Первая цифра в нумерации задач соответствует номеру семестра, вторая – номеру недели.

1.03.1. Исследовать поведение частицы в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ -U_0, & 0 < x < a; \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

При $a = 1$ подобрать такое значение U_0, чтобы в яме было пять связанных состояний. Рассчитать энергии этих состояний, построить зависимость плотности вероятности распределения частицы от координаты для этих состояний.

При найденном значении U_0 исследовать поведение связанных состояний в зависимости от ширины ямы a. Уменьшая a, найти критические значения a_n, при которых из ямы выходят очередные уровни.

При $a = 1$ исследовать поведение связанных состояний в зависимости от глубины ямы U_0. Уменьшая глубину ямы, найти критические значения $(U_0)_c$, при которых из ямы выходят очередные уровни. Увеличивая U_0, сравнить значения энергетических уровней со спектром частицы в бесконечной потенциальной яме.

Сравнить полученные результаты с точным решением.

1.03.2. Для линейного осциллятора

$$U(x) = \frac{kx^2}{2}$$

найти энергетические уровни и волновые функции пяти нижних состояний. Построить зависимость плотности вероятности распределения частицы от координаты для этих состояний. Сравнить полученные результаты с точным решением.

Проанализировать влияние ангармонизма на энергетические уровни и волновые функции, рассмотрев потенциал

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} + gx^3, \quad g \ll k.$$

Построить график зависимости величины $E_0(g) - E_0(g = 0)$ от g, где E_0 – энергия основного состояния, и определить характер зависимости.

1.03.3. Исследовать поведение частицы в потенциале двух близких ям

$$U(x) = \begin{cases} -U_1, & 0 < x < a; \\ -U_2, & a + h < x < a + h + b; \\ 0, & x < 0, \quad a < x < a + h, \quad x > a + h + b. \end{cases}$$

Проанализировать зависимость энергетических уровней и волновых функций от глубины ям U_1 и U_2, ширины ям a и b, расстояния между ямами h, несимметрии ям.

Рассмотреть предельные случаи $U_1 \to 0$; $U_1 \to \infty$; $a \to 0$; $h \to 0$; $h \to \infty$, сравнить с соответствующими точными решениями.

1.06.1. Получить коммутационное соотношение для обобщенных координат и импульса:

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \frac{1}{\hbar}[\hat{p}, \hat{x}] = -i$$

1.06.2. Получить нормировочный множитель для функции основного состояния одномерного осциллятора:

$$\Psi_0 = Ae^{-Q^2/2}$$

1.06.3. Получить коммутационные соотношения для операторов рождения и уничтожения при квантовании поля смещений в струне:

$$a_k(t) = \sqrt{\frac{\rho\omega_k}{2\hbar}}\,Q_k(t) + i\frac{P_k(t)}{\sqrt{2\rho\omega_k\hbar}};$$

$$a_k^+(t) = \sqrt{\frac{\rho\omega_k}{2\hbar}}\,Q_{-k}(t) - i\frac{P_{-k}(t)}{\sqrt{2\rho\omega_k\hbar}}$$

1.08.1. Построить гамильтонову матрицу для системы из 10 узлов и 6 ферми-частиц, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t\sum_{i=1}^{10}(a_i^+a_{i+1} + a_i^+a_{i-1}) + U\sum_{i=1}^{10}n_i,$$

$t = 1$; $U = 2$; границы системы периодически замкнуты. Получить спектр системы.

При тех же условиях решить задачу для нулевых граничных условий.

1.08.2. Для системы из 6 узлов и 3 свободных ферми-частиц с гамильтонианом

$$H = -t\sum_{i=1}^{6}(a_i^+a_{i+1} + a_i^+a_{i-1})$$

построить гамильтонову матрицу и найти спектр системы. Сравнить спектр с точным аналитическим решением. Определить кратность вырождения уровней.

1.08.3. Найти энергии основного состояния и первых 4 возбужденных состояний в модели Хаббарда

$$H = -t\sum_{\langle ij\rangle,\sigma}a_{i\sigma}^+a_{j\sigma} + U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$

в зависимости от параметра U/t. Число узлов в системе $m = 8$, периодические граничные условия. Рассмотреть следующие случаи:

1) в системе 2 электрона с противоположными спинами;

2) в системе 2 электрона с одинаковыми спинами;

3) в системе 2 электрона со спином вверх и 1 электрон со спином вниз;

4) в системе 2 электрона со спином вверх и 2 электрона со спином вниз.

При тех же условиях сделать замену $t \to -t$. Сравнить спектры.

1.08.4. Построить гамильтонову матрицу для системы из 8 узлов с периодическими граничными условиями, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t\sum_{\langle ij\rangle,\sigma}a_{i\sigma}^+a_{j\sigma} + U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} + V\sum_{\langle ij\rangle,\sigma\sigma'}n_{i\sigma}n_{j\sigma'}.$$

Рассмотреть ситуацию, когда в системе 4 электрона со спином вверх и 4 электрона со спином вниз. Рассчитать зависимость энергии основного состояния, а также корреляторов $\langle a^+_{i\sigma} a_{i+1,\sigma}\rangle_0 \equiv \langle\varphi_0|a^+_{i\sigma} a_{i+1,\sigma}|\varphi_0\rangle$, $\langle n_{i\sigma} n_{i+1,\sigma}\rangle_0 \equiv$ $\equiv \langle\varphi_0|n_{i\sigma} n_{i+1,\sigma}|\varphi_0\rangle$, $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}\rangle_0 \equiv \langle\varphi_0|n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}|\varphi_0\rangle$, где φ_0 – собственная функция гамильтониана, отвечающая основному состоянию, в зависимости от параметров U/t и V/t. Построить трехмерные графики этих зависимостей (по осям x и y отложить параметры U/t и V/t, по оси z – рассчитанные значения энергии и корреляторов).

1.08.5. Построить узельный базис для системы из 8 узлов и произвольным числом частиц с ферми-статистикой без учета спина. Сгруппировать базисные состояния в блоки, каждый из которых отвечает определенному числу частиц. В этом базисе построить гамильтонову матрицу для системы с периодическими граничными условиями, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t\sum_i (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U\sum_i n_i,$$

$t = 1$; $U = 2$. Нарисовать портрет матрицы. Убедиться, что матрица имеет блочно-диагональный вид.

1.09.1. Доказать операторное тождество:

$$e^{-i\varphi a^+_{i\sigma} a_{i\sigma}} a_{i\sigma} e^{i\varphi a^+_{i\sigma} a_{i\sigma}} = a_{i\sigma} e^{i\varphi}$$

1.10.1. Построить гамильтонову матрицу для системы из 6 узлов и 3 бозе-частиц, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t\sum_{i=1}^{6} (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U\sum_{i=1}^{6} n_i,$$

$t = 1$; $U = 2$; границы системы периодически замкнуты. Получить спектр системы.

При тех же условиях решить задачу для нулевых граничных условий. Сравнить портреты и спектры матриц.

Ввести ограничение на заполнение узлов $n_{max} = 2$. Построить и диагонализовать матрицу гамильтониана для периодических и нулевых граничных условий, сравнить спектры и портреты матриц.

1.10.2. Для системы из 6 узлов и 3 свободных бозе-частиц с гамильтонианом

$$H = -t\sum_{i=1}^{6} (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1})$$

построить гамильтонову матрицу и найти спектр системы. Сравнить спектр с точным аналитическим решением. Определить кратность вырождения уровней.

При тех же условиях ввести ограничение на заполнение узлов $n_{max} = 2$ и получить спектр системы. Объяснить отличие этого спектра от спектра системы без ограничения на заполнение узлов.

1.10.3. Построить узельный базис для системы из 8 узлов и с произвольным числом частиц с бозе-статистикой, максимальное заполнения на каждом узле $n_{max} = 2$. Сгруппировать базисные состояния в блоки, каждый из которых отвечает определенному числу частиц. В этом базисе построить гамильтонову матрицу для системы с периодическими граничными условиями, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t\sum_i (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U\sum_i n_i,$$

$t = 1$; $U = 2$. Нарисовать портрет матрицы. Убедиться, что матрица имеет блочно-диагональный вид.

1.10.4. Построить гамильтонову матрицу для системы из 6 узлов и 4 частиц, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t\sum_{i=1}^{6}(a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U\sum_{i=1}^{6} n_i,$$

$t = 1$; $U = 2$; границы системы периодически замкнуты. Рассмотреть следующие случаи:

1) частицы с ферми-статистикой без учета спина;

2) частицы с бозе-статистикой с ограничением на заполнение узлов $n_{max} = 1$.

Рассчитать и сравнить спектры двух систем.

При тех же условиях рассмотреть ситуацию, когда в системах 3 частицы. Сравнить спектры.

1.10.5. Построить гамильтонову матрицу для системы из 6 узлов, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t\sum_{i=1}^{6}(a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U\sum_{i=1}^{6} n_i(n_i - 1),$$

и рассчитать спектр системы для случаев, когда в системе 2; 3; 4 или 5 бозонов, в зависимости от параметра U/t. Построить графики зависимостей. Сравнить результаты с аналитическим решением в случае свободных частиц ($U = 0$).

1.10.6. Построить гамильтонову матрицу для системы из 8 узлов с периодическими граничными условиями, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t\sum_{\langle ij\rangle} a_i^+ a_j + U\sum_i n_i(n_i - 1) + V\sum_{\langle ij\rangle} n_i n_j.$$

Рассмотреть ситуацию, когда в системе 4 бозе-частицы. Рассчитать зависимость энергии основного состояния, а также корреляторов $\langle a_i^+ a_{i+1}\rangle_0 \equiv \langle\varphi_0|a_i^+ a_{i+1}|\varphi_0\rangle$, $\langle n_i n_{i+1}\rangle_0 \equiv \langle\varphi_0|n_i n_{i+1}|\varphi_0\rangle$, $\langle(n_i)^2\rangle_0 \equiv \langle\varphi_0|(n_i)^2|\varphi_0\rangle$, где φ_0 – собственная функция гамильтониана, отвечающая основному состоянию, в зависимости от параметров U/t и V/t. Построить трехмерные графики этих зависимостей (по осям x и y отложить параметры U/t и V/t, по оси z – рассчитанные значения энергии и корреляторов).

1.11.1. Доказать операторное тождество:

$$e^{-i\varphi a_i^+ a_i} a_i e^{i\varphi a_i^+ a_i} = a_i e^{i\varphi}$$

1.12.1. Получить коммутационные соотношения для компонент оператора спина:

$$\left[S_j^X, S_{j'}^Y\right]; \quad \left[S_j^Z, S_{j'}^X\right]; \; \left[S_j^Y, S_{j'}^Z\right]$$

1.12.2. Получить коммутационное соотношение:

$$[S^\alpha, S^2]$$

1.12.3. Записать спиновые модели в терминах повышающих и понижающих операторов.

1.13.1. Для изотропной антиферромагнитной модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2}J\sum_{\langle ij\rangle}\vec{S}_i\vec{S}_j - \vec{H}\sum_i \vec{S}_i,$$

$J = -1$; число узлов $N_a = 6$; максимальная проекция спина на узле $S^Z = 3/2$; периодические граничные условия, рассчитать зависимость средней намагниченности основного и двух нижних возбужденных состояний от величины приложенного вдоль оси z внешнего магнитного поля H. Построить графики зависимостей.

1.13.2. Для изотропной модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2}J\sum_{\langle ij\rangle}\vec{S}_i\vec{S}_j - \vec{H}\sum_i \vec{S}_i$$

число узлов $N_a = 6$; максимальная проекция спина на узле $S^Z = 3/2$; периодические граничные условия, рассчитать зависимость энергии основного состояния и проекции магнитного момента на ось z от величины внешнего магнитного поля $\vec{H} = \{H_x, 0{,}0\}$, приложенного вдоль оси x, в интервале
$H_x = 0 \div 5|J|$. Рассмотреть случаи $J = 1$ и $J = -1$. Построить графики зависимостей. Сравнить спектр системы со спектром из задачи 7.6.

1.13.3. Для изотропной антиферромагнитной модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2}J\sum_{\langle ij\rangle}\vec{S}_i\vec{S}_j - \vec{H}\sum_i \vec{S}_i$$

$J = -1$; $\vec{H} = \{0{,}0, H_z\}$, $H_z = 0.1$; число узлов $N_a = 8$; максимальная проекция спина на узле $S^Z = 1/2$; периодические граничные условия, рассчитать коррелятор $\langle S_i^Z S_j^Z\rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | S_i^Z S_j^Z | \varphi_0\rangle$, где φ_0 – собственная функция гамильтониана, отвечающая основному состоянию, в зависимости от $|i - j|$. Построить график зависимости.

При тех же условиях совершить переход от антиферромагнитной модели к ферромагнитной, т.е. провести расчеты для значений J от -1 до $+1$ с шагом 0.25 и построить все зависимости коррелятора $\langle S_i^Z S_j^Z\rangle_0$ на одном графике. Проанализировать результат.

1.13.4. Для изотропной ферромагнитной модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2}J\sum_{\langle ij\rangle}\vec{S}_i\vec{S}_j - \vec{H}\sum_i \vec{S}_i,$$

$J = 1$; $\vec{H} = \{0{,}0, H_z\}$, $H_z = 0.1$; число узлов $N_a = 8$; максимальная проекция спина на узле $S^Z = 1/2$; периодические граничные условия, рассчитать коррелятор $\langle S_i^Z S_j^Z\rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | S_i^Z S_j^Z | \varphi_0\rangle$, где φ_0 – собственная функция гамильтониана, отвечающая основному состоянию, в зависимости от $|i - j|$. Построить график зависимости.

При тех же условиях провести расчеты для различных значений H^Z, и построить все зависимости коррелятора $\langle S_i^Z S_j^Z\rangle_0$ на одном графике. Проанализировать результат.

1.14.1. Доказать, что если $\left[e^{i\vec{k}\vec{R}}, H\right] = 0$ для произвольного вектора трансляции $\vec{R}$, то и $\left[\vec{k}, H\right] = 0$, и наоборот.

1.14.2. Получить матрицу гамильтониана

$$H = -t\sum_{i=1}^{4}(a_i^{+}a_{i+1} + a_{i+1}^{+}a_i) + \frac{U}{2}\sum_{i=1}^{4}n_i(n_i - 1)$$

в представлении чисел заполнения, найти ее спектр. Представить матрицу H в блочно-диагональном виде в базисе, собственном для оператора трансляции, диагонализовать по отдельности полученные блоки. Сравнить спектр $E(k)$ со спектром, полученным в узельном базисе.