МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра физики частиц и космологии

Факторизация гамильтонианов в некоторых задачах квантовой механики

Курсовая работа
студента 2 курса, 213 группы
Лысухиной Анастасии Владимировны

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, профессор
Белокуров Владимир Викторович

Москва
2015

Содержание

1. Введение

Уравнение Шрёдингера представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка в координатном представлении. Точное решение уравнения Шрёдингера может быть найдено лишь в сравнительно небольшом числе простейших случаев. Большинство задач квантовой механики приводит к слишком сложным уравнениям, которые не могут быть решены аналитически.

Однако в ряде случаев решения уравнения Шрёдингера можно найти, решая дифференциальные уравнения первого порядка. Для этого гамильтониан частицы факторизуют. Идея факторизовать гамильтониан идет от хорошо известного решения задачи гармонического осциллятора. По аналогии с гармоническим осциллятором, рассмотрим метод факторизации гамильтонианов для упрощения решений некоторых задач квантовой механики.

2. Гармонический осциллятор

Рассмотрим гамильтониан, то есть полную энергию частицы, с потенциальной энергией, квадратично зависящей от координат.

$$H = \frac{1}{2}P^2 + \frac{1}{2}Q^2 \tag{1}$$

Найдем собственные значения энергии осциллятора. Гамильтониан можно представить в виде произведения двух взаимно эрмитово сопряженных операторов, откуда следует, что все собственные значения гамильтониана не отрицательны.

$$H = a^+a^- + \frac{1}{2} \tag{2}$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP), \quad a^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \tag{3}$$

Их коммутаторы равны

$$[a^-, a^+] = 1, \quad [a^-, H] = a^-, \quad [a^+, H] = -a^+ \tag{4}$$

Построенная алгебра имеет большое значение и называется алгеброй Гейзенберга.

Найдем собственные значения оператора a^+a^-. Все собственные значения – неотрицательные.

$$\left(H - \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(E_n - \frac{1}{2}\right)\psi_n$$

$$a^+\left(H - \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(E_n - \frac{1}{2}\right)a^+\psi_n$$

$$a^+(a^-a^+ - 1)\psi_n = \left(E_n - \frac{1}{2}\right)a^+\psi_n$$

$$\left(H - \frac{1}{2}\right)a^+\psi_n = \left(E_n + \frac{1}{2}\right)a^+\psi_n \tag{5}$$

Аналогично

$$\left(H - \frac{1}{2}\right)a^-\psi_n = (E_n - \frac{1}{2})a^-\psi_n \tag{6}$$

Так как энергия повышается на одинаковые значения (уровни эквидистантны), можно рассматривать разные уровни энергии осциллятора как стандартные возбуждения, а повышение и понижение энергии на одну и ту же величину как рождение возбуждения. Операторы a^+ и a^- называют операторами рождения и уничтожения. Таким образом действуя на собственную функцию ψ_n оператором a^+ получаем собственную функцию ψ_{n+1} с собственным значением n+1. При последовательном действии оператора a^- на собственные функции получим собственную функцию ψ_0 с собственным значением равным нулю

$$a^+a^-\psi_0 = 0 \cdot \psi_0 \tag{7}$$

Из соотношения $a^-\psi_0 = 0$ найдем ψ_0

$$\psi_0 = A_0 exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \tag{8}$$

Где A_0 - константа, которую можно найти из условия нормировки

$$A_0^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} exp\left(-x^2\right) dx = 1$$

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \tag{9}$$

При n-кратном применении оператора a^+ к функции ψ_0 можно получить выражение для ψ_n (см. [1])

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \tag{10}$$

где H_n -полином Эрмита.

Таким образом, с учетом (5) и (6) мы нашли все собственные функции оператора a^+a^-. Собственные значения энергии гармонического осциллятора равны

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right),\ n = 0, 1, 2 \ldots \tag{11}$$

3. Некоторые общие соотношения при факторизации гамильтониана

Рассмотрим случай, когда гамильтониан можно факторизовать следующим образом

$$2H = b^+b^-$$
$$b^+ = -\frac{d}{dx} + f(x), \quad b^- = \frac{d}{dx} + f(x) \tag{12}$$

В этом случае гамильтониан будет равен

$$2H = -\frac{d^2}{dx^2} + f^2(x) - f'(x) \tag{13}$$

Введем обозначение

$$2H = H' \tag{14}$$

Далее будем вводить новые элементы как коммутаторы уже найденных операторов, пока не найдем операторов, которые будут коммутировать друг с другом. Наша задача выразить коммутаторы через известные операторы, чтобы получить замкнутую систему, аналогичную алгебре Гейзенберга для гармонического осциллятора.

$$[b^-, b^+] = 2f'(x) \tag{15}$$

$$[b^+, H'] = -2f(x)f'(x) + 2f''(x) + 2f'(x)\frac{d}{dx} \tag{16}$$

$$[b^-, H'] = 2f'(x)\frac{d}{dx} + 2f'(x)f(x) \tag{17}$$

Из этого видно, что коммутатор $[b^-, b^+]$ и разность коммутаторов $[b^-, H'] - [b^+, H']$ не зависят от оператора дифференцирования.

$$[b^-, H'] - [b^+, H'] = 2f''(x) - 2f(x)f'(x) - 2f'(x)f(x) \tag{18}$$

Можно подобрать такие операторы f(x), что удастся выразить разность коммутаторов $[b^-, H'] - [b^+, H']$ через коммутатор $[b^-, b^+]$. Рассмотрим конкретный пример.

4. Осциллятор Морса

Рассмотрим случай, когда оператор f(x) имеет вид

$$f(x) = -e^{-\alpha x}, \quad \alpha = const > 0 \tag{19}$$

Тогда операторы b^+, b^- примут вид

$$b^+ = -\frac{d}{dx} - e^{-\alpha x}, \quad b^- = \frac{d}{dx} - e^{-\alpha x} \tag{20}$$

И гамильтониан будет равен

$$2H = b^+b^- = -\frac{d^2}{dx^2} + e^{-2\alpha x} - \alpha e^{-\alpha x} \tag{21}$$

Этот гамильтониан соответствует частице, движущейся в потенциале Морса. Известно [1], что при отрицательных значениях энергий спектр потенциала Морса дискретен и имеет конечное число уровней, в то время как при энегриях больших нуля, спектр сплошной. Мы можем найти собственную функцию, отвечающую нулевому собственному значению. В самом деле

$$b^+b^-\psi_0 = 0 \tag{22}$$

$$b^-\psi_0 = 0$$

$$\psi_0 = A_0 exp\left(-\frac{1}{\alpha}e^{-\alpha x}\right) \tag{23}$$

Теперь попробуем найти цепочку коммутаторов, которая приводит к коммутирующим операторам. Найдем коммутатор $[b^-, b^+]$

$$[b^-, b^+] = 2\alpha e^{-\alpha x} \tag{24}$$

Введем обозначения

$$2H = H', \quad W = e^{-\alpha x} \tag{25}$$

Как мы увидим дальше, остальные коммутаторы получится выразить через оператор W. Для потенциала Морса коммутаторы, найденные в пункте 3 имеют вид

$$[b^+, H'] = 2\alpha e^{-2\alpha x} - 2\alpha^2 e^{-\alpha x} + 2\alpha e^{-\alpha x}\frac{d}{dx} = -2\alpha W b^+ - 2\alpha^2 W$$

$$[b^-, H'] = 2\alpha e^{-\alpha x}\frac{d}{dx} - 2\alpha e^{-2\alpha x} = 2\alpha W b^-$$

$$[b^-, H'] - [b^+, H'] = -4\alpha e^{-2\alpha x} + 2\alpha^2 e^{-\alpha x} = -4\alpha W^2 + 2\alpha^2 W \tag{26}$$

Таким образом оператор $[b^-, H'] - [b^+, H']$ коммутирует с оператором $[b^-, b^+]$

$$[[b^-, H'] - [b^+, H'], [b^-, b^+]] = [-4\alpha W^2 + 2\alpha^2 W, 2\alpha W] = 0 \tag{27}$$

Так как операторы коммутируют, то можно построить новую алгебру, отличную от алгебры Гейзенберга, которая является разрешимой и нильпотентной. Действительно мы строили новые операторы из двух основных b^+, b^- как коммутаторы двух этих операторов, до тех пор как один из коммутаторов не обращался в ноль.

В некоторых случаях при удачной замене операторов удаётся найти не только собственную функцию, отвечающую нулевому значению, но и остальные собственные функции и энергии осциллятора. Например в потенциале Калоджеро.

5. Потенциал Калоджеро

Рассмотрим вырожденный случай потенциала Калоджеро с одной спененью свободы:

$$b_\alpha^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dx} + x + \alpha x^{-1}\right), \quad b_\alpha^- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dx} + x + \alpha x^{-1}\right) \tag{28}$$

Гамильтониан задаётся ввиде

$$H = b_\alpha^+ b_\alpha^- + \frac{1}{2} - \alpha = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + 2x^{-2}\right) \tag{29}$$

Где $\alpha = -2;\ 1$. Операторы не образуют алгебру Гейзенберга, как для гармонического осциллятора. Однако, существуют операторы B^+, B^-,

$$B^+ = b_\alpha^+ b_{-\alpha}^+ = \frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - 2x^{-2} - 2x\frac{d}{dx} - 1\right) \tag{30}$$

$$B^- = b_\alpha^- b_{-\alpha}^- = \frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - 2x^{-2} + 2x\frac{d}{dx} + 1\right) \tag{31}$$

которые удовлетворяют соотношению [2]:

$$[B^\pm, H] = \mp 2B^\pm \tag{32}$$

То есть образуют алгберу, похожую на алгебру гармонического осциллятора. С учетом

$$b_\alpha^- \psi_0(x) = 0 \tag{33}$$

собственная функция, отвечающая нулевому значению энергии равна

$$\psi_0(x) = x^{-\alpha} e^{-\frac{x^2}{2}} \tag{34}$$

Тогда в соответсвии с $\psi_n = (B^+)^n \psi_0$ можно найти остальные собственные функции и собственные значения энергии

$$\psi_0^{(-2)}(x) = P_{2n+2}(x) e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad E_n = \frac{5}{2} + 2n \tag{35}$$

где полином P_{2n+2} содержит только чётные степени x.

$$\psi_0^{(1)}(x) = (x^{-1} + P_{2n-1}(x)) e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad E_n = -\frac{1}{2} + 2n \tag{36}$$

где полином $P_{2n-1}(x)$ содержит только нечётные степени x.

Уровни энергии потенциала Калоджеро эквидистантны как и у гармонического осциллятора. Интересно посмотреть, возможно ли благодаря выбору другого начального состояния придти от задачи на потенциал Калоджеро к задаче гармонического осциллятора.

6. Осциллятор со степенной ангармоничностью

Расмотрим потенциалы со степенной зависимостью, степень которых не привышает 4. Для того чтобы было возможно факторизовать такой гамильтониан, необходимо, чтобы коэффициенты при степенях x были взаимосвязаны. Например:

Рассмотрим гамильтонианы, которые можно представить в виде произведения двух операторов следующего вида

$$b^+ = -\frac{d}{dx} + \alpha x + \beta x^2, \quad b^- = \frac{d}{dx} + \alpha x + \beta x^2 \tag{37}$$

Следовательно, гамильтониан будет равен

$$2H = b^+b^- = -\frac{d^2}{dx^2} + \alpha^2 x^2 + 2\alpha\beta x^3 + \beta^2 x^4 - \alpha - 2\beta x \tag{38}$$

Рассмотрим случай, когда $\alpha = \beta = 1$. Тогда

$$2H = b^+b^- = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - 2x + 2x^3 + x^4 - 1 \tag{39}$$

Введем обозначения

$$2H = H', \quad W = x \tag{40}$$

Можно выразить следующие коммутаторы через W и b^+, b^-, как было сделано для потенциала Морса

$$[b^-, b^+] = 2 + 4x \tag{41}$$

$$[b^+, H'] = -4x^3 - 6x^2 - 2x + 4 + 2\frac{d}{dx} + 4x\frac{d}{dx} = 4 - 4xb^+ - 2b^+ \tag{42}$$

$$[b^-, H'] = 4x^3 + 6x^2 + 2x + 2\frac{d}{dx} + 4x\frac{d}{dx} = 4xb^- + 2b^- \tag{43}$$

Тогда

$$[b^-, H'] - [b^+, H'] = 8x^3 + 12x^2 + 4x - 4 = 8x^3 + 12x^2 + 4x - 4 \tag{44}$$

И мы получаем замкнутую систему, так как два оператора коммутируют

$$[[b^-, H'] - [b^+, H'], [b^-, b^+]] = [8x^3 + 12x^2 + 4x - 4, 2 + 4x] = 0 \tag{45}$$

Таким образом мы получили новую алгберу, которую можно изучать дальше. Она как и в случае потенциала Морса будет разрешимой или нильпотентной.

Из условия $b^-\psi_0 = 0$ найдем собственную функцию ψ_0

$$\psi_0 = A_0 exp\left(-\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3}\right) \tag{46}$$

7. Двойственные потенциалы

Можно показать что, если известна собственная функция частицы основного состояния, то мы знаем потенциал частицы [4]. Действительно

$$H_1\psi_0(x) = -\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + U_1(x)\psi_0(x) = 0 \tag{47}$$

$$U_1(x) = \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} \tag{48}$$

Тогда гамильтониан можно факторизовать так

$$H_1 = b^+b^-, \quad b^- = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{d}{dx} + f(x), \quad b^+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{d}{dx} + f(x) \tag{49}$$

Таким образом потенциал $U_1(x)$ равен

$$U_1(x) = f^2(x) - \frac{1}{\sqrt{2}} f'(x) \tag{50}$$

и

$$f(x) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \tag{51}$$

Теперь рассмотрим другой гамильтониан заданный в виде $H_2 = b^- b^+$

$$H_2 = -\frac{d^2}{dx^2} + U_2(x), \quad U_2(x) = f^2(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} f'(x) \tag{52}$$

Потенциалы $H_1,\ H_2$ будем называть двойственными потенциалами. Можно показать, что собственные функции операторов $H_1,\ H_2$ взаимосвязаны [4]

$$E_n^{(2)} = E_{n+1}^{(1)}, \quad E_0^{(1)} = 0, \tag{53}$$

$$\psi_n^{(2)} = (E_{n+1}^{(1)})^{-1/2}\ b^- \psi_{n+1}^{(1)}, \tag{54}$$

$$\psi_{n+1}^{(1)} = (E_n^{(2)})^{-1/2}\ b^+ \psi_n^{(2)}, \tag{55}$$

Интересно, что двойственные гамильтонианы связаны суперсимметрией. Они описываются единым образом - матричным гамильтонианом

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} \tag{56}$$

Возникает дополнительная симметрия, включающая коммутаторы и антикоммутаторы. Это есть объект изучения суперсимметрии. Можно ввести матрицы рождения и уничтожения

$$Q^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ b^- & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^+ = \begin{pmatrix} 0 & b^+ \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{57}$$

образующие замкнутую супералгебру

$$[H, Q^-] = [H, Q^+] = 0, \quad \{Q^-, Q^+\} = H, \quad \{Q^+, Q^+\} = \{Q^-, Q^-\} = 0. \tag{58}$$

8. Заключение

В работе было рассмотрено решение нескольких задач квантовой механики с помощью факторизации гамильтониана. Этот подход позволил упростить решение задачи о квантовом гармоническом осцилляторе и найти собственные значения и функции в одномерном случае потенциала Калоджеро.

Кроме того, в задачах со степенной ангармоничностью и потенциалом Морса удалось найти нулевые собственные функции и построить новые нильпотентные и разрешимые алгебры. Возможно, при дальнейшем анализе алгебр удастся узнать больше информации об энергетических спектрах разобранных гамильтонианов.

9. Дополнение

Опр. Алгебра Ли g называется нильпотентной,если найдется такое натуральное N, что для любого набора $x_1, \ldots, x_N \in g$ выполнено $[x_1, [x_2, \ldots [x_{N-1}, x_N] \ldots]] = 0$.

$$L \supseteq L^1 \supseteq L^2 \supseteq \ldots; \quad L^0 = L,\ L^1 = [L^0, L],\ L^2 = [L^1, L], \ldots,\ L^k = [L^{k-1}, L],\ L^k = 0$$

Опр. Производным рядом алгебры Ли g называется цепочка идеалов $g = L^0 g \supseteq L^1 g \supseteq \ldots$, определяемая индуктивно как $D^k g = [D^{k-1}g, D^{k-1}g]$. Алгебра Ли g называется разрешимой, если найдется такое натуральное N, что $L^N g = 0$.

$$L \supseteq L^1 \supseteq L^2 \supseteq \ldots; \quad L^k = [L^{k-1}, L^{k-1}],\ L^k = 0$$

10. Список литературы

[1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика(нерелятивистская теория). - 4-е изд. испр. - М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1989, 768 с.

[2] V.V.Belokurov, E.T.Shavgulidze A quantum mechanical model of «dark matter», 2014

[3] З.Флюгге Задачи по квантовой механике том1, издательство «Мир» Москва, 1974

[4] F.Cooper, A.Khare, U.Sukhatme Supersymmetry and Quantum Mechanics, 2008