k=1} = |100 \dots 0\rangle; \quad \Phi_{k=2} = |010 \dots 0\rangle; \quad \dots; \quad \Phi_{k=n} = |000 \dots 1\rangle$$

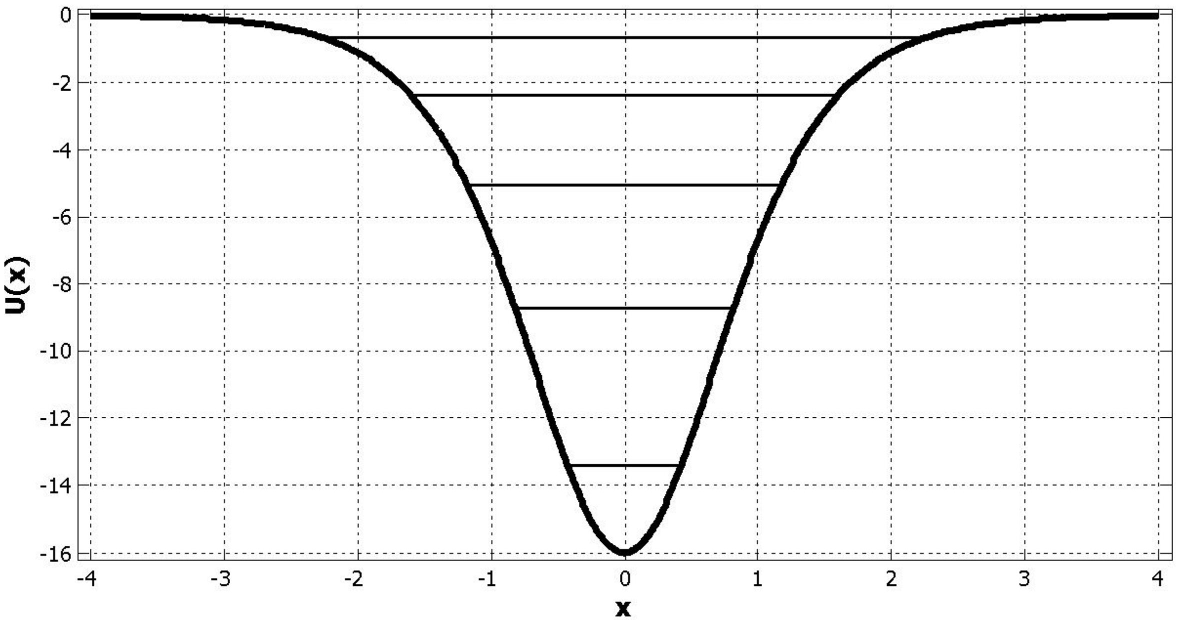
- Единица означает, что соответствующая базисная функция описывает состояние Φ_k частицы с импульсом k

Точное решение задачи

$$U(x) = -\frac{U}{\mathrm{ch}^2 x}$$

- Известно аналитическое решение этой задачи:

$$E_n = -\frac{1}{8}\left(1 - 2n + \sqrt{1+8U}\right)^2$$



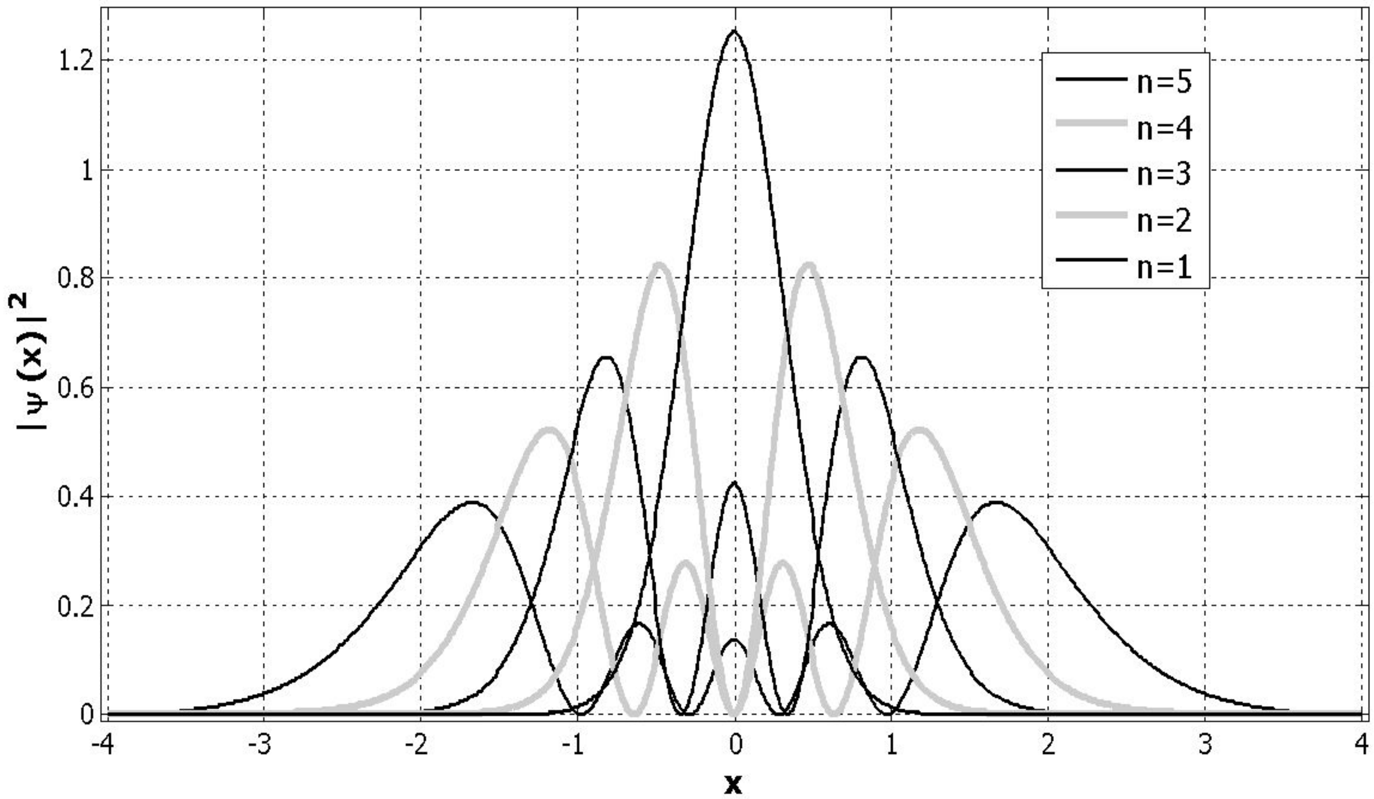
$$U = 16$$

$$E_1 = -13.4105; \quad E_2 = -8.7316; \quad E_1 = -5.0527;$$
$$E_4 = -2.3738; \quad E_5 = -0.6949; \quad E_6 = -0.0160$$

Решение в координатном представлении

- Решение задачи в координатном представлении (случай конечной ямы):

$$L = 2a = 8; \quad n = 800;$$
$$E_1 = -13.4110; \quad E_2 = -8.7319; \quad E_1 = -5.0532;$$
$$E_4 = -2.3743; \quad E_5 = -0.6845$$



Решение в импульсном представлении

- Для решения задачи в импульсном представлении следует записать гамильтониан в терминах импульсного базиса
- Кинетическая энергия диагональна в импульсном представлении:

$$\langle \Phi_p | H_{kin} | \Phi_{p'} \rangle = \frac{p^2}{2} \delta_{pp'}$$

- Слагаемое, отвечающее потенциальной энергии частицы, недиагональ

$$\langle \Phi_p | U(x) | \Phi_{p'} \rangle \equiv U(p,p') = \frac{1}{2a} \int_{-a}^{a} U(x) e^{i(p'-p)x} dx$$

$$U(p,p') = \frac{1}{2a} \sum_{i=1}^{m} U(x_i) e^{i(p'-p)x_i} h = -\frac{U}{n} \sum_{i=1}^{m} \frac{\cos[(p-p')x_i]}{\mathrm{ch}^2 x_i}$$

- Результат расчета практически не изменится, если последнее выражение рассчит

$$U(p,p') = -\frac{U\pi}{2a} \frac{p-p'}{\mathrm{sh}\left(\frac{\pi}{2}(p-p')\right)}$$

Решение в импульсном представлении

- Гамильтонова матрица в импульсном представлении:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{p_1^2}{2} + U(p_1, p_1) & U(p_1, p_2) & U(p_1, p_3) & \dots \\ U(p_2, p_1) & \frac{p_2^2}{2} + U(p_2, p_2) & U(p_2, p_3) & \dots \\ U(p_2, p_2) & U(p_3, p_2) & \frac{p_3^2}{2} + U(p_3, p_3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

- Матрица является плотной
- Результатом диагонализации будут собственные значения, являющиеся спектром системы, и собственные функции, отвечающие этим собственным значениям, которые теперь будут зависеть не от координаты, а от импульса частицы
- Значения импульса меняются от $-\pi/h$ до π/h с шагом π/a

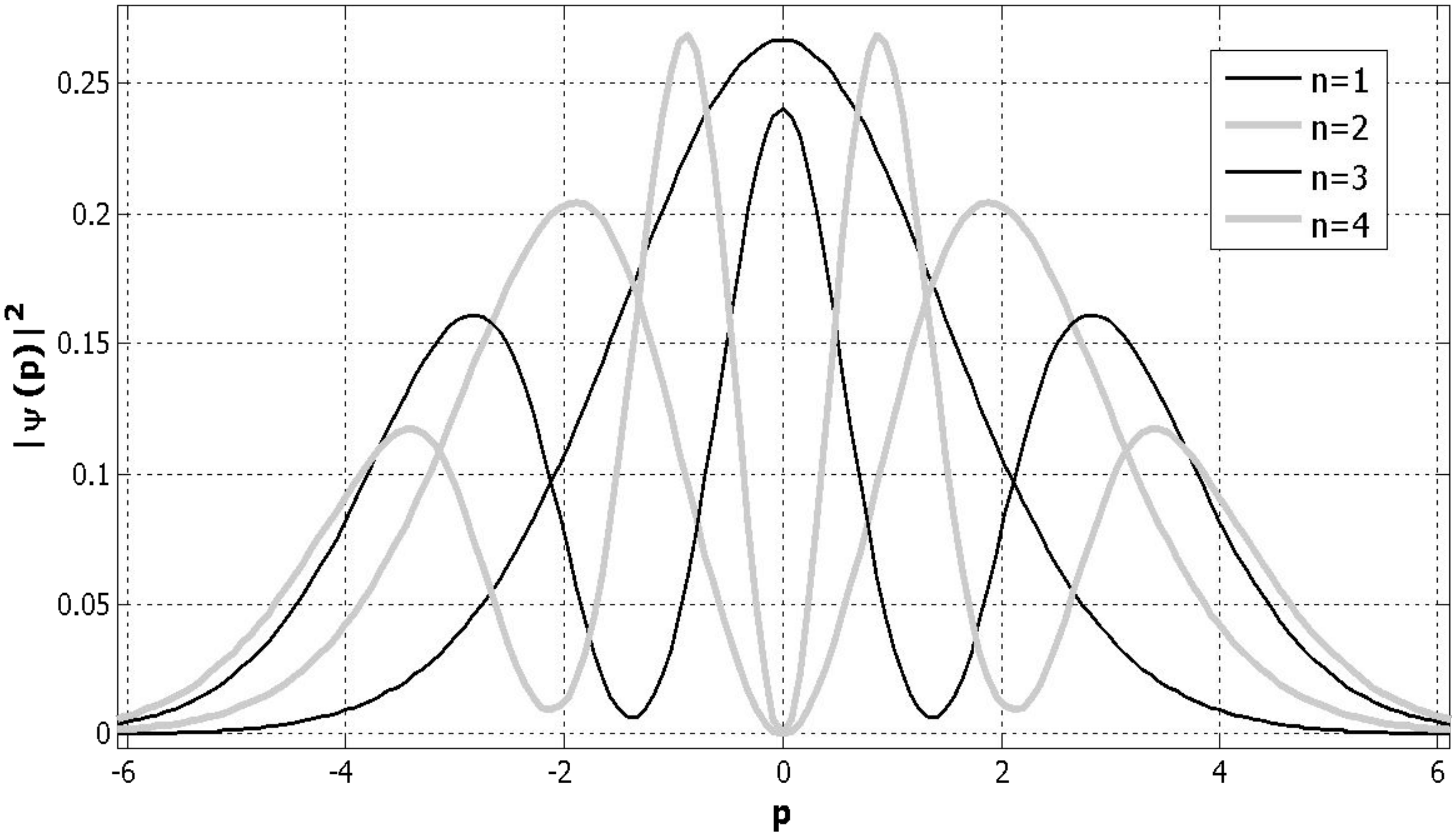
Распределение по импульсам

- Спектр системы не зависит от представления, в котором построена гамильтонова матрица. Решение задачи в импульсном представлении:

$$m = 800;$$
$$E_1 = -13.4110; \quad E_2 = -8.7316; \quad E_1 = -5.0527;$$
$$E_4 = -2.3737; \quad E_5 = -0.7056$$

- Собственные функции зависят от представления, в котором построена гамильтонова матрица. После диагонализации матрицы будут получены собственные функции в импульсном представлении.

Распределение по импульсам



Возврат в координатное представление

- Чтобы получить из собственных функций в импульсном представлении собственные функции в координатном представлении, необходимо выполнить обратное фурье-преобразование:

$$\Phi'_{\alpha}(p)=\sum_{k=1}^{m} C_{k\alpha}\Phi_k=\frac{1}{\sqrt{2a}}\sum_{k=1}^{m} C_{k\alpha}e^{ix\frac{2\pi}{h}k}$$

- Для четных собств

$$\Phi'_{\alpha}(x_j)=\frac{1}{\sqrt{2a}}\sum_{k=1}^{m} C_{k\alpha}\cos\left(x_j\frac{2\pi}{h}k\right)$$

- Для нечетных собс

$$\Phi'_{\alpha}(x_j)=\frac{1}{\sqrt{2a}}\sum_{k=1}^{m} C_{k\alpha}\sin\left(x_j\frac{2\pi}{h}k\right)$$

Возврат в координатное представление