

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

**Т.В. Лаптева
М.В. Иванченко
С.В. Денисов**

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Учебно-методическое пособие

Рекомендовано методической комиссией института
информационных технологий, математики и механики
для студентов ННГУ, обучающихся по
направлению подготовки 01.03.02 и 01.04.02 “Прикладная математика и
информатика”

Нижний Новгород
2017

УДК 519.6, 530.182

ББК В 22.311

Л-24

Л-24 Лаптева Т.В., Иванченко М.В., Денисов С.В. Математические методы исследования нестационарных квантовых систем: Учебно-методическое пособие. Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2017. 31 с.

Рецензент: к.ф.-м.н. **О.И. Канаков**

Физические процессы, лежащие в основе перспективных методов обработки информации, имеют принципиально квантовый характер. Современные проблемы, связанные с развитием квантовых вычислений, приводят к задаче исследования нестационарных квантовых систем, изменяющих свое состояние под влиянием сигнала. Цель данного пособия — дать представление о современных математических подходах и методах в этой области, в первую очередь в задачах исследования периодически модулируемых квантовых систем. Пособие предназначено для студентов института ИТММ ННГУ, специализирующихся в области математического моделирования. Рекомендуется при изучении дисциплин “Приложения вычислительной математики”, “Математическое моделирование”. Для успешного усвоения материала необходимо предварительное изучение дисциплины “Дифференциальные уравнения”.

Учебно-методическое пособие разработано при поддержке гранта РНФ 15-12-20029 и программы повышения конкурентноспособности ННГУ в 2017-2020 гг.

УДК 537.86,

ББК В 312.2, 22.311

© Т.В. Лаптева, М.В. Иванченко, С.В. Денисов, 2017

© Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2017

Содержание

Глава 1. Математический аппарат квантовой механики	5
1.1. Операторы, матрицы, векторы	6
1.1.1. Матрицы	6
1.1.2. Векторы. Понятие бра- и кет-векторов	6
1.1.3. Базис в гильбертовом пространстве	8
1.1.4. Операторы	10
1.2. Собственные значения и собственные функции	13
1.2.1. Численное нахождение собственных векторов и собственных значений	15
1.3. Различные представления векторов	15
1.4. Спектральное разложение матрицы	18
Глава 2. Спектральная пропaгация	19
2.1. Интегрирование уравнений со стационарными матрицами	19
2.2. Интегрирование уравнений с зависящими от времени матрицами. Теория Флоке	20
Глава 3. Квантовая динамика когерентных систем	22
3.1. Динамика систем со стационарными гамильтонианами	22
3.2. Динамика систем с периодическими во времени гамильтонианами	23
3.3. Количественные характеристики	24
Литература	29

Введение

Стремление увеличить вычислительную мощность компьютеров и обеспечить непревзойденные масштабы решаемых задач является одним из определяющих факторов развития суперкомпьютерных технологий. Важнейшее значение в этой гонке придается разработке фундаментально новых физических принципов вычислений, где наиболее многообещающим направлением является квантовый компьютеринг [1, 2, 3]. Квантовые компьютеры могут решать задачи такого же масштаба, что и современные суперкластеры, используя всего несколько сот кубитов.

Необходимость управления состоянием квантовой системы приводит к задаче исследования нестационарных систем, изменяющих свое состояние под влиянием сигнала. Кроме того, новые состояния квантовых систем, порожденные периодическим воздействием, зачастую приобретают уникальные и интересные с прикладной точки зрения свойства, что может быть использовано как в квантовых вычислениях, так и в создании метаматериалов. В этом свете, математическое исследование свойств периодически модулируемых квантовых систем приобретает особую значимость.

Настоящее пособие представляет собой введение в данную область, изложенное с позиций прикладной математики. Основная его цель — ознакомить читателя с математическим языком квантовой механики, описанием квантовых когерентных (бездиссипативных) систем, математической постановкой и методами решения стационарных и нестационарных задач, в том числе, вычислительными. Предварительных знаний из области квантовой механики не предполагается; авторы также не ставят перед собой задачу ее систематического изложения, что вряд ли возможно и целесообразно в данном формате. Углубленное изучение может быть рекомендовано либо в рамках специальных курсов, либо непосредственно в процессе исследовательской работы в составе междисциплинарных научных коллективов.

В первой главе представлены основные понятия квантовой механики и элементы линейной алгебры, на которую опирается ее математический аппарат. Во второй главе рассмотрены основы теории эволюции стационарных и нестационарных квантовых систем, а в третьей главе изложены практические подходы к численному решению этих задач. В каждой главе имеются практические задания, упражнения. Приложения содержат справочные материалы к главам.

Глава 1. Математический аппарат квантовой механики

Математический аппарат квантовой механики строится на наборе постулатов [4], одним из которых является утверждение о том, что в общем случае квантовой системе соответствует бесконечномерное линейное векторное комплексное *пространство состояний*¹ \mathcal{H} . Здесь мы будем рассматривать только закрытые, когерентные системы. Состояния таких систем описываются векторами, принадлежащими пространству состояний².

Зная вектор состояния ψ квантовой системы можно определить ее свойства. Для этого необходимо определить математические величины, которые в математическом аппарате квантовой механики соответствуют *наблюдаемым* величинам³. Утверждается, что каждой наблюдаемой A однозначно сопоставляется линейный самосопряженный (эрмитов) оператор \hat{A} , собственные значения которого численно совпадают со всеми возможными результатами измерения наблюдаемой A . Важно, что любой линейный оператор может быть представлен в виде квадратной матрицы.

Эволюция состояния ψ гамильтоновой системы [5, 6] во времени определяется нестационарным *уравнением Шредингера* [4]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi, \quad (1.1)$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h — постоянная Планка, $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ — оператор полной энергии или *гамильтониан*, а \hat{T} и \hat{V} — операторы кинетической и потенциальной энергий, соответственно. Решение уравнения Шредингера является одной из основных задач квантовой механики. Точное решение может быть получено только для отдельных, сравнительно простых систем со стационарными, не зависящими от времени гамильтонианами (квантовый гармонический осциллятор, атом водорода и т.п.). Для большинства реальных систем задача является крайне нетривиальной и требует специальных аналитических и численных методов решения.

Вышеприведенные утверждения⁴ определяют математический аппарат, пригодный для описания широкого спектра задач квантовой механики гамиль-

¹С математической точки зрения — *гильбертово пространство*.

²Вектор состояния ψ представляет собой (наиболее) исчерпывающее описание закрытой системы в выбранном базисе. Причем, векторы состояний ψ_1 и ψ_2 описывают одно и то же состояние тогда и только тогда, когда $\psi_2 = c\psi_1$, где c — произвольное комплексное число.

³Любая микросистема обладает хотя бы одной экспериментально измеряемой физической величиной, которая для краткости называется *наблюдаемой*.

⁴Мы конкретизируем их в последующих разделах.

тоновых систем. Данные задачи непосредственно связаны с векторами и/или матрицами (т.е. матрицами операторов), что позволяет применить к их решению мощный аппарат линейной алгебры [7, 8].

1.1. Операторы, матрицы, векторы

1.1.1. Матрицы

Мы будем иметь дело с квадратными матрицами $A \equiv A_{N \times N} = (a_{ij})$, где N может быть числом состояний квантовой системы, числом состояний ортонормированного базиса, выбранного для представления квантовой системы и т.п., в зависимости от способа решения квантово-механической задачи.

В общем случае матрица A является комплекснозначной матрицей произвольного вида (т.е. элементы матрицы принадлежат полю комплексных чисел — $a_{ij} \in \mathbb{C}$, и для них определены соответствующие операции сложения, вычитания, умножения и деления [7, 8]). Таким образом, для матрицы A определены основные операции⁵ сложения, умножения, умножения на скаляр, транспонирования, а также комплексного и эрмитового сопряжения. Напомним, что матрица A^\dagger называется *эрмитово-сопряженной* матрице A и получается последовательным применением операций *транспонирования* ($A = (a_{ij}) \mapsto A^T = (a_{ji})$) и *комплексного сопряжения* ($A^T = (a_{ji}) \mapsto (A^T)^* = (a_{ji}^*)$).

В дальнейшем мы будем иметь дело с двумя классами матриц:

- матрица A — эрмитова, когда она является самосопряженной $A = A^\dagger$.
- матрица A — унитарная, когда ее эрмитово сопряжение совпадает с обратной матрицей $AA^\dagger = \mathbb{I}$, где \mathbb{I} — единичная матрица⁶.

1.1.2. Векторы. Понятие бра- и кет-векторов

В простейшем случае *вектор* есть математический объект, характеризующийся величиной и направлением. Общепринятыми являются обозначения некоторого вектора a как \mathbf{a} или \vec{a} . Вектор, представленный набором N элементов (компонент) в некотором координатном пространстве можно записать,

⁵См. подробнее в приложении А.

⁶Напомним, что квадратная матрица называется *диагональной*, если все элементы этой матрицы, не лежащие на главной диагонали, равны нулю. Диагональная матрица называется *единичной*, если все элементы этой матрицы, расположенные на главной диагонали, равны 1.

например, в следующем виде:

$$\vec{a} = \sum_{n=1}^N a_n \vec{e}_n = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

где a_n — компоненты вектора \vec{a} в N -мерном пространстве, а \vec{e}_n — единичные базисные векторы координатного пространства.

Уточним, что используемые в квантовой механике пространства состояний имеют характерные особенности. Во-первых, определение (1.2) обобщается на случай N -мерного векторного пространства над полем комплексных чисел, $\vec{a} \in \mathbb{C}^N$, где соответствующие координаты a_n будут комплексными числами. Во-вторых, могут рассматриваться бесконечномерные пространства состояний. Однако, при работе на физическом уровне строгости последнее отличие несущественно, и мы будем работать с бесконечномерными пространствами как с конечномерными.

Традиционный способ обозначения (1.2) векторов в пространствах состояний достаточно широко используется и в литературе по квантовой механике. Некоторым недостатком этого способа можно назвать то, что различия между векторными и скалярными величинами зачастую понятны только из контекста задачи. Поэтому распространение получил способ обозначения векторов, предложенный П. Дираком [9]. В *формализме Дирака* вводятся два пространства состояний: пространство состояний *кет-векторов*, которое почти полностью аналогично описанному выше пространству состояний, и сопряженное ему, двойственное пространство *бра-векторов*, которое не имеет аналога в проведенном выше рассмотрении⁷. В отличие от традиционного обозначения, бра- и кет-векторы обозначаются вертикальной и треугольной скобками. А именно, кет-вектор, соответствующий некоторому состоянию ψ квантовой системы, записывается в виде $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

где $\psi_n \in \mathbb{C}$ ($n = 1, \dots, N$) представляют собой “компоненты” вектора состояния в некотором N -мерном (возможно, бесконечномерном) пространстве.

⁷от англ. bra-ket < bracket — скобка.

Бра-вектор обозначается как $\langle\psi|$ и может быть получен из кет-вектора $|\psi\rangle$ операцией эрмитового сопряжения:

$$\langle\psi| \equiv |\psi\rangle^\dagger = (\psi_1^* \ \psi_2^* \ \dots \ \psi_N^*). \quad (1.4)$$

Как мы видим, кет- и бра-векторы имеют различную природу. Они принадлежат разным пространствам — столбцов и строк, поэтому операции над ними имеют ряд своих свойств/особенностей. Приведем некоторые из них:

- соответствие между кет- и бра-векторами *антилинейно*. Иначе говоря, бра-вектор, сопряженный кет-вектору $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$, есть $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger = c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2|$.
- произведение кет-векторов, также как произведение бра-векторов, не определено.
- любым двум кет-векторам $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ можно сопоставить некоторое комплексное число $\langle\psi| \cdot |\phi\rangle \equiv \langle\psi|\phi\rangle$, называемое *скалярным произведением*:

$$\langle\psi|\phi\rangle = (\psi_1^* \ \psi_2^* \ \dots \ \psi_N^*) \cdot \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_N \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

- два кет-вектора $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ называются ортогональными, если их скалярное произведение $\langle\psi|\phi\rangle = 0$.
- длиной или *нормой* кет-вектора $|\psi\rangle$ называется число $\|\psi\| > 0$, такое, что

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (1.6)$$

- всякому вектору $|\psi\rangle$ соответствует положительный скалярный квадрат $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$, причем, равенство нулю возможно только при $|\psi\rangle = 0$.

1.1.3. Базис в гильбертовом пространстве

Как уже было сказано выше, совокупность всех возможных векторов состояний (в формализме Дирака — кет-векторов) с конечной нормой образует бесконечномерное линейное векторное комплексное пространство \mathcal{H} , которое

является *гильбертовым*⁸.

Рассмотрим подробнее вопрос о базисе в гильбертовом пространстве. *Базисом* гильбертова пространства \mathcal{H} называется счетное множество линейно независимых векторов $|n\rangle$, таких, что любой кет-вектор $|\psi\rangle$ пространства \mathcal{H} однозначно представляется в виде линейной комбинации

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\phi_n\rangle. \quad (1.7)$$

Базис (1.7) является *ортонормированным*, если

$$\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}, \quad (1.8)$$

где $\delta_{nn'}$ — символ Кронекера.

Используя соотношение (1.8) и аксиомы скалярного произведения, легко показать, что коэффициенты разложения в (1.7) могут быть найдены следующим образом:

$$\langle \phi_{n'} | \psi \rangle = \sum_n C_n \langle \phi_{n'} | \phi_n \rangle = \sum_n C_n \delta_{nn'} = C_{n'}. \quad (1.9)$$

Очевидно, что разложение (1.9) является обобщением разложения вектора по ортонормированной системе ортов (1.2) на случай многомерных комплексных векторных пространств, а набор коэффициентов C_n является аналогом ортогональных проекций разлагаемого вектора на эти орты. Другими словами, $C_n = \langle \phi_n | \psi \rangle$ являются компонентами вектора состояния в заданном ортонормированном базисе.

В рамках данного пособия мы в большинстве случаев будем иметь дело лишь с дискретными множествами векторов состояний $\{|\phi_n\rangle\}$. Однако, кроме дискретных базисных наборов в квантовой механике могут использоваться полные ортонормированные наборы $\{|\phi(\xi)\rangle\}$, базисные векторы в которых нумеруются индексами, пробегающими непрерывные множества значений (т.е. вещественная переменная ξ принимает все множество значений, характерное для используемого набора). Условие ортонормированности (1.8) тогда принимает вид

$$\langle \phi(\xi) | \phi(\xi') \rangle = \delta(\xi - \xi'), \quad (1.10)$$

где $\delta(\xi - \xi')$ — дельта-функция. При этом, в разложениях (1.7) и (1.9) вместо сумм возникают интегралы по области изменения переменной ξ .

⁸Напомним, что *гильбертовым* пространством называется бесконечномерное линейное пространство над полем комплексных чисел, в котором для любых двух элементов пространства определено скалярное произведение (1.5), и которое является полным относительно порожденной этим скалярным произведением метрики (1.6).

1.1.4. Операторы

Как было упомянуто, базовым для математического аппарата квантовой механики является постулат о линейных самосопряженных операторах, согласно которому каждой квантовомеханической величине A соответствует некоторый линейный самосопряженный, *эрмитов оператор* \hat{A} , а наблюдаемым величинам — собственные числа этого оператора [4]. Определим сначала наиболее общее понятие оператора, используемое в квантовой механике. Под *оператором* \hat{A} будем понимать правило, которое ставит в соответствие любому вектору $|\psi\rangle$ из пространства состояний другой вектор $|\phi\rangle$ из этого же пространства: $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$.

Квантовая механика чаще всего имеет дело с линейными операторами, действующими на любую линейную комбинацию векторов как $\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle$. Среди разнообразных линейных операторов чаще всего приходится иметь дело с эрмитовыми и унитарными операторами. Требование эрмитовости связано с необходимой вещественностью значений наблюдаемых физических величин (координаты, импульса, энергии, спина, и т.д.), а требование линейности — с принципом суперпозиции состояний.

Оператор \hat{A} будет эрмитовым (самосопряженным), если

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \quad (1.11)$$

Унитарный оператор \hat{U} удовлетворяет соотношению

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}, \quad (1.12)$$

где $\hat{1}$ — единичный оператор⁹.

Нетрудно показать, что унитарные операторы сохраняют скалярные произведения векторов, т.е. для любых векторов $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ выполняется следующее равенство:

$$\langle \hat{U}\psi | \hat{U}\phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle. \quad (1.13)$$

С учетом данного соотношения унитарный оператор можно рассматривать как оператор совместного поворота всех векторов в пространстве состояний.

Для краткости в рамках данного пособия мы не обсуждаем свойства линейных операторов (аддитивность, однородность) и действия над линейными операторами (умножение, сложение, сопряжение)¹⁰. Однако важно напомнить, что в отличие от суммы, произведение операторов в общем случае зави-

⁹Частный случай линейного оператора, возвращающий операнд — некоторое состояние $|\psi\rangle$ — в неизменном виде, то есть $\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

¹⁰Подробнее см., например, в [4].

сит от порядка следования сомножителей: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Таким образом, произведение операторов некоммутативно, т.е. не подчиняется “переместительному закону”. Если все же имеет место равенство $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, то операторы \hat{A} и \hat{B} называют коммутирующими. В квантовой механике для определения этого свойства операторов оказывается удобным ввести специальную конструкцию — так называемый *коммутатор*:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (1.14)$$

Очевидно, что в случае коммутирующих операторов (1.14) становится нулевым оператором¹¹.

Перечислим операторы основных физических величин в квантовой механике и приведем их вид в координатном представлении:

- *оператор координаты*, действие которого сводится к умножению операнда, некоторого состояния $|\psi\rangle$, на соответствующую пространственную координату: $\hat{x}|\psi(x)\rangle = x|\psi(x)\rangle$ и т.п. Тогда оператор радиус-вектора имеет вид $\hat{\vec{r}}|\psi\rangle = (\vec{e}_x\hat{x} + \vec{e}_y\hat{y} + \vec{e}_z\hat{z})|\psi(x, y, z)\rangle$.
- *оператор импульса* имеет вид $\hat{p}_\xi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\xi}$, где ξ — соответствующая пространственная координата x, y или z . С учетом этого, векторный оператор импульса запишется как $\hat{\vec{p}}(x, y, z) = -i\hbar\nabla$, где $\nabla = \vec{e}_x\frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y\frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z\frac{\partial}{\partial z}$.
- *оператор кинетической энергии*: классическая формула связи кинетической энергии частицы с квадратом ее импульса позволяет записать аналогичное соотношение между соответствующими операторами, т.е. $\hat{K} = \frac{\hat{p}^2(x, y, z)}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, где $\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.
- *оператор потенциальной энергии*. Если частица движется в стационарном силовом поле, и ее потенциальная энергия $V = V(\vec{r})$ определена в любой точке пространства, то оператор потенциальной энергии \hat{V} определяется как оператор умножения на функцию $V(\vec{r})$, то есть $\hat{V}|\psi\rangle = V(\vec{r})|\psi(\vec{r})\rangle$.
- *оператор полной энергии*: полная энергия частицы в классической механике есть сумма кинетической и потенциальной энергий, поэтому в квантовой механике оператор полной энергии \hat{H} определяется как сумма операторов кинетической и потенциальной энергий $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2(\vec{r})}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, y, z)$.

¹¹Оператор $\hat{\Theta}$ будет нулевым, если при его действии на произвольное состояние $|\psi\rangle$ результатом является $\hat{\Theta}|\psi\rangle = |0\rangle$.

В классической механике полную энергию системы, выраженную через ее координаты и импульс, называют функцией Гамильтона [5, 6]. Поэтому в квантовой механике оператор полной энергии \hat{H} называют оператором функции Гамильтона или просто *гамильтонианом*. Гамильтониан является основным оператором квантовой механики, поскольку, выбирая конкретный вид гамильтониана с учетом силового поля, действующего на частицу, мы математически формулируем все особенности квантовой системы. Тогда фундаментальное уравнение механики — уравнение Шредингера, в операторной форме примет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.15)$$

или в координатном представлении (см. раздел 1.3.)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\xi, t) = \hat{H} \psi(\xi, t), \quad (1.16)$$

где ξ — соответствующая пространственная координата x, y или z .

Важно отметить, что в некотором базисе любой линейный оператор может быть представлен в виде квадратной матрицы. Например, линейному оператору \hat{A} , действующему в пространстве кет-векторов с ортонормированным базисом $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_N\rangle\}$, можно поставить в соответствие комплекснозначную квадратную матрицу размера N — *матрицу оператора*:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \left[\sum_{l=1}^N |a_l\rangle \langle a_l| \right] \hat{A} \left[\sum_{n=1}^N |a_n\rangle \langle a_n| \right] = \\ &= \sum_{l=1}^N \sum_{n=1}^N \langle a_l| \hat{A} |a_n\rangle |a_l\rangle \langle a_n| \leftrightarrow \begin{pmatrix} \langle a_1| \hat{A} |a_1\rangle & \cdots & \langle a_1| \hat{A} |a_N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a_N| \hat{A} |a_1\rangle & \cdots & \langle a_N| \hat{A} |a_N\rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

где величины $\langle a_l| \hat{A} |a_n\rangle$ — матричные элементы, получаемые в результате надлежащим образом определенного скалярного произведения состояний a_l и $\hat{A}a_n$.

Такое представление квантовомеханических операторов в матричной форме позволяет записать уравнения квантовой механики аналогично уравнениям классической механики, но с тем принципиальным отличием, что классические физические величины (и соответствующие им операторы) заменены соответствующими векторами и матрицами. Это позволяет при решении задач квантовой механики применить математический аппарат линейной алгебры, что в ряде случаев (особенно, при численном решении задач) особенно удобно. Здесь и далее в нашем курсе мы будем использовать только матричную

форму уравнений квантовой механики, оперирующих векторами и матрицами.

Упражнение 1. Записав операторы координаты и импульса в координатном базисе, вычислить коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}]$ и показать, что эти операторы не коммутируют.

Упражнение 2. Используя разложение в базисе плоских волн, в котором, например, состояние $|\psi(t)\rangle$ представляется в виде

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-N}^N \phi_n(t) e^{inx}, \quad (1.18)$$

записать уравнение Шредингера (1.16) с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad V(x) = \sum_{k=-M}^M C_k e^{ikx}, \quad M = 2 \quad (1.19)$$

в матричном виде (то есть представить оператор \hat{H} в виде матрицы).

1.2. Собственные значения и собственные функции

Собственный вектор является понятием в линейной алгебре, определяемым для квадратной матрицы, произвольного линейного преобразования или оператора как вектор, применение к которому дает коллинеарный вектор — тот же вектор, умноженный на некоторое скалярное значение, называемое *собственным значением*.

Правым собственным вектором матрицы A размера N называется такой ненулевой вектор \vec{a} , что для некоторого λ выполняется соотношение¹²

$$A\vec{a} = \lambda\vec{a}, \quad (1.20)$$

где λ — соответствующее собственное значение.

Если матрица A диагонализуема, то она имеет N собственных различных правых векторов $\{\vec{a}_n\}_{n=1}^N$ и N соответствующих им собственных значений $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$.

Левым собственным вектором матрицы A размера N называется такой ненулевой вектор-строка \vec{b} , что для некоторого ν выполняется

$$\vec{b}A = \nu\vec{b}, \quad (1.21)$$

¹²Аналогичным образом, если при действии некоторого оператора \hat{A} на состояние $|\psi\rangle$ получается то же состояние, умноженное на число, т.е. выполняется соотношение $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, то такое состояние называют *собственным вектором* оператора, а число λ — его *собственным значением*.

где ν — соответствующее собственное значение.

Аналогично, если матрица A диагонализуема, то она имеет N собственных различных левых векторов $\{\vec{b}_m\}_{m=1}^N$ и N соответствующих им собственных значений $\{\nu_m\}_{m=1}^N$. Кроме того, множество $\{\vec{b}_m\}$ всегда можно упорядочить таким образом, что $\mu_n = \lambda_n$. Иными словами, множество собственных значений — *спектр* матрицы A является универсальным, то есть одинаковым для правых и левых векторов¹³.

Правые и левые векторы диагонализуемой матрицы образуют двойственное пространство состояний (базис), таким образом скалярное произведение двух векторов¹⁴ \vec{a}_n и $\vec{b}_m \forall n, m$

$$\vec{b}_m \cdot \vec{a}_n = b_1 a_1^* + b_1 a_2^* + \dots + b_N a_N^* = \delta_{mn}, \quad (1.22)$$

где δ_{mn} — символ Кронекера.

Для обозначения правых и левых векторов удобен формализм бра- и кет-векторов. В этих обозначениях выражение (1.22) приобретает вид

$$\langle b_m | a_n \rangle = \delta_{mn}. \quad (1.23)$$

Следует отметить важные частные случаи:

- Собственные значения эрмитовой матрицы являются действительными числами, а правые и левые собственные векторы связаны следующим соотношением

$$\langle b_n | = |a_n \rangle^\dagger. \quad (1.24)$$

Иными словами, для элементов векторов справедливо $b_n^{(k)} = [a_n^{(k)}]^*$.

- Собственные вектора унитарной матрицы также связаны соотношением (1.24). Собственные значения λ_n при этом — комплексные числа, лежащие на единичной окружности (т.е. $|\lambda_n| = 1$).

Таким образом, в обоих вышеперечисленных случаях достаточно решить задачу (1.20) и найти набор правых собственных векторов. Левые собственные вектора могут быть получены посредством преобразования (1.24).

Упражнение 3. Пусть уравнение Шредингера с нестационарным гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \cos(t)V(x) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [1 + \cos(t)]V(x), \quad (1.25)$$

записано в базисе, определенном в Упражнении 2. Перепишите уравнение в

¹³В дальнейшем мы будем предполагать, что упомянутое упорядочение проведено.

¹⁴Напомним, что в ряде случаев собственные векторы и собственные значения могут быть комплексными.

собственном базисе оператора \hat{H}_0 , считая известными собственные состояния $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^N$ и соответствующие им собственные энергии $\{E_n\}_{n=1}^N$.

1.2.1. Численное нахождение собственных векторов и собственных значений

Аналитически найти собственные векторы и собственные числа можно лишь для относительно небольших матриц. В большинстве же случаев задача (1.20) решается численно. Оставляя в стороне собственно численные методы [7, 8], укажем наиболее известные численные процедуры диагонализации матриц:

- библиотеки LAPACK (Linear Algebra Package [10]) и/или MKL (Intel Math Kernel Library [11]), содержат методы для решения основных задач линейной алгебры. В частности, для нахождения собственных значений, правых и левых векторов произвольной матрицы размера N используются процедуры *zgeev* или *zheev* для эрмитовой матрицы.
- пакет прикладных программ MATLAB¹⁵, а именно, процедура диагонализации *eig*.
- процедуры *numpy.linalg.eig* (для произвольной квадратной матрицы) или *linalg.eigh* (для эрмитовой или симметричной матриц) библиотеки NumPy¹⁶ для языка программирования Python¹⁷.

Практическое задание 1. Сгенерировать случайную эрмитову матрицу размера N (см. приложение Б). Найти ее собственные значения и векторы численно. Показать, что при $N \rightarrow \infty$ плотность распределения собственных значений (так называемых уровней) подчиняется полукруговому распределению Вигнера, а распределение межуровневых расстояний s случайной эрмитовой матрицы близко к распределению Вигнера-Дайсона (в отличие от распределения Пуассона, $\mathcal{P}(s) = e^{-s}$, характерного для случая некоррелированного положения уровней).

1.3. Различные представления векторов

Как мы уже знаем, вектор состояния $|\psi\rangle$ квантовой системы, принадлежащий некоторому абстрактному векторному пространству, однозначно опреде-

¹⁵<http://www.mathworks.com/>

¹⁶<http://www.numpy.org/>

¹⁷<https://www.python.org/>

ляется своими “координатами” (его проекциями на некоторые базисные векторы) в некотором ортонормированном базисе¹⁸ $\{|a_n\rangle\}$, причем в разных базисах координаты одного и того же вектора строго говоря различны. При этом говорится, что мы имеем дело с a -представлением. Тогда

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi(a_n)|a_n\rangle \quad (1.26)$$

где $\langle a_m|a_n\rangle = \delta_{mn}$, а $\{|a_n\rangle\}$ – некоторый полный ортонормированный базис. Домножив разложение (1.26) на $\langle a_m|$, получим:

$$\langle a_m|\psi\rangle = \sum_n \psi(a_n)\langle a_m|a_n\rangle = \sum_n \psi(a_n)\delta_{mn} = \psi(a_m). \quad (1.27)$$

Совокупность величин $\psi(a_m) = \langle a_m|\psi\rangle$, таким образом, определяет состояние $|\psi\rangle$ в a -представлении.

В случае непрерывного набора базисных функций $|a\rangle$ a -представление для состояния $|\psi\rangle$ запишется в виде:

$$|\psi\rangle = \int \psi(a)|a\rangle da, \quad (1.28)$$

где $\langle a|a'\rangle = \delta(a - a')$.

Рассмотрим правила перехода между различными представлениями. Возьмем некоторые a - и b -представления, которые обладают непрерывным спектром. Тогда произвольный вектор состояния $|\psi\rangle$ квантовой системы можно разложить по базису следующим образом:

$$|\psi\rangle = \int \psi(a)|a\rangle da = \int \psi(b)|b\rangle db, \quad (1.29)$$

где $\langle a|a'\rangle = \delta(a - a')$ и $\langle b|b'\rangle = \delta(b - b')$ – нормированные собственные векторы некоторых эрмитовых операторов \hat{A} и \hat{B} ¹⁹, т.е. $\hat{A}|a\rangle = \alpha|a\rangle$ и $\hat{B}|b\rangle = \beta|b\rangle$. Коэффициенты $\psi(a) = \langle a|\psi\rangle$ и $\psi(b) = \langle b|\psi\rangle$ являются состояниями системы в a - и b -представлениях соответственно.

Как осуществить переход от a -представления к b -представлению и/или наоборот? Сначала рассмотрим связь между состояниями. Домножим $|\psi\rangle = \int \psi(a)|a\rangle da$ на $\langle b|$. Тогда

$$\psi(b) = \langle b|\psi\rangle = \int \psi(a)\langle b|a\rangle da \equiv \int \psi(a)\Psi_a(b) da, \quad (1.30)$$

¹⁸Для простоты рассмотрим сначала дискретное множество базисных векторов.

¹⁹Напомним, что собственные векторы любого эрмитового оператора образуют базис в гильбертовом пространстве.

где $\Psi_a(b) \equiv \langle b|a \rangle$ – собственные функции оператора \hat{A} в b -представлении:

$$\int \langle b|\hat{A}|b' \rangle \Psi_a(b') db' = \alpha \Psi_a(b) \quad (1.31)$$

с нормировкой

$$\int \Psi_{a'}^*(b) \Psi_a(b) db = \delta(a - a'). \quad (1.32)$$

Уравнение (1.31) легко получить путем последовательности преобразований:

$$\hat{A}|a \rangle = \alpha|a \rangle \Rightarrow \hat{A}\hat{1}_{b'}|a \rangle = \alpha\hat{1}_{b'}|a \rangle \Rightarrow \int \hat{A}|b' \rangle \Psi_a(b') db' = \int \alpha \Psi_a(b)|b' \rangle db', \quad (1.33)$$

где $\hat{1}_{b'} = \int |b' \rangle \langle b'| db'$ – единичный оператор в b' -представлении. Домножим последнее равенство на $\langle b|$ и с учетом $\langle b|b' \rangle = \delta(b - b')$ получим (1.31).

Таким образом, $\langle b|\hat{L}|b' \rangle$ – так называемое *ядро* некоторого линейного оператора \hat{L} в b -представлении. Как будет выглядеть ядро этого же оператора в a -представлении? С помощью единичных операторов запишем

$$\langle a|\hat{L}|a' \rangle = \langle a|\hat{1}_b \hat{L} \hat{1}_{b'}|a' \rangle = \int \langle a|b \rangle \langle b|\hat{L}|b' \rangle \langle b'|a' \rangle db db'. \quad (1.34)$$

Тогда общая формула перехода будет иметь вид:

$$\langle a|\hat{L}|a' \rangle = \int \Psi_a^*(b) \langle b|\hat{L}|b' \rangle \Psi_{a'}(b') db db'. \quad (1.35)$$

В заключении отметим, что представление играет роль, подобную системе координат в векторном анализе: задачи векторного анализа можно решить в общем виде, без использования конкретной координатной системы. Однако, при проведении конкретных вычислений удобно выбрать подходящую систему координат, в которой вычисления упрощаются. Так же и при решении задач квантовой механики в общем виде удобнее использовать дираковский формализм бра- и кет-векторов вне конкретного представления. Однако, при проведении конкретных вычислений все же необходимо использовать преимущество подходящего конкретного представления.

Упражнение 4. Переписать состояние $\psi(p)$, заданное в импульсном представлении, в координатном представлении, принимая во внимание, что нормированные собственные вектора оператора координаты \hat{x} в импульсном представлении имеют вид $\Psi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar}$.

1.4. Спектральное разложение матрицы

Спектральное разложение матрицы — это представление любой диагонализуемой квадратной матрицы A в виде

$$A = V\Lambda V^{-1}, \quad (1.36)$$

где Λ — диагональная матрица с соответствующими собственными значениями матрицы A на главной диагонали, V — матрица, столбцы которой являются ортонормированными собственными векторами матрицы A , V^{-1} — матрица, обратная матрице V [7, 8].

Спектральное разложение может использоваться для нахождения собственных значений и собственных векторов матрицы, решения систем линейных уравнений, обращения матрицы, и т.п. Кроме того, для матриц определенной симметрии, спектральное разложение представляет собой произведение матриц, обладающих некоторыми определенными свойствами, например, ортогональностью, симметричностью, диагональностью, что в ряде случаев облегчает рассмотрение, например, свойств линейных операторов с матрицей A . В частности, спектральное разложение эрмитовой матрицы имеет вид

$$A = U\Lambda U^\dagger, \quad (1.37)$$

где Λ — вещественная диагональная матрица, содержащая на диагонали собственные значения матрицы A , U — унитарная матрица, состоящая из собственных векторов матрицы A .

Глава 2. Спектральная пропaгация

2.1. Интегрирование уравнений со стационарными матрицами

Рассмотрим дифференциальное уравнение вида

$$\frac{\partial}{\partial t}|C\rangle = A|C\rangle, \quad (2.1)$$

где $|C\rangle = |C(t)\rangle = (c_1(t) \ c_2(t) \ \dots \ c_N(t))^T$ – зависящий от времени кет-вектор и A – некоторая стационарная (не зависящая от времени) матрица размера N .

Если матрица A диагонализуема, то ее правые и левые собственные вектора $|a_n\rangle$ и $\langle a_n|$, соответствующие одному и тому же собственному значению λ_n , составляют полный дуальный базис $\{\langle a_n|, |a_n\rangle\}_{n=1}^N$. Таким образом, любой кет-вектор может быть разложен по этому базису, то есть представлен в виде

$$|C\rangle = \sum_{n=1}^N C_n |a_n\rangle, \quad (2.2)$$

где $C_n = \langle a_n|C\rangle$ есть скалярное произведение двух векторов (1.5).

В собственном базисе матрица A приобретает диагональный вид: $A_{m,n} = \delta_{m,n}\lambda_n$, а уравнение (2.1) переходит в систему N независимых уравнений

$$\frac{\partial}{\partial t}C_n = \lambda_n C_n. \quad (2.3)$$

Таким образом, вектор $|C(t)\rangle$ может быть найден в любой момент времени t для заданного начального условия $|C^{(0)}\rangle \equiv |C(0)\rangle$, а именно:

$$|C(t)\rangle = \sum_{n=1}^N \langle a_n|C^{(0)}\rangle e^{\lambda_n t} |a_n\rangle. \quad (2.4)$$

Уравнение (2.4) и определяет *численно точную*¹ *спектральную пропaгацию* вектора $|C\rangle$ из начальных условий $|C^{(0)}\rangle$.

¹Численно точная в данном случае означает, что $\lambda_n, \langle a_n|, |a_n\rangle$ были найдены численным образом.

2.2. Интегрирование уравнений с зависящими от времени матрицами. Теория Флоке

Рассмотрим теперь уравнение (2.1) для нестационарной матрицы A :

$$\frac{\partial}{\partial t}|C\rangle = A(t)|C\rangle, \quad (2.5)$$

где матрица A меняется во времени периодически, $A(t+T) = A(t)$.

Как решать уравнения, подобные уравнению (2.5)? Интуитивное решение — находить “мгновенные” собственные вектора и собственные значения матрицы $A(t)$, т. е. диагонализировать ее в фиксированные моменты времени (по аналогии с точной спектральной пропагацией, описанной в разделе 2.1.), является неверным. Главным образом потому, что собственные правые вектора матрицы $A(t)$ не являются решением уравнения (2.5) и не могут помочь это решение построить.

Правильным подходом является использование *теоремы Флоке* [15], согласно которой общее решение уравнения (2.5) может быть разложено по полному набору функций

$$|C_n(t)\rangle = |\varphi_n(t)\rangle e^{\Xi_n t}, \quad (2.6)$$

где Ξ_n не зависят от времени, а векторы $|\varphi_n(t)\rangle$ — периодические с периодом T . В начальный момент времени $t = t_0$ (далее полагаем $t_0 = 0$, если иное не оговорено специально) векторы $|\varphi_n(t)\rangle$ могут быть найдены путем решения уравнения

$$U(T)|\varphi_n(0)\rangle = e^{\Xi_n T}|\varphi_n(0)\rangle. \quad (2.7)$$

Уравнение (2.7), по-существу, является задачей на собственные числа и собственные вектора некоторой матрицы $U(T)$ — так называемого *пропагатора*. Таким образом, для отыскания решения уравнения (2.5) в виде (2.6) необходимо диагонализировать матрицу $U(T)$.

Определим формально пропагатор $U(t)$ для некоторого произвольного момента времени — это матрица, действие которой на вектор $|C(0)\rangle$ переводит его в вектор $|C(t)\rangle$:

$$|C(t)\rangle = U(t)|C(0)\rangle. \quad (2.8)$$

Тогда матрица $U(T)$ переводит начальный вектор на один период по времени T , т.е. $|C(T)\rangle = U(T)|C(0)\rangle$. Диагонализация матрицы² $U(T)$ дает набор собственных векторов $\{|\varphi_n^{(T)}\rangle, |\varphi_n^{(T)}\rangle\}_{n=1}^N$ и соответствующих собственных значений $\{\varepsilon_n\}_{n=1}^N$, где $\varepsilon_n = e^{\Xi_n T}$.

Собственные вектора матрицы $U(T)$ носят название векторов (состояний)

²Для краткости мы здесь опустили детали получения матрицы $U(T)$, которое подробно рассмотрено в приложении 3.3. .

Флоке и образуют полный дуальный базис

$$\langle \varphi_m^{(T)} | \varphi_n^{(T)} \rangle = \delta_{mn}. \quad (2.9)$$

Теперь для *любого* начального вектора $|C(0)\rangle$ мы можем найти его состояния в “стробоскопические моменты” времени $|C(kT)\rangle$, где $k = 1, 2, \dots$. Для этого воспользуемся процедурой точной спектральной пропации (см. раздел 2.1.):

$$|C(kT)\rangle = \sum_{n=1}^N C_n^{(0)} \varepsilon_n^k |\varphi_n^{(T)}\rangle, \quad (2.10)$$

$$C_n^{(0)} = \langle \varphi_n^{(T)} | C(0)\rangle.$$

Используя выражение для ε_n , уравнение (2.10) можно записать и для произвольного момента времени

$$|C(t)\rangle = \sum_{n=1}^N C_n^{(0)} e^{\Xi_n t} |\varphi_n(t)\rangle. \quad (2.11)$$

До сих пор мы предполагали, что начальный момент времени t_0 эволюции системы соответствовал $t_0 = 0$. Для стационарной матрицы A имеет значение только интервал времени эволюции, в то время как для случая $A(t_0 + T) = A(t_0)$, вообще говоря, не так. Начальный момент времени t_0 для начального условия $|C(0)\rangle$ означает, что на него действует матрица $A(t_0)$, которая явно зависит от $t_0 \in [0, T]$. Таким образом, выражение (2.11) может быть обобщено

$$|C(t_0 + t)\rangle = \sum_{n=1}^N C_n^{(t_0)} e^{\Xi_n t} |\varphi_n(t_0 + t)\rangle, \quad (2.12)$$

$$C_n^{(t_0)} = \langle \varphi_n(t_s) | C(0)\rangle.$$

По сравнению с (2.4), выражение (2.11) имеет ряд особенностей:

- зависимость от времени присутствует не только в осциллирующих членах вида $e^{\Xi_n t}$, но и в периодической зависимости векторов $|\varphi_n(t)\rangle$.
- коэффициенты разложения $C_n^{(t_s)}$ зависят от начального времени $t_0 \in [0, T]$. То есть, в зависимости от t_s , одно и то же начальное условие $|C(0)\rangle$ будет по разному интерферировать с Флоке-векторами.

Глава 3. Квантовая динамика когерентных систем

3.1. Динамика систем со стационарными гамильтонианами

Как уже было сказано ранее, динамика любой квантовой системы размерности¹ N определяется уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle, \quad (3.1)$$

где гамильтониан H — эрмитова матрица размера N . Конкретный вид гамильтониана определяется физическим смыслом задачи. В данном случае мы считаем гамильтониан стационарным, т.е. не зависящим от времени.

Состояние системы в момент времени t полностью определяется вектором состояния $|\psi(t)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \\ \vdots \\ \psi_N(t) \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

где $\psi_n(t)$ ($n = 1, \dots, N$) — комплексные числа.

Уравнение (3.1) является частным случаем уравнения (2.1) с $A = -iH$ (здесь и далее примем $\hbar = 1$). Поэтому, в соответствии с разделом 2.1., можно обозначить собственные вектора (состояния) матрицы H как $\{|a_n\rangle\}_{j=1}^N$, а ее собственные значения $E_n = i\lambda_n$. Заметим, что, поскольку матрица H эрмитова (представляет оператор полной энергии системы — физическую величину), собственные значения $\{E_n\}_{n=1}^N$ являются действительными числами. Исходя из физического смысла, они называются *энергиями* собственных состояний гамильтониана H .

Аналогично (2.1), знание набора $\{|a_n\rangle, E_n\}$ дает возможность найти состояние квантовой системы — решение уравнения (3.1) — в любой момент времени

¹То есть размерность вектора состояния, который полностью описывает замкнутую систему в выбранном базисе. Например, вектор состояния простой двухуровневой системы (*кубита*) можно записать как $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$, где a и b — комплексные числа, которые могут принимать любые значения, удовлетворяющие условию нормировки $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Можно сказать, что кубит с вероятностью $|a|^2$ находится в состоянии $|0\rangle = |\uparrow\rangle = (1, 0)^T$ (спин вверх) и с вероятностью $|b|^2$ в состоянии $|1\rangle = |\downarrow\rangle = (0, 1)^T$ (спин вниз).

t , используя спектральную пропагацию. А именно:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N C_n e^{-iE_n t} |a_n\rangle, \quad (3.3)$$

$$C_n = \langle a_n | \psi(0)\rangle.$$

Напомним, что левые вектора $\langle a_n |$ могут быть тривиальным образом получены из правых векторов, то есть $\langle a_n | = |a_n\rangle^\dagger$, поскольку гамильтониан H является эрмитовой матрицей.

Уравнение (3.1) гарантирует сохранение нормировки, то есть $\langle \psi(t) | \psi(t)\rangle = \langle \psi(0) | \psi(0)\rangle$. Другими словами, если выбрать начальный вектор $|\psi(0)\rangle$ так, что $\sum_{n=1}^N |\psi_n(0)|^2 = 1$, то эта нормировка будет сохраняться в ходе эволюции системы.

Практическое задание 2. Используя результат, полученный в упражнении 2 (см. раздел 1.1.4.), численным образом получить собственные вектора и собственные числа матрицы оператора \hat{H} размера $N = 1000$. Графически построить 1-й, 10-й и 100-й собственные векторы.

3.2. Динамика систем с периодическими во времени гамильтонианами

Динамика таких систем определяется уравнением Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H(t) |\psi\rangle, \quad (3.4)$$

где $H(t + T) = H(t)$ – эрмитова матрица.

Очевидно, что уравнение (3.4) является частным случаем уравнения (2.5) с $A(t) = -iH(t)$. Таким образом, все результаты, представленные в разделе 2.2. применимы и в данном случае. А именно, матрица $H(t)$ имеет Флоке-базис $\{|\varphi_n(t)\rangle\}_{n=1}^N$ и Флоке-спектр $\{\Xi_n\}_{n=1}^N$, где Ξ_n – так называемые *квазиэнергии*. Они имеют ту же размерность, что и энергии E_n в случае стационарного гамильтониана. Но, в отличие от последних, Ξ_n определены с точностью до $2\pi k/T$, $k = \pm 1, \pm 2, \dots$, так как подстановка $\tilde{\Xi}_n = \Xi_n + k\omega$ в выражение (2.11) оставляет его инвариантным. С математической точки зрения, это следует из того, что энергии находятся как собственные значения эрмитовой матрицы H , а квазиэнергии – как собственные значения унитарной матрицы пропагатора $U(t)$.

Таким образом, решением уравнения (3.4) является

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N C_n^{(0)} e^{-i\Xi_n t} |\varphi_n(t)\rangle \quad (3.5)$$

а в общем случае, для произвольного времени начала эволюции ($t_s \neq 0$):

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N C_n(t_s) e^{-i\Xi_n t} |\varphi_n(t_s + t)\rangle. \quad (3.6)$$

Практическое задание 3. Используя результат, полученный в упражнении 3 (см. раздел 1.2.), численным образом² получить Флоке-базис нестационарного гамильтониана. Проверить правильность выполнения задачи, используя знания о свойствах состояний Флоке и соответствующих им квазиэнергиях. Интегрируя полученные Флоке-состояния на периоде, подсчитать их усредненную по периоду среднюю энергию, используя выражения, представленные в разделе 3.3. . Упорядочить состояния Флоке (и соответствующие им собственные числа) в порядке возрастания их средней энергии.

3.3. Количественные характеристики

Приведем примеры некоторых количественных характеристик, позволяющих охарактеризовать состояние $|\varphi_n\rangle = |\varphi_n(t)\rangle$ в момент времени t :

- математическое ожидание \bar{A} соответствующего оператора \hat{A} в пространстве состояний $\{|\varphi_n\rangle\}_{n=1}^N$ вычисляется как $\bar{A} = \langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_n \rangle$.
- импульс состояния определяется как $p_n(t) = \langle \varphi_n | \hat{p} | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | -i\hbar \frac{\partial}{\partial \xi} | \varphi_n \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^* \frac{\partial}{\partial \xi} \varphi_n d\xi$, где ξ — соответствующая пространственная координата x, y , или z .
- кинетическая энергия состояния равна $K_n(t) = \langle \varphi_n | \frac{\hat{p}^2}{2} | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | -i\frac{\hbar}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} | \varphi_n \rangle = -\frac{\hbar^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^* \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \varphi_n d\xi$.
- для состояний $|\varphi_n(t)\rangle$, периодических во времени с периодом T , соответствующие характеристики могут быть усреднены по времени согласно правилу $\langle \bar{A} \rangle_T = \frac{1}{T} \int_0^T \langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_n \rangle dt$, где \hat{A} — соответствующий оператор, а

²В данном упражнении для численного интегрирования уравнения Шредингера достаточно использовать метод Рунге-Кутты 4-го порядка [16].

$\langle \bar{A} \rangle_T$ — среднее значение соответствующей величины (точнее, усредненное во времени математическое ожидание соответствующего оператора).

Упражнение 5. Для состояния квантовой системы, заданного в виде разложения по плоским волнам:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-N}^N \phi_n(t) e^{inx}, \quad (3.7)$$

найти $\langle \bar{p} \rangle_T$, $\langle \bar{p}^2 \rangle_T$ и $\langle \bar{K} \rangle_T$, где $\bar{A} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ — математическое ожидание соответствующего оператора.

Упражнение 6. Для нестационарного гамильтониана, заданного в Упражнении 3,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \cos(t)V(x) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [1 + \cos(t)]V(x), \quad (3.8)$$

$$V(x) = \sum_{k=-1}^1 C_k e^{ikx}, \quad C_0 = 0, \quad C_{\pm 1} = 1,$$

и записанного в базисе плоских волн, согласно решению Упражнения 2,

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-N}^N \phi_n(t) e^{inx}, \quad (3.9)$$

принимая $N = 100$:

- Найти численно базис стационарного гамильтониана \hat{H}_0 и преобразовать уравнение (3.8) к этому базису, пользуясь, в том числе, решением Упражнения 3.
- В базисе стационарного гамильтониана найти численно Флоке-состояния
- Для всех найденных состояний найти численно величины $\langle \bar{p} \rangle_T$, $\langle \bar{p}^2 \rangle_T$ и $\langle \bar{K} \rangle_T$, пользуясь, в том числе, результатами Упражнения 5.

Приложение А. Основные свойства матриц и операции над ними

Приведем некоторые основные операции над матрицами и их свойства [7, 8].

Сложение $A + B$ матриц $A_{m \times n} = (a_{ij})$ и $B_{m \times n} = (b_{ij})$ есть операция нахождения матрицы $C_{m \times n} = (c_{ij})$, где $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$ для всех $i = 1, m$ и $j = 1, n$. Сложение матриц обладает следующими свойствами:

- коммутативность: $A + B = B + A$;
- ассоциативность: $(A + B) + C = A + (B + C)$;
- сложение с нулевой матрицей: $A + \Theta = A$;
- существование противоположной матрицы: $A + (-A) = \Theta$.

Произведением AB матрицы $A_{m \times n} = (a_{ij})$ на матрицу $B_{n \times k} = (b_{ij})$ называется матрица $C_{m \times k} = (c_{ij})$, для которой каждый элемент c_{ij} равен сумме произведений соответствующих элементов i -й строки матрицы A на элементы j -го столбца матрицы B , $c_{ij} = \sum_{p=1}^n a_{ip}b_{pj}$. Свойства умножения матриц:

- ассоциативность: $(AB)C = A(BC)$;
- некоммутативность: в общем случае $AB \neq BA$;
- коммутативность при умножении на единичную матрицу: $A\mathbb{I} = \mathbb{I}A$;
- дистрибутивность: $(A + B)C = AC + BC$ и $A(B + C) = AB + AC$;
- ассоциативность и коммутативность относительно умножения на число λ : $(\lambda A)B = \lambda(AB) = A(\lambda B)$;

Некоторые свойства операций над матрицами:

- $A\mathbb{I} = \mathbb{I}A = A$, где \mathbb{I} – единичная матрица;
- $A\Theta = \Theta A = \Theta$, где Θ – нулевая матрица;
- для операции транспонирования характерно $(A^T)^T = A$;
- $(A + B)^T = A^T + B^T$;
- $(AB)^T = A^T B^T$;
- $(\lambda A)^T = \lambda A^T$, где λ – некоторое число.

Приложение Б. Генерация случайной эрмитовой матрицы

Генерация комплекснозначной матрицы A размера N состоит из следующих шагов:

- Генерация действительных и мнимых частей элементов $d_{mn} = b_{mn} + ic_{mn}$ матрицы D , где $b_{mn} \in \mathbb{R}$ и $c_{mn} \in \mathbb{R}$ – случайные переменные, распределенные согласно нормальному (Гауссову) распределению с единичной дисперсией. Средства генерации такой переменной есть практически в любом математическом пакете или библиотеке численных методов. Например, генераторы случайных чисел библиотеки VSL в составе MKL [11], функция *randn* в языке программирования MATLAB и т.п. Также для получения переменной, распределенной согласно нормальному закону, из случайных переменных, равномерно распределенных по единичному интервалу, можно воспользоваться преобразованием Бокса-Мюллера [12].
- Вычисление матрицы $A = (D + D^\dagger)/2$, где D^\dagger – матрица, эрмитово сопряженная матрице D .

Таким образом, мы получаем искомую случайную матрицу, которая является членом *гауссова унитарного ансамбля (GUE)* – ансамбля многих эрмитовых матриц, действительные и мнимые части элементов которых имеют гауссово распределение [13, 14]. Системы, которые описываются гауссовым унитарным ансамблем, лишены какой-либо симметрии – они неинвариантны относительно обращения времени (таким свойством обладают, например, системы во внешнем магнитном поле).

Плотность распределения собственных значений $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$ достаточно большой гауссовой случайной матрицы, нормированных на \sqrt{N} , описывается *полукруговым законом Вигнера*:

$$\mathcal{W}_{\text{sc}}(\lambda\sqrt{N}) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \sqrt{(4\sigma^2 - |\lambda|^2)_+}, \quad (0.10)$$

где σ^2 – второй момент распределения, а $(x)_+ = x$ для $x > 0$ и $(x)_+ = 0$ – в противоположном случае [13, 14].

При этом для членов GUE характерно следующее распределение межуровневых расстояний s (т.е. разницы ближайших собственных значений) – так называемое *распределение Вигнера-Дайсона*:

$$\mathcal{P}(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4}{\pi}s^2}. \quad (0.11)$$

Приложение В. Построение матрицы пропагатора

Напомним, что пропагатор $U(t)$ — это матрица, действие которой на вектор $|C(0)\rangle$ переводит его в вектор $|C(t)\rangle$, т.е. $|C(t)\rangle = U(t)|C(0)\rangle$. Поэтому, процедура численного построения матрицы пропагатора размера N состоит в следующем. Выбираем начальный вектор вида

$$|C(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (0.12)$$

то есть $c_1(0) = 1$, $c_k(0) = 0$, $k = 2, \dots, N$.

Численно решая уравнение (2.5) для начального вектора (0.12), то есть интегрируя уравнения до момента времени t , получаем вектор

$$|C(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{pmatrix}, \quad (0.13)$$

элементы которого теперь все отличны от нуля. Этот вектор и будет первой колонкой матрицы $U(t)$.

Аналогичным образом, выбирая начальный вектор $|C(t)\rangle = (010\dots 0)^T$ (т.е. $c_1(0) = 0$, $c_2(0) = 1$, $c_k(0) = 0$, $k = 3, \dots, N$) и решая численно уравнение (2.5), получим новый вектор $|C(t)\rangle$ — вторую колонку матрицы пропагатора. Продолжая таким образом³, заполняем всю матрицу пропагатора $U(t)$.

³Следует отметить, что пропация N различных начальных векторов $|C(t)\rangle$ — независима, а поэтому может быть реализована параллельно с использованием технологии Message Passing Interface (MPI).

Литература

- [1] Корнелл Э.А., Виман К.Э. Бозе-эйнштейновская конденсация в разреженном газе: первые 70 лет и несколько последних экспериментов // УФН. 2003. Т. 173. С. 1320.
- [2] Кеттерле В. Когда атомы ведут себя как волны. Бозе-эйнштейновская конденсация и атомный лазер // УФН. 2003. Т. 173. С. 1339.
- [3] Таран А. Квантовый барабан застучал в такт с кубитом // Membrana.Ru. 2010. <http://www.membrana.ru/particle/1992>
- [4] Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики // СПб.: Лань, 2004. — Р. 672.
- [5] Бутенин Н.В. Курс теоретической механики: в двух томах / Бутенин Н.В., Лунц Я.Л., Меркин Д.Р. // СПб.: Лань, 1998. — Р. 736.
- [6] Сивухин Д.В. Курс общей физики // М.: Наука, 2006. — Vol. 1. — Р. 792.
- [7] Курош А.Г. Курс высшей алгебры // 3-е издание. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1968. — Р. 431.
- [8] Воеводин В.В. Линейная алгебра // 2-е издание. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1980. — Р. 400.
- [9] Dirac, P. A. M. A new notation for quantum mechanics / Dirac, P. A. M. — Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 1939. — Vol. 35. — P. 416-418.
- [10] LAPACK – Linear Algebra PACKage. — <http://www.netlib.org/lapack/>
- [11] Reference Manual for Intel Math Kernel Library version 11.2. — https://software.intel.com/en-us/mkl_11.2_ref
- [12] Box, G. E. P. A Note on the Generation of Random Normal Deviates / Box, G. E. P. and Muller M. E. // The Annals of Mathematical Statistics. — 1958. — Vol. 29. — P. 610–611.
- [13] Crisanti A. Products of random matrices in statistical physics / Crisanti A., Paladin G. and Vulpiani A. // Springer-Verlag: Springer series in solid-state sciences, 1993. — Vol. 104. — P. 169.
- [14] Метя М. Л. Случайные матрицы / Перевод с англ. Н. В. Цилевич под ред. А. М. Вершика // М.: МЦНМО, 2012. — Р. 648.
- [15] Floquet, G. Sur les équations différentielles linéaires á coefficients périodiques / Floquet, G. — Annales de l'École Normale Supérieure, 1883. — Vol. 12. — P. 47–88.
- [16] Самарский А.А. Численные методы / А.А. Самарский, А.В. Гулькин // М.: Наука, 1989. — Р. 432.

Михаил Васильевич **Иванченко**
Татьяна Владимировна **Лаптева**
Сергей Вадимович **Денисов**

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
НЕСТАЦИОНАРНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ**

Учебно-методическое пособие

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования “Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского”.
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.